

# CoSMIC (Comprehensive System for Materials Integration of CFRP)

“Atoms to Aircraft”を実現する、マルチフィジクス(複数の物理現象)/マルチスケール(原子・分子~構造体スケールまで)な順解析・逆解析ツールを提供する統合型材料開発システム

## 1. CoSMICについて

CoSMIC (Comprehensive System for Materials Integration of CFRP) は炭素繊維強化プラスチック(CFRP)を取り扱うMIシステムとして、東北大学が中心となり開発が進められてきた。これまでに航空機構造用のCFRP設計をターゲットとした12個の主要ツールと付随する多くの順解析・逆解析・最適化ツールを開発してきており、原子・分子スケールから機体構造までのマルチフィジクス/マルチスケールシミュレーションが可能である。今後はユーザーニーズの高まりに応え、航空機産業以外の製品開発を支援するためのモジュール開発・拡張を進めていく。

## 2. システム概要

CoSMICの解析ツールはその特性に基づき4階層に分類されている。

### 【第1階層：航空機用熱硬化CFRP解析用ツール群】

1. 反応硬化分子動力学シミュレーション
2. 反応硬化散逸粒子動力学シミュレーション
3. 化学反応経路自動探索 GRRM\*1
4. 架橋性を有するメゾ有限差分法(密度汎関数理論)シミュレーション
5. マルチスケール残留変形シミュレーション
6. 自己組織化マップ
7. テーリング設計支援のための有孔破壊シミュレーション
8. AFP時のギャップ成型を考慮に入れた複合材積層板の有限要素解析ツール
9. ばね要素モデル
10. マルチスケール破壊シミュレーション
11. 等価剛性モデル
12. 複合材主翼の多目的最適設計シミュレーター

### 【第2階層：汎用インハウスコードによる解析ツール群】

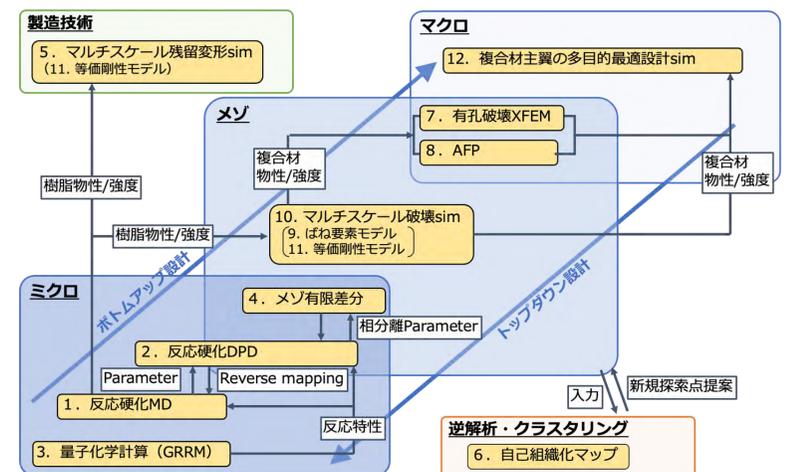
基礎的FEM, 基礎的粒子法, 最適化手法各種

### 【第3階層：商用・汎用ソルバー連携コード】

商用・汎用ソフト用で利用可能な解析コード(LAMMPS, ABAQUS, DYNA)

