

令和 4 年 6 月 7 日現在

機関番号：14301

研究種目：若手研究

研究期間：2019～2021

課題番号：19K14870

研究課題名（和文）ダイオード特性をもった新熱伝導材料の最適設計法の開発

研究課題名（英文）Structural Optimization Method for Thermal Diode Material

研究代表者

古田 幸三（Furuta, Kozo）

京都大学・工学研究科・特定助教

研究者番号：20833031

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、自然界に從來存在しない特性、例えば熱のダイオード特性を示すような熱伝導材料の開発を目的とし、微視構造内の熱伝導を対象とした構造最適設計法の構築を行った。まずはじめに熱電素子を対象とした構造最適設計法の構築をおこなった。具体的には、熱伝導率最小化問題を対象とした形状最適設計法の構築を行い、從來提案されてきた周期的な孔を伴う微視構造と異なる最適構造の創出に成功した。そこで得られた知見、特に温度の不連続性を含む強い非線形性利用した最適構造の考え方をもとに、多目的最適化による微視系熱伝導を対象とした熱整流性創出のための最適化問題の定式化およびその設計感度の導出に成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究の社会的意義の一つに、これまで構築されてきた最適設計法の考え方を異なる分野である材料開発の分野に適用したことが挙げられる。従来、材料開発は試行錯誤的であることが多かった。その中でマテリアルズインフォマティクスと呼ばれる、いわゆる機械学習の考え方を取り入れた材料開発・設計手法が近年急速に広まってきた。この手法は有用である一方で大量のコンピュータリソースやこれまでの知見が必要となることが課題である。その中で本申請課題は、機械力学の分野で発展してきた構造最適設計法の考え方をを用いることで、数理的、物理的根拠に基づき、低い計算コストによる最適構造創出方法を構築した。

研究成果の概要（英文）：We have constructed the optimum design methods for a nanoscale heat conduction problem. First, the minimization problem of the thermal conductivity was formulated, and its design sensitivity was derived. We successfully obtained an optimized configuration based on the formulations. This is one of the first works that focused on the optimum design method for the nanoscale heat conduction problem. Moreover, these optimized results supposed that the developed material has possibility for improved its performance. Then, we formulated a multi-objective optimization problem for designing the thermal-diode material and derived the design sensitivity. Finally, we have calculated the optimization problem and tried to verify the proposed method.

研究分野：設計工学

キーワード：構造最適化 ボルツマン輸送方程式 熱伝導 微視構造

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

本研究では、従来の自然界に存在しない熱特性、例えばダイオード特性を示すような革新的な熱伝導材料の開発を目的とし、微視構造内の熱伝導を対象とした構造最適設計法の構築を行う。構造最適設計法とは、決められた設計・境界条件の元、所望の性能が最大限得られる構造を求める設計手法であり、すでに排熱性の向上などの熱伝導制御を目的とした最適設計法は多く報告されてきた。しかしながら、それらは巨視系熱伝導のみを対象としたものであり、材料開発などで扱われる微視系熱伝導に着目したものは未だ少なかった。その中で、申請者等は世界に先駆け、冷却性の向上を目的とした微視系熱伝導問題を対象とした設計指針である設計感度の導出方法を構築していた。そこで、本研究ではこれまで得られた知見をもとに、構造最適設計法の中でも最も設計自由度の高いトポロジー最適設計法を用いることで、新しい材料特性をもった熱伝導材料の開発を行うことが研究開始当初の背景である。

2. 研究の目的

本研究では、自然界に従来存在しない特性、例えば熱のダイオード特性を示すような熱伝導材料の開発を目的とし、微視構造内の熱伝導を対象とした構造最適設計法の構築を行う(図1)。近年、加工制度の上昇やビッグデータを扱うマテリアルズインフォマティクスと呼ばれる新しい分野の登場により、高性能材料、新機能をもった材料の開発・設計が急速に進んでいる。その中でも、熱伝導の制御を目的とした微視構造を対象とした研究、開発は電子機器の性能、安定性の向上の観点から重要であるだけでなく、熱整流器と呼ばれる従来自然界に存在しない熱伝導特性をもつ材料や微視構造の開発は、産業界にブレイクスルーを引き起こす可能性を有している。

