

微細構造モデリングツールで作成した複合材料モデルの熱伝導解析

徳永 健一*

Heat Conduction Analysis of Composite Models Created by the Microstructure Modeler

Ken-ichi Tokunaga*

本稿では、多孔質体、炭素繊維複合材料、繊維強化金属といった微細構造を持つ材料の解析において、従来では困難であった連続体として直接解析するための取り組みの一端について紹介する。

Key word: 微細構造、複合材料、熱伝導解析、有限要素法、メッシュ生成、位相解析

1. はじめに

ものづくりの分野において、軽量化・小型化がますます要求されるようになり、新たな材料の開発は現在においても重要なテーマである。環境分野やエネルギー分野においても、環境の浄化や燃料電池の開発などで複合材料に対する期待は高まっている。一方、近年の計算機の発達により大規模並列計算が一般的に普及しつつある。このような状況の下、従来では均質化や平均化して解析したり、マルチスケール解析でスケールが異なる解析を接続したりしていた複合材料の問題を、直接解析することで、微細な解像度における現象を把握することが可能になってきた。

アドバンスソフト株式会社では、大規模並列解析に対応した構造解析ソフトウェア Advance/ FrontSTR の開発及び販売を行っている。その大規模解析での性能を活用して、微細構造の解析を行うための、連続体モデルの作成ツールを、当社が開発している汎用プリポストプロセッサ Advance/REVOCAP のメッシュ生成機能を改良することによって開発している。

本稿では、微細構造の連続体モデルの例として、熱伝導率の低い母材に熱伝導率の高い充填材を組み合わせた材料の熱伝導解析を行い、充填材の形状による効果を観察した結果について紹介する。

2. 微細構造モデリングツールの紹介

Advance/FrontSTR の熱伝導解析を行うため、複合材料の有限要素法メッシュを作成するツールを汎用プリポストプロセッサ Advance/REVOCAP のメッシュ生成機能をもとに開発している。本稿ではこれを Advance/REVOCAP シリーズの一環として、Advance/REVOCAP_PorousModeler と呼ぶ。Advance/REVOCAP_PorousModeler は、全体の領域、粒径、アスペクト比、充填密度などのマクロ的な情報から微細構造の連続体モデルを自動的に作成する[図 1]。微細構造から幾何学的に計算できる屈曲度、界面積、三相界面長などは Advance/REVOCAP_PorousModeler で計算することができる[図 2]。構造解析を行うために、母材、充填（強化）材、複合材それぞれについて適当な境界条件、材料物性情報を追加した Advance/FrontSTR の解析モデルを出力することができる[図 3]。流体解析のために、充填材を除いた領域を多孔質材料として流れ場解析を行う Advance/FrontFlow/red 用の解析モデルを出力することができる。音響解析のための多孔質材料の Advance/FrontNoise 用の解析モデル、二相流解析用に Advance/FrontFlow/MP 用の初期固相分布を出力することもできる。

2.1. 解析例

ここでは当社の解析ソフトウェアで行った計

*アドバンスソフト株式会社 第1事業部
1st Computational Science and Engineering
Group, AdvanceSoft Corporation

算例の結果について簡単に紹介する。この章で紹介する例は、実際の物理現象の再現を目的としたものでなく、微細構造モデリングツールの検証目的で行ったものなので、詳細な条件の数値は省略し、定性的な結果として可視化画像のみを紹介する。