### 【Background階層】

基礎的な数値解析コード提供

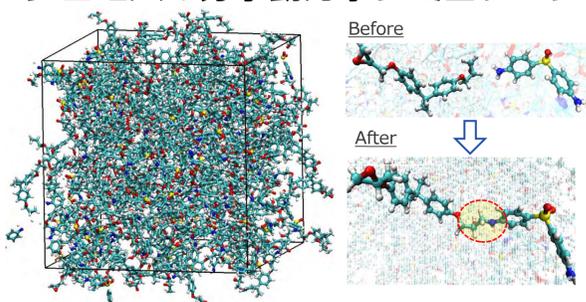


第1階層マルチスケール連携図

## 3. 適用事例の紹介

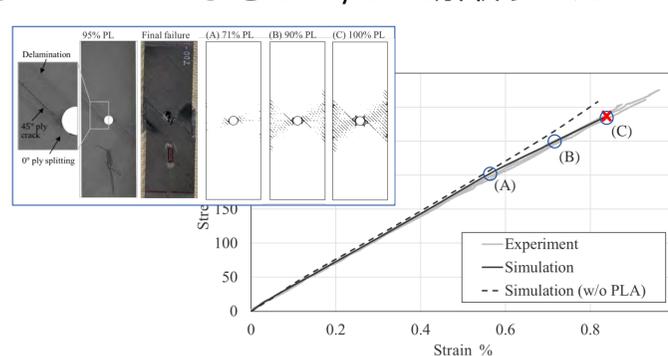
### 第1階層-1：反応硬化MD

CFRPの母材となる熱硬化性樹脂の硬化プロセスの分子動力学シミュレーション



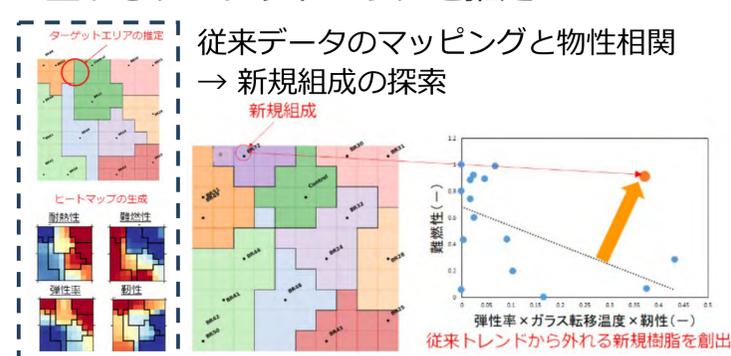
### 第1階層-7：有孔破壊シミュレーション

薄層CFRPの高自由度設計にも対応したXFEMによるOHT/OHC解析ツール



### 第1階層-6：自己組織化マップ (SOM)

SOMから難燃性・耐熱性と力学特性を両立するターゲットエリアを推定



## 4. 利用の仕方

### コンソーシアムメンバー

↑ コード・マニュアル配布  
講習会の実施  
個別対応

コンソーシアム事務局(東北大):  
計算コードおよびGUIコードを管理  
<http://www.cosmic.plum.mech.tohoku.ac.jp/>

利用方法

① 自社サーバー/PCでの利用

② 解析用小規模ワークステーション(東北大)  
講習会やサンプルコードの試用

③ スーパーコンピュータAOBA(東北大学サイバーサイエンスセンター)  
大型計算用  
別途AOBAの企業ユーザーとして利用申請が必要



↑ webブラウザ経由でのGUI操作も利用可能(第1階層)

※コード利用は基本無償(プログラムの作りこみ等は別途共同研究契約)

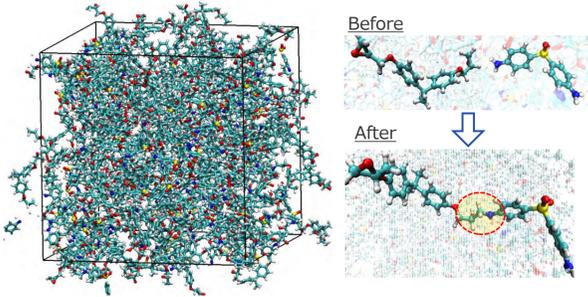
## 5. コンソーシアムについて

CoSMICの継続運用のために、大学・企業からなるCoSMICコンソーシアム(2022/5/16発足、2024/7/22月現在46企業参画)を東北大学オープンイノベーション(OI)機構内に設立した。入会は規約了承の上、申込書・誓約書の提出が必要(会費なし)。このコンソーシアムがCoSMIC運用だけでなく、多様な業種・背景を有するメンバー間の情報共有の場や協力関係の起点となることを期待している。

# CoSMIC (Comprehensive System for Materials Integration of CFRP)

## ① 反応硬化分子動力学 (MD) シミュレーション

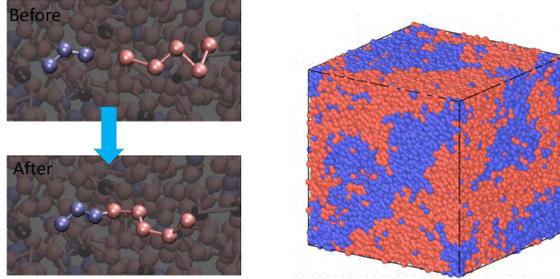
活性化エネルギーと生成熱を考慮した反応判定を組み込んだMDシミュレーション\*。反応・力学・構造特性を取得可能。



