AM 技術を活かすトポロジー最適化

Topology Optimization for Effective Use of Additive Manufacturing Technology

竹澤 晃 弘*

Akihiro TAKEZAWA

Key Words: Topology Optimization, Additive Manufacturing, Porous Materials, Lattice Structure, Composite Materials

1. 緒 言

近年、積層造形 (Additive Manufacturing) 技術の普及が急速に進んでいる。この方法は、従来の鋳造や鍛造、切削加工では製造が難しかった複雑形状も造形可能であり、極めて自由度の高い製造手法として注目を集めている。特に近年の技術進歩により、金属材料やマルチマテリアル樹脂においても微細な造形が可能になっている¹⁾。

他方、数値計算を活用し、優れた最適構造を高い自由度で導出可能なトポロジー最適化という技術がある²⁾。トポロジー最適化では中空構造を含む複雑な形状が最適解として導出される可能性があるが、積層造形を用いればその直接の実現も難しくはない。このようなトポロジー最適化と積層造形を組み合わせた活用法として、本論文では高性能ポーラス材料の開発について紹介する。

まずポーラス材料は軽量・高剛性・高衝撃吸収能・大表面積といった特徴を活用し、人工骨や熱交換器への応用が研究されてきたが、その製造法は材料溶融時の発泡によるものが主であり、内部構造の詳細な制御は困難であった。ポーラス材料の性能は内部構造に大きく依存するため、ポーラス材料において、意図した性能の定量的な実現は大きな課題であったと言える。それに対し、積層造形技術を適用すれば、意図した形状の内部構造を持つポーラス材料の製造が可能になるため、新たな高性能ポーラス材料の開発が期待できる。

ただし、ポーラス材料の設計法として、単純な形状及び基礎的な力学特性に関して簡易な力学モデルが提案されているものの³⁾、空間を自由に活用し最大限の性能を発揮させることは、人手による設計では難しい。それに対し、数値計算を活用し、優れた最適構造を高い自由度で導出可能なトポロジー最適化を用いればより高性能化が図れる。また、ポーラス材料の実効的 (effective、もしくは見かけ上の、巨視的な、マクロ) 性能は、均質化法⁴⁾を用いて内部構造より

計算が可能である。すなわち、トポロジー最適化を均質化法で求められる実効的物性値の向上を目的として行うことにより、高性能を実現する任意のポーラス材料内部構造が得られる。

以上の方法論で成された研究として、例えば、再生医療に用いる Scaffold の剛性・浸透率の最適設計⁵⁾、人工骨用に剛性を考慮した最適設計^{6),7)}、負のポアソン比を持つ材料^{8),9)}等が挙げられる。

そこで本論文では、上記の方法論に基づき、著者が実施した研究例として、金属積層造形を用いた軽量高剛性材料の開発、マルチマテリアル樹脂積層造形を用いた熱収縮材料の開発¹⁰⁾について紹介する。

2. 均質化法による実効的物性値の評価

本研究では、高剛性材料の開発において実効的剛性を考慮し、負熱膨張材料の開発においてはさらに実効的線膨張係数を考慮する。開発するポーラス材料は単位構造が周期的に配置されたものを考え、このような規則構造の実効的物性値は均質化法で導出することができる。その計算にあたり、まずポーラス内部構造における弾性変形問題において、熱ひずみを含む応力-ひずみ関係が以下のフックの法則で表されると考える。

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} (\varepsilon_{kl} - \Delta T \alpha_{kl}) = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} - \Delta T \beta_{ij} \quad (1)$$

ここで、 σ 、 C 、 ε 、 α 及び β はそれぞれ応力テンソル、弾性テンソル、ひずみテンソル、線膨張係数テンソル、単位温度変化あたりの熱応力テンソルである。また、 ΔT は温度変化である。さらに、周期配置された単位領域 Y を考慮し、実効的弾性テンソル C^H 、実効的線膨張係数テンソル α^H 、実効的熱応力テンソル β^H は以下のように計算できる。

$$C_{ijkl}^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y \left(C_{ijkl} - C_{ijpq} \frac{\partial \chi_p^{kl}}{\partial y_q} \right) dY \quad (2)$$