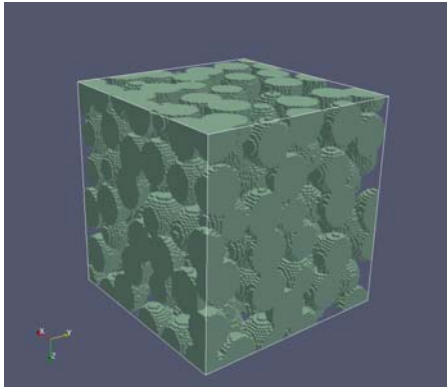


図 1 微細構造モデルの例

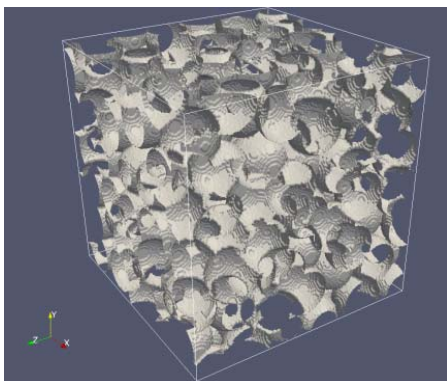


図 2 界面情報

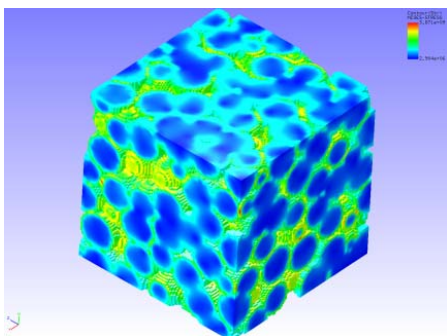


図 3 Advance/FrontSTR による応力解析例

2.1.1. Advance/FrontSTR による繊維材の熱伝導解析

Advance/REVOCAP_PorousModeler で繊維を充填し、熱伝導解析の異方性を観察することがで

きる。 z 軸方向に若干のランダムネスを与えて繊維を配置し（重なりはある程度許容する）、 z 軸方向の負の面に高温を与えた場合と、 x 軸の方向の負の面に高温を与えた場合の熱伝導解析結果（色は温度を表す）を示す。

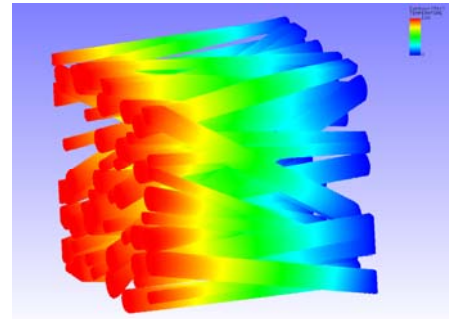


図 4 z 軸方向熱伝導解析結果

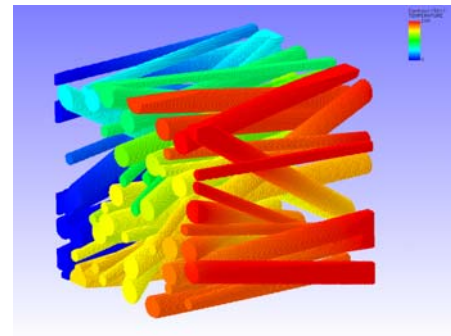


図 5 x 軸方向熱伝導解析結果

2.1.2. Advance/FrontFlow/red による多孔質体の流れ場解析

流れ場領域の途中に微小粒子が充填されたモデルを Advance/REVOCAP_PorousModeler で作成して、その母材部分を出力して多孔質材料とした。 x 軸方向の負の面を流入として、流れ場の解析を行った。

