

## WS 製品向け材料の MI 活用による開発の迅速化

野崎 勉<sup>\*1</sup>, 菊池 暁<sup>\*2</sup>

### Utilization of MI to Speed Up Material Development for WS Products

Tsutomu Nozaki<sup>\*1</sup>, Akira Kikuchi<sup>\*2</sup>

#### 要旨

近年、2050年カーボンニュートラルなど地球環境保護への関心の高まりを背景に試作レスでの材料設計の必要性は急速に高まってきている。また、材料メーカーの相次ぐ事業撤退や事業縮小などの影響によりポリマーの総生産量も減少傾向にあるため、状況に合わせて限られたポリマーを柔軟に切り替えることも必要になっている。

しかし、現行技術ではトライ&エラーの試作検討を必要とするため切替に膨大な工数や材料ロスが発生することが課題になっている。

本論文では独自の技術によりポリマーの特性を正確に把握し、切替が容易にできるポリマーの組み合わせを算出することにより、シミュレーションによる材料設計精度を向上した。

それにより材料設計リードタイムの短縮、試作ロスの低減を実現した。

#### Abstract

The need for material design without prototyping has been rapidly increasing in recent years, due to the growing interest in protecting the global environment, such as carbon neutrality by 2050. In addition, the total production volume of polymers is on a downward trend due to the effects of successive business withdrawals or downsizings by material manufacturers, so it has become necessary to switch flexibly among a limited number of polymers according to the situation.

However, the current technology requires trial-and-error prototyping studies, which leads to the problem of a huge number of man-hours and material loss when switching polymers.

In this paper, we improved the accuracy of material design with simulation that accurately grasps the properties of polymers and calculates combinations of polymers that can be easily switched, using original technology.

As a result, we were able to shorten the material design lead time and reduce prototype losses.

## 1. はじめに

ゴム製品を生産するメーカーにおいて、材料を開発するため試作が必要となり、時間や材料ロスが発生している。図-1に示すように豊田合成では材料DXによりこのロスを低減するための取り組みを実施しており、2021年に確立された加硫シミュレーション<sup>1)</sup>、本論文で報告するポリマー特性予測技術、さらに発展させた様々なシミュレーション技術を用いることで完全試作レスを目標として技術開発をしている。

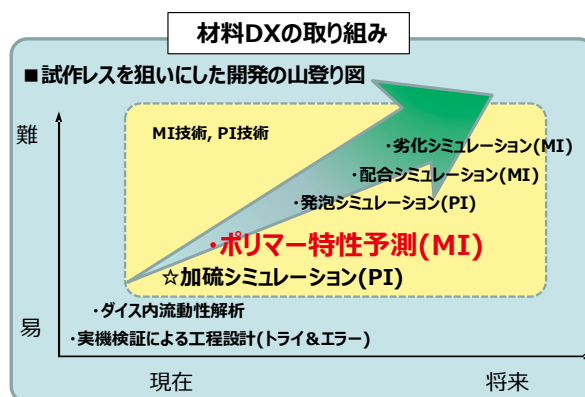


図-1 豊田合成の材料DXの取り組み

\*1 材料技術部 ゴム材料技術室

\*2 材料技術部 材料分析室

## 2. ゴム材料設計の改善

### 2-1. WS 製品について

ウェザーストリップ（以下 WS）は豊田合成の主力製品のひとつであり、自動車のドアや窓の隙間をシールし、外部から雨風、騒音の侵入を防ぐ役割がある製品であり、弾性、クッション性、耐候性などの性質が必要なため複数のゴム材料を組み合わせて機能を確保している（図-2）。

またその性質から多くの場合に EPDM ゴムを使用し、その使用量は豊田合成全体の約 90% を占める。

多くの WS 製品が押出成形により製造され、複雑な断面形状を精度よく再現する必要があるため、使用する材料については完成製品の特性を満足するだけでなく、安定して加工しやすい材料であることも要求される。