\*MDはLAMMPS, 反応判定はpython

## ② 反応硬化散逸粒子動力学 (DPD) シミュレーション

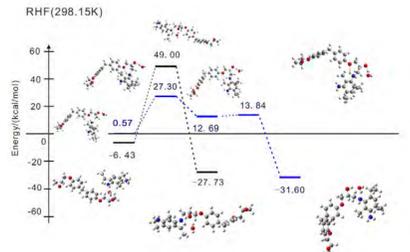
粗視化により高速かつ大規模な反応DPDシミュレーション\*が可能 (例:高分子ブレンドの反応誘起相分離など)。リバースマッピングにより全原子系の復元可能。



\*DPDはLAMMPS, 反応判定はpython

## ③ 化学反応経路自動探索 GRRM

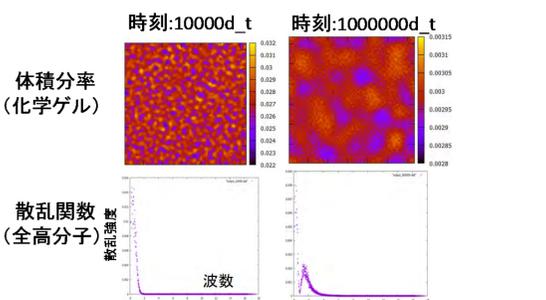
多次元のエネルギー曲面から生成物に至る活性化状態 (TS) と反応経路を自動的に探索するアルゴリズム



\*GRRMは量子化学探索研究所 (<https://iqce.jp/>) が提供するツールです。CoSMIC①②と連携することで精緻な反応モデリングを可能とします。

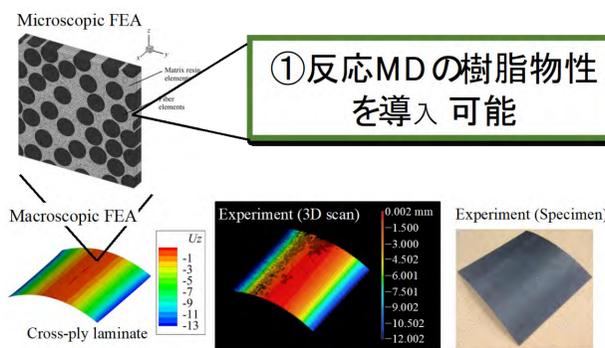
## ④ 架橋性を有するメゾ有限差分法 (密度汎関数理論) シミュレーション

密度汎関数理論を用いて物理ゲル, 化学ゲル, 溶媒の3成分系を対象に相分離構造形成の動力学を再現  
→相分離構造, 自由エネルギー, 散乱関数



## ⑤ マルチスケール残留変形シミュレーション

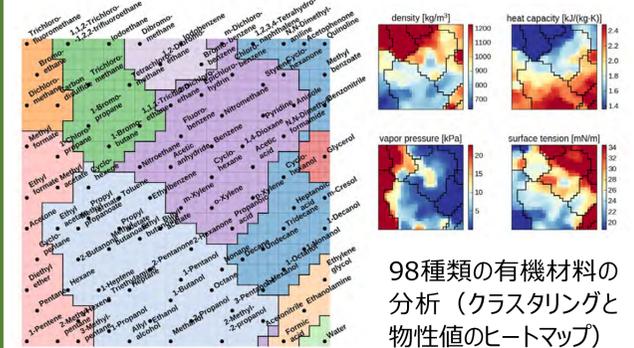
分離型2スケール有限要素解析によるCFRP積層板の成型時残留変形予測



① 反応MDの樹脂物性を導入可能

## ⑥ 自己組織化マップ (SOM)

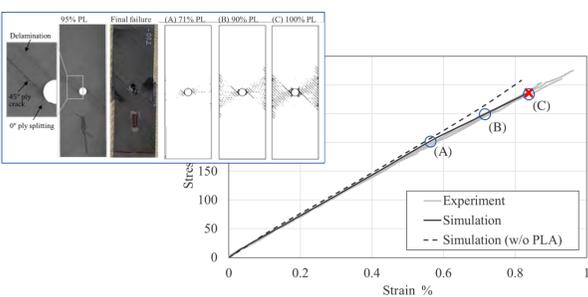
多次元の情報を近傍関係を維持しながら, 低次元に圧縮する手法。視覚的にデータ相互関係を理解しやすい。