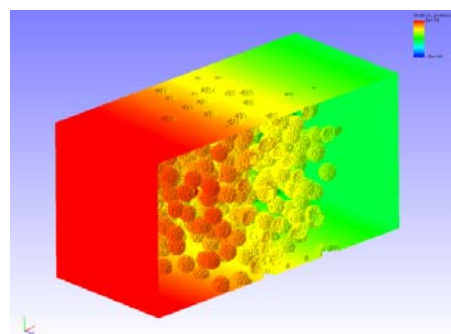


図 6 流れ場解析結果（圧力）

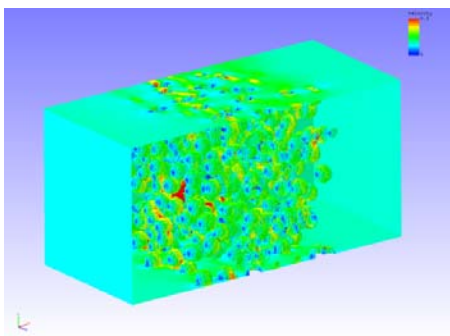


図 7 流れ場解析結果（速度絶対値）

2.1.3. Advance/FrontNoise による多孔質体の音響解析

流体解析と同様に空間領域の途中に微小粒子が充填された領域を考える。充填された領域より x 軸の負方向に音源を置いて、多孔質体における音響解析を行った。

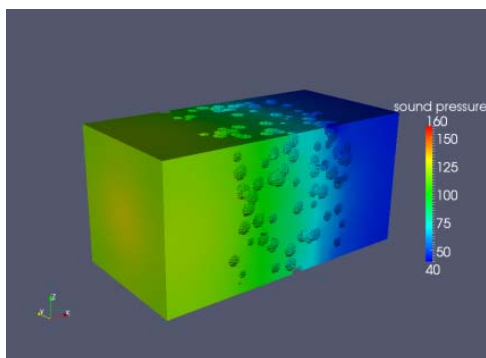


図 8 音響解析結果（音圧）

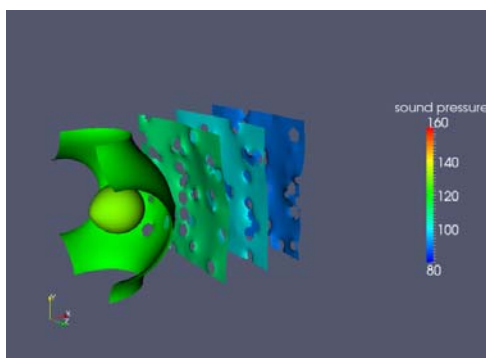


図 9 音響解析結果（音圧の等値面）

3. フィラー形状を変えた場合の熱伝導解析例

ここではもう少し詳細な解析例を紹介する。熱伝導率の低い母材に熱伝導率の高いフィラー（充填材）が充填されているような材料を考え、下面を一定温度、側面を断熱、上面を熱伝達境界とし

て、熱伝導解析を行った。この時、フィラーの充填率をほぼ一定にして、形状を変化させた場合の熱伝導解析結果を以下に示す。

3.1. 計算モジュールと計算環境

- ✓ モデル作成：微細構造モデリングツール
Advance/REVOCAP_PorousModeler
- ✓ 熱伝導解析：構造解析ソフトウェア
Advance/FrontSTR
- ✓ 計算機：当社社内計算機サーバーIntel Xeon
2.8GHz

3.2. 計算条件

表 1 計算条件

計算領域 [m]	0.1 x 0.1 x 0.1
フィラー半径 [m]	0.005
フィラー高さ L [m]	0.0 から 0.05 まで 0.005 刻み
フィラー密度	0.25
下面温度 [K]	100.0
上面熱伝達係数 [W/(m ² K)]	1.0
上面雰囲気温度 [K]	0.0
マトリクス比熱 [J/(kg K)]	1100.0
マトリクス熱伝導率 [W/(mK)]	0.3
マトリクス質量密度 [kg/m ³]	1850.0
フィラー比熱 [J/(kg K)]	756.0
フィラー熱伝導率 [W/(mK)]	100.0
フィラー質量密度 [kg/m ³]	1760.0

ただし、温度は差のみ意味があることに注意する。

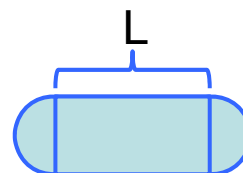


図 10 フィラー高さ

3.3. 行列計算条件と計算時間

Advance/FrontSTR の熱伝導解析の計算設定

では、行列解法に CG 法、前処理に対角スケーリング法、収束判定値を $1.0\text{e-}8$ とした。8 並列で行った時の計算時間実測値を参考までに示す。

表 2 計算時間実測値

処理	実時間 ($L=0$)	実時間 ($L=0.45$)
モデル作成	801[s]	290 [s]
領域分割	226[s]	220 [s]
熱伝導解析	1071 [s]	1029[s]

モデル作成と熱伝導解析は並列化されている。モデル作成がフィラーの高さによって差があるのは、フィラーの高さが大きい方が充填率を満たすために充填させるフィラーの個数が少なくて済むからである。