* 広島大学 大学院工学研究科 輸送・環境システム専攻 (〒739-8527 広島県東広島市鏡山 1-4-1)

Department of transportation and environmental engineering, Graduate school of Engineering, Hiroshima University
(1-4-1 Kagamiyama, Higashi-Hiroshima, Hiroshima 739-8527 Japan)

$$\alpha_{ij}^H = [C_{ijkl}^H]^{-1} \quad \beta_{ij}^H = [C_{ijkl}^H]^{-1} \frac{1}{|Y|} \int_Y \left(\beta_{pq} - C_{pqkl} \frac{\partial \psi_k}{\partial y_l} \right) dY \quad (3)$$

ここで、 χ と ψ はそれぞれ特性変位、特性温度変位であり、周期的境界条件の下で以下の式を解くことで得られる。

$$\int_Y C_{ijpq} \left(\delta_{pk} \delta_{ql} - \frac{\partial \chi_p^k}{\partial y_q} \right) \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dY = 0 \quad (4)$$

$$\int_Y \left(\beta_{ij} - C_{ijkl} \frac{\partial \psi_k}{\partial y_l} \right) \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dY = 0 \quad (5)$$

3. トポロジー最適化

トポロジー最適化の基本的な考え方は、固定設計領域と次式に示す特性関数 χ_Ω の導入にある。すなわち、最適構造 Ω_d を含む固定設計領域 D を最初に設け、その固定設計領域と特性関数 χ_Ω を用いて、最適化問題を材料分布問題に置き換えることにある。

$$\chi_\Omega(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \text{if } \mathbf{x} \in \Omega_d \\ 0 & \text{if } \mathbf{x} \in D \setminus \Omega_d \end{cases} \quad (6)$$

上式の χ_Ω を用いれば固定設計領域 D 内の座標 $\mathbf{x}$ における χ_Ω の 0-1 問題として、最適構造を決定することができる。しかし、この式に基づいて最適化を行う場合には、固定設計領域 D 内の全ての座標 $\mathbf{x}$ において、不連続関数 χ_Ω を評価するという、無限個の設計変数について不連続値を扱う問題になり、数学的に最適解が存在しないことが証明されている。この問題は、特性関数に関する最適化問題を、大域的な意味で連続な密度関数の最適化問題に置き換えることで解決され、その緩和法としては SIMP 法²⁾が代表的である。これらの方法では、緩和された最適化問題は、空孔を模した非常に弱い材料と母材とで構成される複合材料における、母材の体積含有率の最適化問題と解釈できる。このような最適化問題においては、構造か空孔か判断が困難なグレーの領域がしばしば生じるが、SIMP 法はこの複合材料における体積含有率を示す密度関数と物性値との関係の非線形性をパラメータにより調整でき、明確な構造を得易いという利点があるため、多くの研究で用いられている。そのため、本研究でもトポロジー最適化法として SIMP 法を用いる。

まず、金属積層造形を用いた高剛性ポーラス材料の開発に対して、ヤング率を以下の式で表す。

$$E(\phi) = \phi^3 E_0 \quad (7)$$

ここで、 ϕ は連続関数で近似した特性関数であり、仮想的な材料密度と解釈できる。また、 E^* は最適構造におけるヤング率、 E_0 は原材料のヤング率である。

さらに、マルチマテリアル樹脂積層造形を用いた熱収縮

材料の開発においては、材料の有無を表す関数 ϕ_1 に加え、材料の種類を表す関数 ϕ_2 を導入し、ヤング率 E 及び線膨張係数 α を以下のように表す。

$$E(\phi_1, \phi_2) = \phi_1^3 \{ \phi_2 E_1 + (1 - \phi_2) E_2 \} \quad (8)$$

$$\alpha(\phi_2) = \phi_2 \alpha_1 + (1 - \phi_2) \alpha_2 \quad (9)$$

ここで、 $E_{1,2}$ 及び $\alpha_{1,2}$ はそれぞれ材料 1、2 のヤング率及び線膨張係数である。

4. 最適化問題の設定

本研究では、高剛性材料の開発においては等方的な剛性を実現するものとする。これは、弾性テンソルにおいて垂直応力に対応する成分と、せん断応力に対応する成分が独立な二つの変数で表される必要がある。そのため、等方性からのずれを表現するペナルティ項を目標関数に加える。そして、等方性を実現されている仮定の下、体積弾性率の最大化を目指す。ポーラス単位構造の総体積を制約条件とし、最適化問題を以下のように表す。