本申請課題で扱った微視系熱伝導は、フーリエ則に従う一般のスケール、いわゆる巨視系熱伝導とは大きく異なる振る舞いを行うことが知られている。この振る舞いの違いについては、1993年に米国のJoshi氏とMajumdar氏によって熱の伝搬をフォノンの流れとして捉えることができ、そのフォノン粒子は系内を散乱しながら流れていくというモデルが提唱され、以降、このモデルに基づく数値解析手法が多く開発されてきた。微視構造内では、フォノンの平均自由行程と系の代表長さが同程度あるいは平均自由行程が大きくなるため、系内においてフォノンの散乱が十分に行われず、フーリエ則に従い拡散的に熱が流れるのではなく、弾道的に熱が流れる。さらに、系内に材料界面が存在する場合、フォノンの散乱が少ないため、界面におけるフォノンの反射の効果が無視できないほど大きくなり、結果的に材料界面において温度が不連続になる温度ジャンプが生じることが知られている(図2)。近年の熱伝導材料の開発は、これら微視系特有の熱伝導を利用して行われている。

申請者らは2018年に世界に先駆けて、構造最適設計法に基づく微視系熱伝導問題の制御を目的とした設計指針である設計感度導出方法の構築に成功しており、そこで得られた知見をもとに、従来自然界に存在しない材料特性をもつ熱伝導材料創出のための構造最適設計法の構築を行うことが目的である。

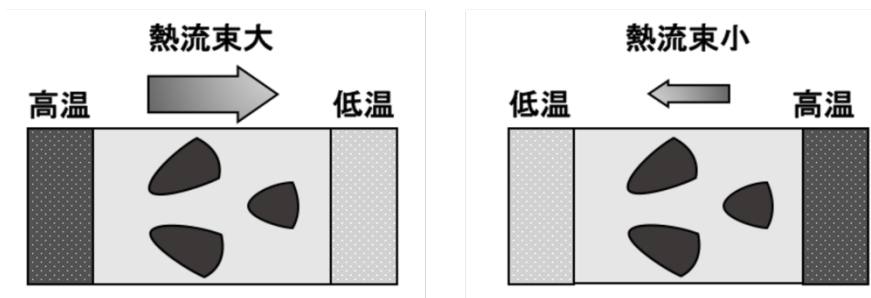


図1. ダイオード特性をもつ熱伝導材料の概念図

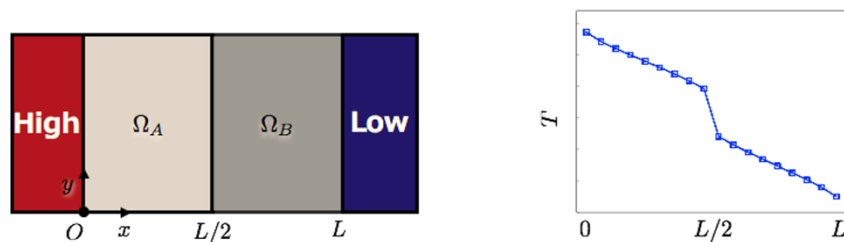


図2. 微視系熱伝導における温度ジャンプの数値解析例

3. 研究の方法

本研究では、微視系熱伝導問題を対象としたレベルセット法に基づく構造最適設計法の構築に成功した。本研究課題で扱う微視系熱伝導問題においては、材料界面における温度の不連続性

を利用することが、革新的な材料創出に必要不可欠である。一方で、スカラー関数の零等位面により二種類の微視構造材料の形状を表現するレベルセット法を用いることで、従来の密度法とは異なり、明瞭な境界を容易に表現可能、かつ、陽に境界条件を付与することが可能となる。レベルセット法により表現された材料分布をもとに、有限差分法(FDM)を用いてボルツマン輸送方程式を解くことで、設計感度の導出を行い、その設計感度をもとに、有限要素法(FEM)を用いてハミルトンヤコビ方程式を解き設計変数であるレベルセット関数を更新することで最適構造の創出を行う設計法の構築をおこなった。

なお研究課題を遂行する際に、当初予定していたトポロジー最適設計法を構築するために必要なトポロジー導関数の解析的な導出が困難であること、その代替法として発見的手法や自動微分を取り入れた設計感度の導出が困難であることが明らかになった。そのため、申請者が世界に先駆けて構築した微視系熱伝導問題を対象とした形状感度の導出方法とレベルセット法による構造最適設計法を組み合わせることで、最適設計法の構築を行うこととした。

研究課題を遂行するにあたり、

- ① 微視系熱伝導問題全般に適用可能な設計感度導出方法の見直し・再構築
 - ② 熱伝導率最小化問題を対象とした構造最適設計法の構築
 - ③ 熱整流器を対象とした多目的最適化問題の定式化・設計感度の導出
 - ④ 数値例を通じた提案手法の妥当性検証
- を計画した。