3.4. 解析結果

作成したモデルとその解析結果を次に示す。

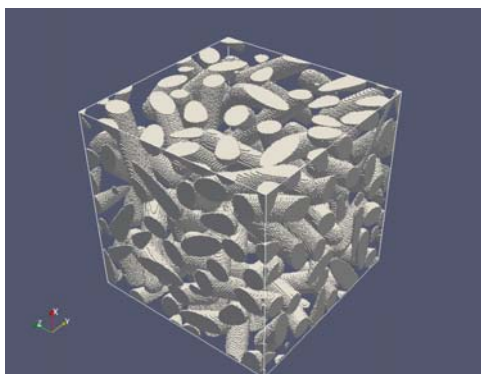


図 11 $L=0.05$ の充填材の分布図

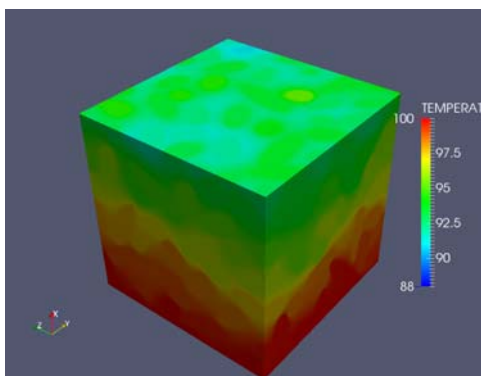


図 12 $L=0.05$ の熱伝導解析結果 (温度)

フィラー長さ L を変化させた時の上面の温度分布を統計処理したもの（最高、最低、平均）のグラフを示す。横軸がフィラー長さ L 、縦軸が温度である。

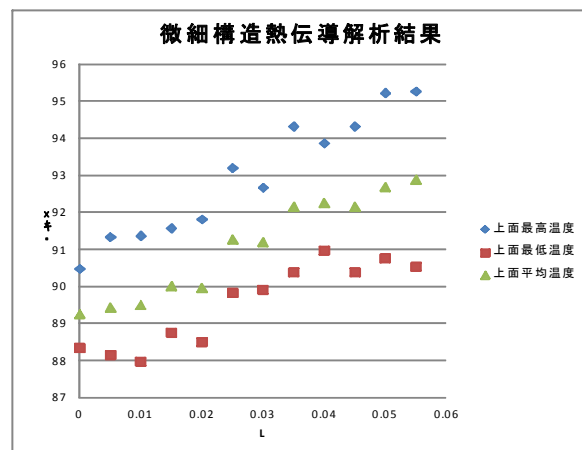


図 13 微細構造熱伝導解析結果

平均温度についてフィラー長さ L との相関係数を計算すると 0.974 となり、ほぼ線形従属の関係にあるとみなすことができる。

4. 位相解析

21 世紀に入り、純粋数学の分野でも計算機を利用した研究が活発に行われている。例えば、代数的トポロジーを計算機で計算することが可能になり、位相解析と呼ばれる分野が誕生しつつある。日本でも東北大学原子分子材料科学高等研究機構で材料科学と数学の共同研究が行われている。

4.1. ホモロジー計算

位相幾何学の概念にホモロジー群と呼ばれる位相不変量がある。非常にラフな言い方をすると、図形の高次元の穴の個数を数えるもので、0 次元ホモロジーは図形の連結成分、1 次元ホモロジーは環（リング）、2 次元ホモロジーは空洞（キャビティ）の個数を表していると考えてよい。ここではオープンソースで公開されているホモロジー計算ソフト CHomP を用いて、3 章で作成したフィラー充填材料のフィラー形状部のホモロジー群を計算した。