$$\underset{\phi}{\text{minimize}} - \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 C_{ij}^H - \alpha \text{Error} \quad (i=1,2,3) \quad (10)$$

Subject to

$$\frac{\int_\Omega \phi d\mathbf{x}}{\int_\Omega d\mathbf{x}} \leq v_{\max}^f \quad (11)$$

$$0 \leq \phi \leq 1 \quad (12)$$

ただし、

$$\text{Error} = \frac{1}{6} \sum_{i=1}^3 C_{ii}^H - \frac{1}{12} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 (1 - \delta_{ij}) C_{ij}^H - \frac{1}{3} \sum_{i=4}^6 C_{ii}^H \quad (13)$$

また、 $v_{\max}^f$ は体積含有率の上限値である。

負熱膨張材料の開発においては、等方的な熱変形を考える。これは、最適解に幾何的な対称性を与えることで実現できる。最適化問題は、熱応力の最小化に加えて、ある程度の剛性を最適構造に持たせるため剛性項を与え、以下のように定式化する。

$$\underset{\phi_1, \phi_2}{\text{minimize}} - w^* C_{iii}^H - (1 - w)^* \beta_{ii}^H \quad (i=1,2) \quad (14)$$

$$0 \leq \phi_1, \phi_2 \leq 1 \quad (15)$$

以上の最適化問題において、設計変数 ϕ を勾配法で更新し、最適構造を得る。**Fig.1** に最適化のフローチャートを示す。

5. 積層造形用のモデル作成

積層造形においては、金属粉末や光凝固樹脂を、層ごとに選択的に熔融・凝固させ、積層させて三次元形状を造形

Fig.1 Flowchart of optimization algorithm.

する。そのため、造形の形状自由度が極めて高い。ただし、装置や材料に依存して、造形物の最小厚さや許容角度等に制約があり、それに違反するモデルは造形できない。また、内部の金属粉末や、樹脂サポート材を造形後に除去するため、ポーラス材料はそれらの除去に十分な大きさを有する空孔が互いに接続したオープンセル構造である必要がある。積層造形用の汎用三次元データは STL と呼ばれる形式であり、トポロジー最適化で得られた密度分布に対してアイソサーフェスを作成し、その形状を STL ファイルとして出力する。なお、この STL ファイル作成には FEM プリポストソフトウェアであるアルテアエンジニアリング社の HyperMesh を用いる。

6. 金属積層造形を用いた軽量高剛性材料の開発

まず、金属積層造形を用いて軽量高剛性材料を開発した例を紹介する。Fig.1 に示すのは、ユニットセルに等方性を持たせつつ、体積含有率 30 %、50 %、70 % (気孔率 70 %、50 %、30 %) の条件で最適化した例である。いずれも、最適解は当初クロズドセル構造で得られたため、立方体設計領域の対角方向に強制的に粉抜き穴を空けて最適化を実施した。なお、ある気孔率における、ポーラス材料の実効的物性値の限界値は Hashin-Strinkman の材料物性値境界¹¹⁾より求めることができる。今回の最適化では、いずれの体積含有率においても、その限界値に対して体積弾性率で約 85 % の値となった。なお、穴を除いて最適化で得られたクロズドセル構造においてはほぼ 100 % の値が得られたため、15 % の性能低下は強制的に設けた粉抜き穴によるものである。

Fig.2 Initial and optimal shapes of stiffness maximization problem. (a) Initial shape. (b) 30 % Volume fraction. (c) 50 % Volume fraction. (d) 70 % Volume fraction.

