

## 熱伝導性能を最大にする金属結晶構造の最適化

○東北大学工学部

東北大学大学院工学研究科

東北大学大学院工学研究科

東北大学大学院工学研究科

東北大学大学院工学研究科

学生員

学生員

学生員

正 員

正 員

○一番ヶ瀬 俊季

小川 竣

干場 大也

加藤 準治

京谷 孝史

## 1. はじめに

本研究は、金属材料の巨視的な熱伝導性能を最大化するために、微視構造である金属結晶構造を最適化する手法を開発する。熱問題は航空宇宙分野や自動車分野をはじめ、様々な分野で考慮すべき重要な問題である。その基盤となる金属材料は結晶構造を有しており、微視的な結晶構造が巨視的な材料性能に大きく影響を及ぼす。そこで有限要素法を用いた巨視的な熱伝導解析に加え、金属結晶幾何の表現に適した、Multi-Phase-Field 法<sup>2)</sup>を用いたマルチスケルトポロジ最適化法という独自の新しい手法を提案する。

## 2. Multi-Phase-Field 法

本研究では金属結晶構造の表現に、Phase-Field 法を多結晶用に拡張した、Multi-Phase-Field 法<sup>2)</sup>を用いる。時間発展方程式は非保存系の Allen-Cahn 方程式に、体積制約を加えることによって保存系を表現している。

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = \frac{2}{n} \sum_{j=1}^n M_{ij} \left( -\frac{\delta F}{\delta \phi_i} + \frac{\delta F}{\delta \phi_j} \right) \quad (1)$$

ここで、 $M_{ij}$  はフェーズフィールドモビリティ、 $F$  は自由エネルギー汎関数である。自由エネルギー汎関数に目的関数を導入することにより、最適化を進めていく。

$$F = F_m + F_p \quad (2)$$

$$F_m = \int_V f dV \quad (3)$$

$$f = f_{\text{doub}} + f_{\text{grad}} + f_{\text{th}} \quad (4)$$

$F_m$  は領域内の自由エネルギー、 $F_p$  は体積制約条件を満足するために導入されるエネルギーである。 $f_{\text{doub}}$  は勾配エネルギー密度に関する項、 $f_{\text{grad}}$  は勾配エネルギー密度に関する項、 $f_{\text{th}}$  は目的関数に関する項である。

## 3. 熱伝導最大化問題

熱伝導最大化問題は目的関数を  $f_{\text{th}}$  として、次のように定式化した。ここでは材料体積量を制約条件としているが、それについては5節で紹介する。

$$\text{minimize } f_{\text{th}} = \mathbf{W} \cdot \mathbf{T} \quad (5)$$

$$\text{subject to } \mathbf{HT} = \mathbf{W} \quad (6)$$

$$0 \leq \phi_i \leq 1 \quad (7)$$

ここで、 $\mathbf{T}$  は離散化された絶対温度、 $\mathbf{W}$  は離散化された熱流束、 $\mathbf{H}$  は形状関数  $\mathbf{N}$ 、均質化熱伝導率  $\kappa^H$  を用いた次式で表すことができる。

$$\mathbf{H} = \int_{\Omega} \left( \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial \mathbf{x}} \right)^T \kappa^H \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial \mathbf{x}} d\Omega \quad (8)$$

ここではマイクロ構造のフェーズフィールド変数  $\phi_i$  を設計変数とみなし、マクロの熱コンプライアンス  $\mathbf{W} \cdot \mathbf{T} = \mathbf{T}^T \mathbf{HT}$  が最小になるように時間発展方程式を解いていくことによって熱伝導性能最大化を行う。また、随伴法により感度を求めると、

$$\frac{\partial f_{\text{th}}}{\partial \phi_i} = -\mathbf{T}^T \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \phi_i} \mathbf{T} \quad (9)$$

となる。

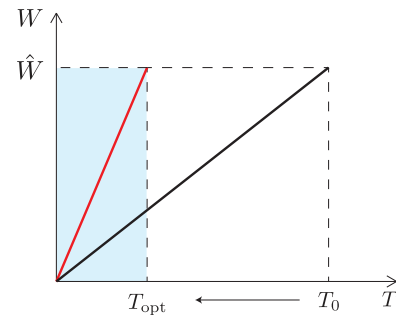


図-1 熱伝導最大化の概念図

## 4. 分離型マルチスケール解析法

マイクロマクロ2変数境界値問題を同時にカップリングしながら解くマルチスケール解析は計算コストが高い。そのためマイクロとマクロを別々の境界値問題に分けて解く分離型マルチスケール解析法を用いる。以下に本手法の流れを提示する。

マイクロ境界値問題について、均質化法を基本として周期的なマイクロ構造（以下、ユニットセル）を取り出し、それを数値的な供試体とみなして材料実験を模擬する。さらに、ここで得られたマイクロ解析結果から、均質化法に基づき、マクロ材料の物性値を求めることによって、マクロ材料応答を計測したものとする。このようにコンピュータ上で仮想敵に材料実験を行い、マクロ材料パラメータを求める手法は「数値材料試験」と称される。

## 5. 時間発展方程式

フェーズフィールド法を用いて最適化を行うため式(4)に式(5)を導入する。さらに式(1)に自由エネルギー汎関数を代入すると、式(9)から体積制約を考慮していない項は以下のように表される。

$$\begin{aligned} rhs_i = & -\frac{2}{n} \sum_{j=1}^n M_{ij} \left[ \sum_{k=1}^n \left\{ (W_{ik} - W_{ij}) \phi_k + \frac{1}{2} (a_{ik}^2 - a_{ij}^2) \nabla^2 \phi_k \right\} \right. \\ & \left. + \left\{ \left( \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \right)^T \frac{\partial \kappa^H}{\partial \phi_i} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} - \left( \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \right)^T \frac{\partial \kappa^H}{\partial \phi_j} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \right\} \right] \end{aligned} \quad (10)$$