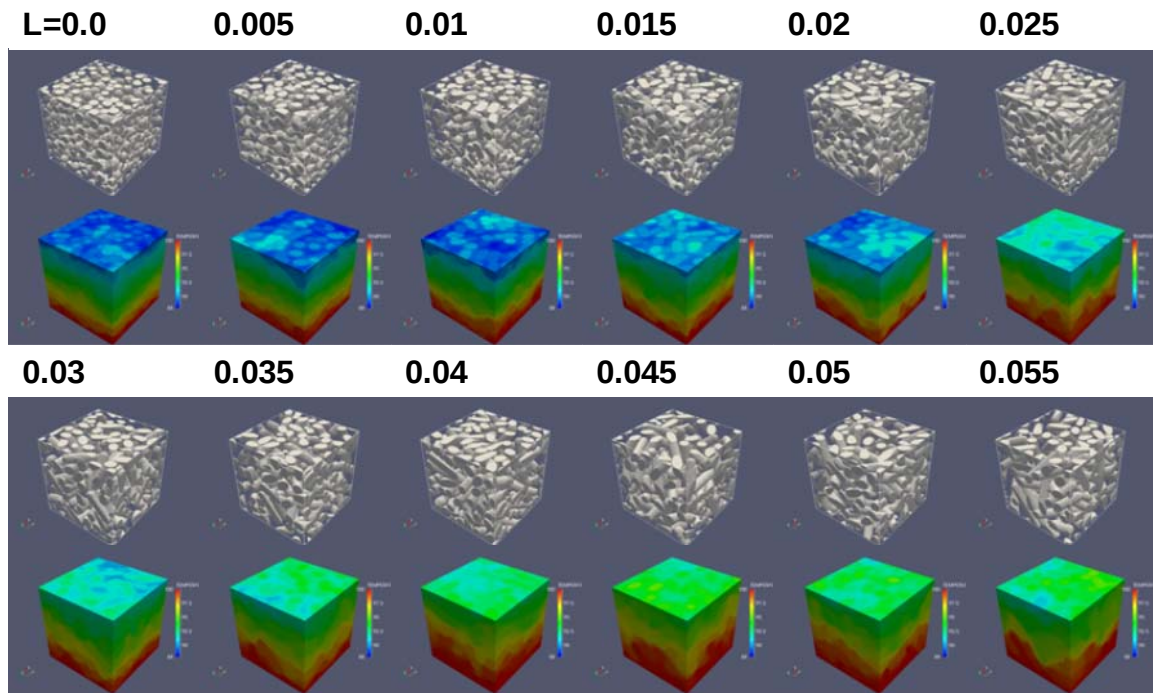


図 14 Lを変化させた時の充填材の分布図と熱伝導解析結果

横軸がフィラーの長さ、縦軸がホモロジー群の階数である。

ホモロジー群の階数と熱伝導解析の上面温度の間には関係があると考えられる。

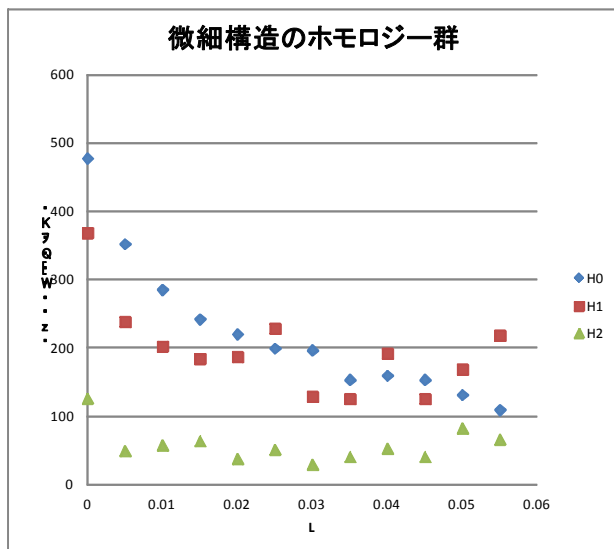


図 15 微細構造のホモロジー群

このグラフからはフィラーの高さを長くするほど、連結成分の個数が小さくなっていること、すなわちフィラーの接続度が上がっていることが分かる。

4.2. ホモロジーと熱伝導の関係

上記の分析からほぼ自明な結果であるが、0 次の

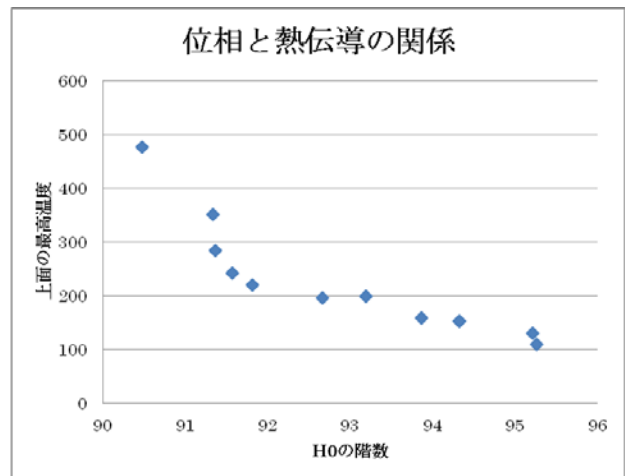


図 16 位相と熱伝導の関係

ここでは高次のホモロジー群の情報と物理的な性質との間の関係を見るまでには至っていない。最新の位相解析の研究では、Persistent Homology群を考えて、高次のホモロジー群の生成と消滅の情報と、物理的な材料の特性に関する関連もなされている。

5. まとめと今後について

5.1. まとめ

本稿では、微細構造を連続体として直接解析するためのモデルを作成する、微細構造モデリングツール Advance/REVOCAP_PorousModeler について紹介し、いくつかの解析例と、フィラー形状を変化させた時の熱伝導解析のパラメトリックスタディの結果について報告した。また、位相解析の一端についても紹介した。

5.2. Advance/REVOCAP_PorousModeler の予定

アドバンスソフト株式会社では、大規模流体解析、大規模構造解析、大規模音響解析に取り組んでいるが、そのモデル作成の方法の1つとして、微細構造モデリングツール Advance/REVOCAP_PorousModeler の開発と販売を行っている。ここではその機能の一部を紹介した。ここで紹介した解析ではメッシュをボクセル的に扱っていたのに対して、粒子やフィラー形状を円滑的にする手法を開発中である。