98種類の有機材料の分析 (クラスタリングと物性値のヒートマップ)

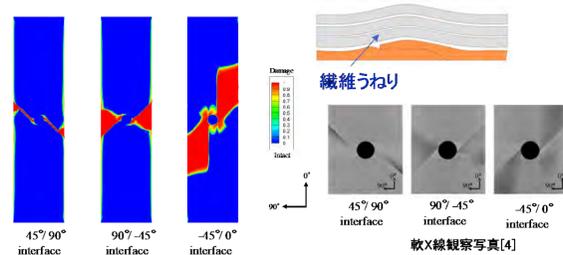
## ⑦ テーリング設計支援のための有孔破壊シミュレーション

拡張有限要素法 (XFEM) を用いてCFRP積層板の有孔引張・圧縮試験における荷重-変位応答, 強度, 破断ひずみ, 破断モードを評価可能



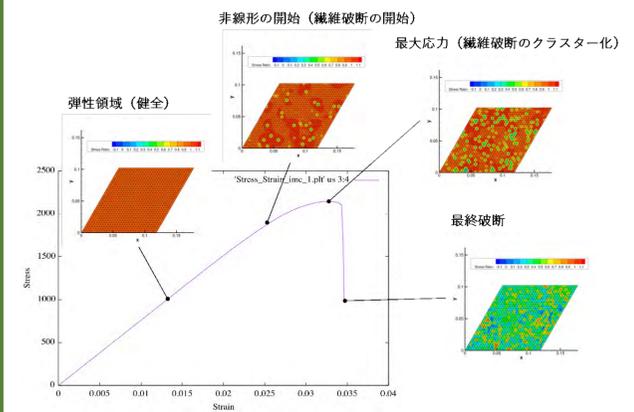
## ⑧ AFP時のギャップ成型を考慮に入れた複合材積層板の有限要素解析ツール

AFP (Automated Fiber Placement) 製造によるギャップやラップが内在する複合材積層板の力学的挙動を簡易モデルと小さい計算コストで予測する有限要素解析ツール



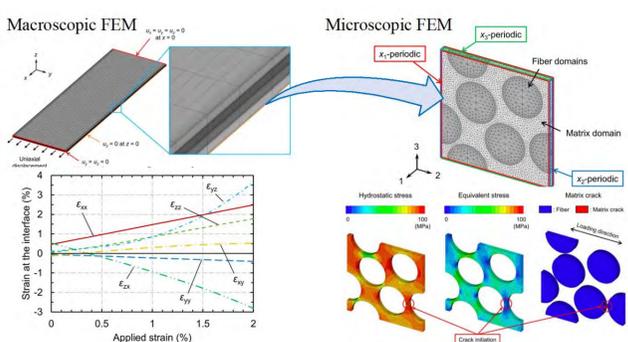
## ⑨ ばね要素モデル

繊維破断部近傍の隣接繊維表面に生じる応力集中係数を考慮した一方向材の引張強度予測モデル



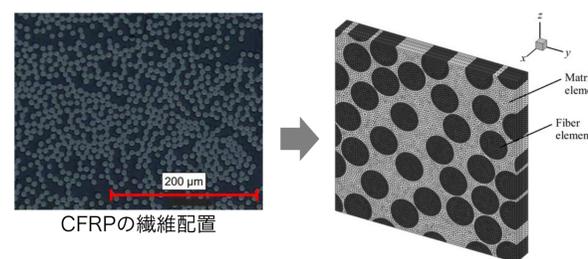
## ⑩ マルチスケール破壊シミュレーション

分離型2スケール有限要素解析によるCFRP積層板の破壊予測



## ⑪ 等価剛性モデル

周期セル解析では繊維と樹脂を再現した周期的な解析モデルを使用し, 複合材の等価剛性を計算。



\*同ツールが⑤⑩に内包されています

## ⑫ 複合材主翼の多目的最適設計シミュレーター

流体構造連成解析により航空機主翼の最適設計 (サイジング・形状) を実現