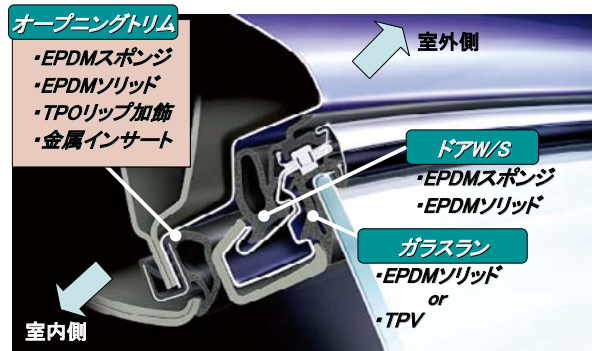


図-2 WS 製品

### 2-2. EPDM について

エチレン・プロピレンゴムの略称であり、ポリエチレンの結晶性をプロピレンの共重合で乱すことによりゴム弾性を発現させた合成ゴムである。

エチレン、プロピレン、ジエン（ENB）の3成分で構成される（図-3）。

ポリマー主鎖内に2重結合を有しないため優れた耐熱性、耐候性、耐オゾン性の性質を持ち、豊田合成ではWS事業本部を中心に様々な製品群で使用されている。

ポリマーを特徴付ける情報として一般的にはムーニー粘度、ジエン（ENB）含有量、エチレン含有量などがある。

エチレン（E）／プロピレン（P）／ジエン（D）の共重合体

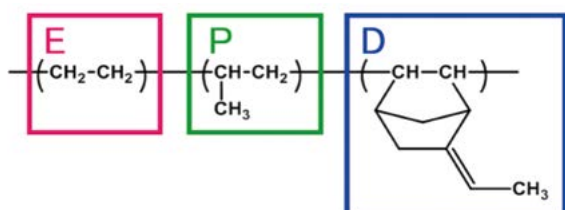


図-3 EPDM 組成

### 2-3. ゴム配合設計について

ゴム材料は配合の中核となるゴムポリマーと補強剤としてのカーボンブラック、製品として加工するために添加するオイルや助剤、架橋構造を形成するためのイオウ、加硫促進剤など様々な原材料をミキサーでせん断をかけながら混ぜ合わせることでコンパウンドと呼ばれる材料を製造しさらに加熱することにより、加硫ゴムとなる（図-4）。

加硫ゴムの特性は各原材料の種類や比率、分散状態、加熱度合いなどによって決定し、シミュレーションで特性を予測することは非常に困難である。



図-4 ゴム配合の考え方

### 2-4. ゴム配合シミュレーションについて

グッドイヤーによりゴムの加硫反応とゴム材料が発見されて以来、身の回りに様々なゴム製品が開発され、その特性に合わせてゴム材料技術者が配合検討をしてきた。

しかしこれまでに精度の高いシミュレーションを実現できた事例はなく、過去の実測データを引用して疑似的なシミュレーションをするにとどまっている。

理由として下記のことが考えられる。

- ①基本的に固体である複数の原材料にせん断を掛けて破壊させながら分散させるため、完全に同じ原材料を使用してもミキサーのスケールや種類、プロセスによって完成品の性質が変化するため
  - ②基本的に熱に反応する架橋剤を配合しているため、製造プロセスの熱に対して敏感で、温度条件次第で異なる性質になるため
  - ③原材料特に EPDM ポリマーについてはカタログに記載されている情報が不十分で特性を正確に定量化するのが困難
- ②については加硫シミュレーションにより製品の熱履歴を制御することで解決している<sup>1)</sup>。  
③について問題を解決するため特に寄与度が大きい EPDM ポリマーの特性定量化とその活用について本論文で報告する。

### 3. 目標設定

完成品の製品特性だけでなく、加工時の特性を正確に予測することができるポリマー予測設計技術の開発により、ラボ試作回数の低減、量産試作のやり直しをなくし試作における工数と廃棄物を半減する。

### 4. ポリマーの特性把握

ポリマーの解析をするため以下のような代表特性を自社評価しデータを収集する。

自社測定をする理由としてはメーカー非開示の情報である、開示はされているが条件が一定ではなく比較ができない、信ぴょう性がないなどがある。

① ムーニー粘度<sup>2)</sup>

ポリマーの流動特性を示す指標  
低いほど流動しやすい  
ムーニー粘度計 100℃、125℃で測定した。

② エチレン量<sup>3)</sup>

結晶化度に関わる指標  
高いほど樹脂に近い特性になり  
熱依存が大きい  
ガスクロマトグラフィーにて定量した。

③ ジエン (ENB) 量<sup>4)</sup>

架橋成分の量を表す指標  
高いほど架橋基を形成しやすいため  
加硫が早く、架橋密度が高い  
ガスクロマトグラフィーにて定量した。

### 5. ポリマーシミュレーション技術

#### 5-1. 測定項目

サンプルは数十種類の EPDM ポリマーを準備した。各サンプルについて、100℃、125℃のムーニー粘度他諸特性の試験を実施し、評価したデータを用いて解析を実施した。