4. 研究成果

上述の研究計画に基づき、本研究課題を遂行した。その中で、①-③については概ね完了し、④について課題終了後も引き続き検討を行なっている。

特に、②の熱伝導率最小化問題を対象とした構造最適設計法の構築については、その成果を国際雑誌 International Journal of Numerical Methods in Engineering に投稿し、掲載された(図3)。本成果により、一般的な熱伝導では得られない、微視系熱伝導特有の温度の不連続性を含めた強い非線形性を考慮した最適構造の創出に成功した。そして本成果は、熱電素子材料を構築する際に提案されてきた周期的な孔を初期形状として最適構造を求めており、これは従来の材料設計の分野に対して、本最適化手法の適用可能性を示している。さらに本設計手法より、非線形性、特に温度の不連続性により、革新的な熱伝導材料の設計案創出が可能となった。本成果をもとに、多目的最適化の考え方を取り入れた熱の整流性を実現するための最適化問題の定式化およびその設計感度の導出に成功した。

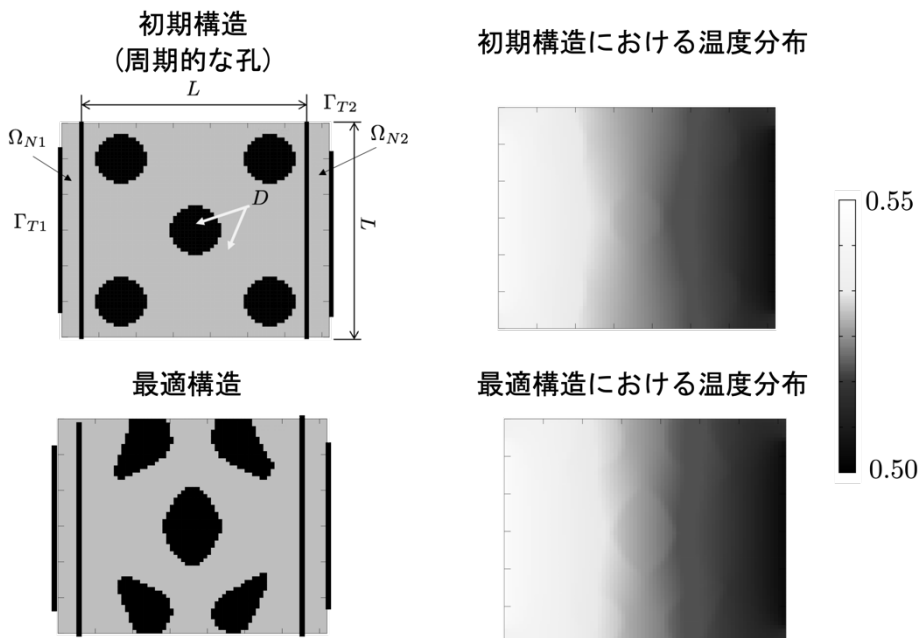


図3. 熱伝導率最小化を目的とした構造最適化結果

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計1件（うち査読付論文 1件／うち国際共著 0件／うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Furuta Kozo, Sato Ayami, Izui Kazuhiro, Nishiwaki Shinji	4. 巻 123
2. 論文標題 A level set based shape optimization method for thermoelectric materials	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 International Journal for Numerical Methods in Engineering	6. 最初と最後の頁 2338 ~ 2356
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/nme.6940	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計4件（うち招待講演 1件／うち国際学会 3件）

1. 発表者名 Kozo Furuta, Kazuhiro Izui, Takayuki Yamada, Shinji Nishiwaki
2. 発表標題 Shape Optimization for New Thermal Materials Based on the Level Set Method
3. 学会等名 Asian Congress of Structural and Multidisciplinary Optimization 2020（国際学会）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kozo Furuta, Ayami Sato, Kazuhiro Izui, Takayuki Yamada, Mitsuhiro Matsumoto, Shinji Nishiwaki
2. 発表標題 Level-set based structural optimization method for thermal materials utilizing nanoscale effects
3. 学会等名 The 13th World Congress of Structural and Multidisciplinary Optimization（国際学会）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kozo Furuta, Kazuhiro Izui, Takayuki Yamada, Shinji Nishiwaki
2. 発表標題 Shape Optimization for New Thermal Materials Based on the Level Set Method
3. 学会等名 Asian Congress of Structural and Multidisciplinary Optimization 2020（国際学会）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 古田幸三
2. 発表標題 構造最適設計法の概要および革新的材料創成のための設計法に関する一考察
3. 学会等名 材料化学における幾何と代数II (招待講演)
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------