ただし、均質化熱伝導率の感度  $\partial \kappa^H / \partial \phi_i$  は次式で求まる。

$$\frac{\partial \kappa_{pq}^H}{\partial \phi_i} = \frac{1}{|Y|} \sum_{a,b} \int_Y \frac{\partial \kappa_{ab}}{\partial \phi_i} \frac{\partial \tau^{(q)}}{\partial y_b} \frac{\partial \tau^{(p)}}{\partial y_a} dY \quad (11)$$

ここで、 $\kappa$  はミクロの熱伝導率、 $\tau$  はミクロの絶対温度である。さらに、以下に示す Nestler ら<sup>2)</sup> の体積制約項を導入することによって保存系の時間発展方程式を解いたものと同義であるとする。

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = rhs_i - \chi_i \frac{\partial \rho(\phi_i)}{\partial \phi_i} \quad (12)$$

$$\chi_i = \begin{cases} \frac{1}{H_i} \left( R_i + \frac{1}{N-A} \sum_{j=1}^A R_j \right) & (1 \leq A < N, 1, \dots, A) \\ 0 & (A < N, i = A+1, \dots, N) \end{cases} \quad (13)$$

## 6. 最適化計算例

提案したトポロジー最適化手法の妥当性を検証するため、本手法を用いた最適化計算例を紹介する。計算に使用するマクロ構造及び境界条件は、図-2 及び表-1 に示す通りで、どちらも4節点四辺形要素を使用している。

表-1 境界条件

|           | 熱流束 (W/m <sup>2</sup> ) | 温度拘束 (K) |
|-----------|-------------------------|----------|
| $\hat{Q}$ | $1.0 \times 10^5$       | -        |
| $Q_0$     | 0                       | -        |
| $\hat{T}$ | -                       | 273.15   |

ミクロの材料構成は二相材料結晶構造を対象とし、物性値は Al-Si 合金を想定、等方性材料であるとして、表-2 のものを使用した。

表-2 使用材料

|               | 熱伝導率 (W/m · K) |
|---------------|----------------|
| 結晶材料 1(Al, 赤) | 230            |
| 結晶材料 2(Si, 灰) | 50             |

図-3 の結果は最適化後のマクロ温度分布とミクロ構造のユニットセルを  $3 \times 3$  で貼り付けたものである。a) では熱を水平方向に逃すように高熱伝導材料が配置されている結果が得られた。また、b) では、発熱領域  $\hat{Q}$  から吸熱領域  $\hat{T}$  に熱伝導しやすいような結晶配置が得られた。

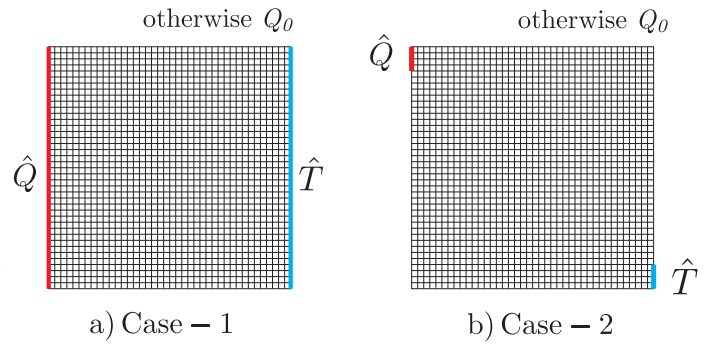


図-2 境界条件

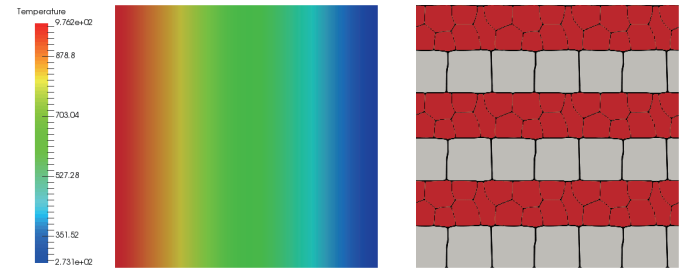


図-3 Case-1 の結果

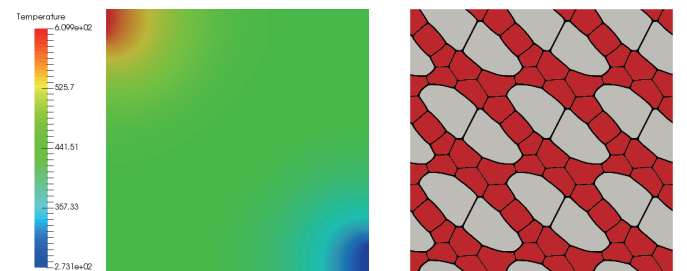


図-4 Case-2 の結果

## 7. 結論

本研究では Multi-Phase-Field 法<sup>2)</sup> および分離型マルチスケール解析を用いた、新しいトポロジー最適化を提案した。最適化計算例で合理的な結晶構造が得られていることから、本手法の妥当性が示された。この成果は、今後の先進的金属材料の開発分野において、非常に有益なものと考えられる。

## 参考文献

- 1) Daishun YACHI, Junji KATO, Shinsuke TAKASE, Kenjiro TERADA, Takashi KYOYA, "Analytical sensitivity analysis for decoupling multi-scale topology optimization of composites", *Transactions of the Japan Society for Computational Engineering and Science*, Vol. 2013 p.20130022.
- 2) Britta Nestler, Frank Wendler, and Michael Selzer, "Phase-field model for multiphase systems with preserved volume fractions", *Physical Review*, 2008, E 78, 011604.