#### 5-2. 解析手法

教師なしデータの分類手法の一つである主成分分析 (PCA) で類似性を可視化した。しかし、PCA では類似性の定量評価ができない。そこで、現行材とブレンド代替材の 5-1 で評価した解析データの差が小さくなる、組み合わせを算出するために、制約条件付き最適化問題におけるラグランジュの未定乗数法を採用した。評価関数は二乗平均平方根誤差 (RMSE) を用いた。

#### 5-3. 解析結果

現行材 A において、一置換の代替材の選定を行う。5-1 で評価した解析データに関して、PCA を実施した。

その結果、図-5 に示すように、代替材 B と類似性が高いことが分かった。次に類似性の定量評価、すなわち一致度を算出するために、ラグランジュの未定乗数法より、RMSE を求めた。現行材 A と類似性が低い代替材 C の一致度を 0% とすると、代替材 B の一致度は 98.5% と算出される。

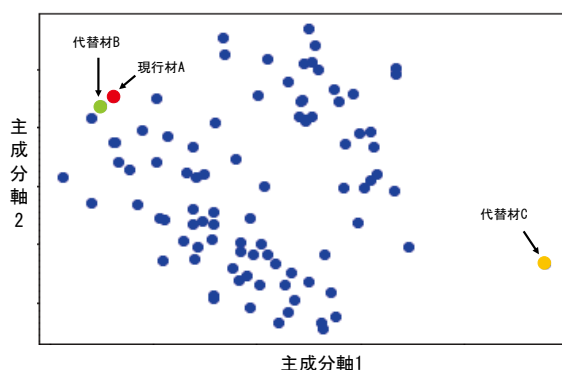


図-5 主成分分析

### 6. 活用事例

#### 6-1. 予測精度の検証

実際に使用している配合系にて解析上の類似度と実際の特性が近いかどうかを検証した。

表-1 検証試験結果

	現行	検討①	検討②	検討③
一致度 (%)	—	72.5	98.5	81.4
Mv (-)	33.6	29.8	33.3	35.8
t5 (min)	2.9	3.1	3	3
比重 (-)	0.59	0.59	0.61	0.69
σ25 (kPa)	242	210	246	279
押出加工	○	×	○	△

表-1 に示すように基本物性 (Mv, t5, 比重, σ25, 押出加工) の項目で現行材との差を検証した。

結果として一致度が高いポリマーほど材料特性の一致度が高く、精度が検証できた。

## 6-2. 実材料への活用

本技術を実際に量産しているゴム材料のポリマー置換の事例に応用した。

机上の計算のみで代替ポリマー候補の絞り込みが可能になったことで結果として検討工数を半減できた。

## 7. まとめ

ポリマーの様々な特性を正確に把握し、それらの特性を同時に解析することで容易にポリマーを代替できるシミュレーション技術の開発ができた。

本技術の活用により廃棄物の低減およびトリアル工数、排出 CO<sub>2</sub> の低減が見込まれる。

今後は他の配合薬品や加硫反応、発泡反応のシミュレーション技術を積み重ねることにより、ゴム配合から試作まで完全試作レスにすることを目標として開発を進める。

## 謝辞

本技術の開発に関わる全ての関係者に厚くお礼申し上げます。

ゴム配合を机上の計算で効率化する試み実用レベルで使用することは非常に難しく困難な事も多くありましたが、皆様の努力により何とか実現することができました。

これも実際にゴム材料を扱う技術者と解析を専門とする技術者が領域を超えて協力することで成しえることができた成果だと思えます。

今後は本技術を発展させることでさらに高度なシミュレーション技術を構築し、試作レスによる工数低減さらには CO<sub>2</sub> 低減により地球環境保護にも貢献できるように尽力していきたいと思えます。

## 参考文献

- 1) 小田原仁ら, 豊田合成技報, Vol63 (2021) 19
- 2) ASTM D1646, ゴム粘度, 応力緩和, および予備加硫特性の標準試験法 (2019)
- 3) ASTM D3900, Standard Test Methods for Rubber (2021)
- 4) ASTM D6047, エチレン - プロピレン - ジエン (EPDM) ターポリマーにおけるゴムの標準試験法 (2021)

## 著 者



野崎 勉



菊池 暁