以上の最適解をもとに、材料にマルエージング鋼を用い、レーザ溶融方式の EOS 社 EOSINT M280 で試験片を造形した。なお、造形後には時効硬化のための熱処理を施した。Fig.2 に示すのが圧縮試験のための試験片である。ユニットセルの大きさを 5 mm とし、繰り返し配置することで 20 × 20 × 30 mm のサイズで造形した。まず、全ての体積含有率の試験片において、実効的ヤング率を計測した。n=2 で計測を行い、平均値でそれぞれ 27.65 GPa、46.84 GPa、66.54 GPa とバルク材料のヤング率 188 GPa に対して 14.7 %、24.9 %、35.4 % の値が得られた。なお、シミュレーションと実験との誤差は -10.5 %、-7.1 %、-3.1 % であった。これは、粉末積層造形においては表面近傍では溶融が不十分になり金属の密度が低下してしまうことから、全体の体積に対する表面積の割合が大きいほど剛性が低下することを意味していると考えられる。ただし、既存の類似研究^{6,7)}ではシミュレーションと実験の間に 50 % 以上の著しい乖離が見られたことを考えると本研究での誤差は許容範囲であるといえる。なお、既存研究ではユニットセルサイズを本研究のおよそ 70 %⁶⁾、40 %⁷⁾ の大きさに設定しており、表面近くの低密度領域の影響を強く受けていたと考えられる。

続いて、体積含有率 30 % の試験片に対して破断に至るまで圧縮試験を実施し、圧縮強度を計測した。Fig.3 に示すのが得られた実効的応力-ひずみ曲線、Fig.4 に示すのが破断時の試験片画像である。0.2 % 耐力及び圧縮強度はそれぞれ平均値で 200.8 MPa 及び 243.7 MPa で得られた。通常のポーラス材料のように、局所的な破壊を伴いながら徐々に圧壊していくのではなく、ユニットセルに等しく応

力が集中しせん断による破壊が一度に起こった。そのため、実効的応力－ひずみ曲線においてもポーラス材料特有のプラトー領域と呼ばれる応力が一定のままひずみが増加する領域は確認できなかった。ただ、局所的な破壊が起こりにくいことから、強度は通常のポーラス材料に比べて格段に向上しており、オープンセル材料の強度を求める近似式 $\sigma_{ps}^* = \sigma_{ps} f^{3/2}$ (σ_{ps}^* : ポーラス材料の実効的耐力、 σ_{ps} : 母材の耐力、 f : 体積含有率)³⁾ と比較した際には、141.1 % もの向上が確認できた。すなわち、構造強度部材としての性能は、従来

のポーラス材料と比較して格段に向上したことがわかる。

7. マルチマテリアル樹脂積層造形を用いた負熱膨張材料の開発

次に、マルチマテリアル光凝固樹脂積層造形を用いて、負熱膨張材料を開発した例を紹介する。線膨張係数が異なる複数材料を用いて、適切な形状でポーラス複合材料を構成することにより実効的な負熱膨張が実現できることが知られている¹²⁾。そこで本研究では光硬化性樹脂を用いてマルチマテリアルでの積層造形が可能な Stratasys 社の Objet Connex 500 を用いて、負熱膨張を示すポーラス複合材料を開発した。本機器で利用可能な低熱膨張性材料として、アクリルライク材料の VeroWhitePlus RGD835 を高熱膨張性材料としてゴムライク材料の FLX9895-DM を用いた。Table 1 にこれらの材料のヤング率及び線膨張係数を示す。線膨張係数は非常にばらついた値となったが、平均値では FLX9895-DM が VeroWhitePlus RGD835 よりも高い値を示した。また、VeroWhitePlus RGD835 と FLX9895-DM 間の大きな剛性差も確認できた。この計測結果に基づき、式 (8) において物性値を以下のように設定する。

(15)

Fig.6 (a) にトポロジー最適化で得られた最適解を示す。そして、最適解より抽出した STL ファイルの二次元図を

Fig.3 Pictures of test pieces fabricated by metal AM. (a) 30 % Volume fraction. (b) 50 % Volume fraction. (c) 70 % Volume fraction.