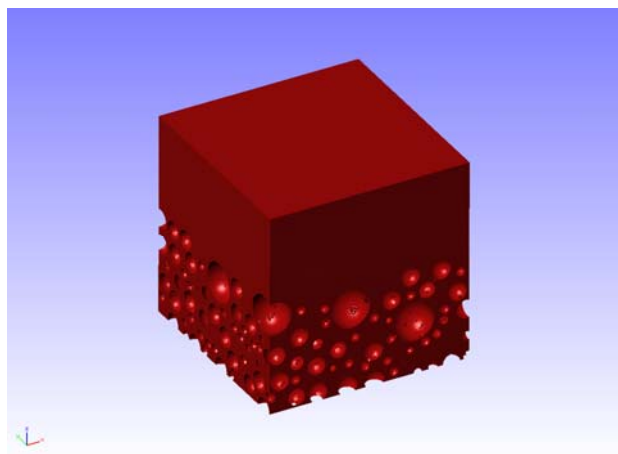


図 17 多孔質体の界面円滑表現

6. 参考文献

- [1] “Computational Homology Project.”
<http://chomp.rutgers.edu/index.html>.
- [2] Hull D., Clyne W.T. An Introduction to Composite Materials Second Edition. the Cambridge University Press, 1996.
- [3] フィラー研究会. 複合材料とフィラー. シー

エムシー出版, 1994.

- [4] 松原聖、桑原匠史. “音響解析ソフトウェア Advance/FrontNoise による大規模解析.” アドバンスシミュレーション Vol.9, 2011.
- [5] 大西陽一, 塩谷仁, 杉中隆史, 小川哲司, 伊藤豪, 土田健一. “流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red Ver. 5.1 の概要と特長.” アドバンスシミュレーション Vol.17, 2013.
- [6] 平岡裕章, 三村昌泰, 竹内康博, 森田善久. タンパク質構造とトポロジー —パーシステントホモロジー群入門—. 共立出版, 2013.
- [7] 末光啓二, 徳永健一, 松原聖, 加藤国男. “Advance/FrontSTR によるリファイナーを利用した大規模解析.” アドバンスシミュレーション Vol.13, 2012.
- [8] 袁熙, 松原聖, 大家史. “構造解析ソフトウェア Advance/FrontSTR Ver. 4.1.” アドバンスシミュレーション Ver.13, 2012.

※技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、PDF ファイルがダウンロードできます。(ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。)