Fig.4 Effective stress - strain curves of the optimal porous with 30 % volume fraction.

Table 1 Young's modulus and CTEs of photopolymers.

	Temp (°C)	Young's modulus (MPa)		CTE ($\times 10^{-5} K^{-1}$)	
Vero	20	1996.2	± 111.2	-	
WhitePlus	30	1023.3	± 228	7.14	± 0.85
RGD835	40	288.5	± 34.6	8.96	± 1.56
FLX9895	20	67.8	± 2.4	-	
DM	30	13	± 5.4	8	± 1.64
	40	3.8	± 0.8	10.53	± 3.1

Fig.5 Pictures of broken test pieces.

Fig.6 Optimal configurations and 2D view of the STL model. (a) Original topology optimization result. (b) 2D view of the STL model generated from the topology optimization result. (c) Thermal deformation shape obtained from the reanalysis of the STL model.

Fig.7 Picture of a test piece. (a) Outline view. (b) Close-up view.

Fig.6 (b) に示す。設計領域角付近にアクリルライク材料の極めて細い部材が生じており、それはヒンジと解釈できるので、ある程度の厚さを有するゴム材料で置き換えるという修正を施した。さらに、**Fig.6 (c)** に熱変形図を示す。材料間の熱膨張差によるバイメタルに似た曲げが内部におこり、ヒンジによるメカニズムを通じて見かけ上の熱収縮が確かに生じた。

この最適解をユニットセル寸法を 10 mm として 4×2 でレイアウトし、**Fig.7** に示す試験片を造形した。レーザ走査式の熱膨張計 (SL-1600A、品川リフクトリーズ製) で長手方向のひずみを計測した結果を **Fig.8** に示す。N=3 の計測において、室温から約 40 °C の間で $-1.18 \sim -1.12 \text{ K}^{-1}$ の値が得られた。

8. 結言

本論文では、トポロジー最適化と積層造形技術を効果的に組み合わせる例として、両技術を用いた高性能ポーラス材料の開発について紹介した。基本的にはポーラス材料の実効的物性値を目的関数としてトポロジー最適化を実施し、得られた最適解を積層造形することにより、ポーラス材料の実効的物性値の設計が可能である。今回紹介した高

Fig.8 Axial strains of test pieces measured by a laser scanning dilatometer.

剛性材料、負熱膨張材料の開発においても、意図した機能を実現することができた。しかし、完全な設計には未だ課題も多い。例えば、高剛性ポーラス材料の開発においては、高強度という副次的な利点を得られたが、強度の定量的解析及び最適設計は難しい。実用化のためには強度も含めた最適設計技術の開発が必要であると考え。また、負熱膨張材料の開発においては、光硬化性樹脂の熱膨張特性が不安定なことから、意図した線膨張係数値の直接の実現は困難であった。また、ヒンジを内部構造に含むことから、剛性が極めて低いという欠点があった。これらの欠点は金属でのマルチマテリアル積層造形が可能な Direct Energy Deposition タイプ^{13),14)} の装置を用いることで改善される可能性がある。

謝辞

本研究はアルテアエンジニアリング株式会社のアカデミックオープンプログラムの支援を受け実施いたしました。ここに感謝の意を記します。

引用文献

- 1) I. Gibson, D. Rosen, and B. Stucker, Additive manufacturing technologies.: Springer, 2010.
- 2) M. P. Bendsøe and O. Sigmund, Topology Optimization: Theory, Methods, and Applications. Berlin: Springer-Verlag, 2003.
- 3) L. J. Gibson and M. F. Ashby, Cellular Solids: Structure and Properties, 2nd ed.: Cambridge University Press, Aug 1999.
- 4) J. M. Guedes and N. Kikuchi, "Preprocessing and postprocessing for materials based on the homogenization method with adaptive finite element methods," Comput. Meth. Appl. Mech. Eng., **83** (1990) 143-198.
- 5) S. J. Hollister, "Porous scaffold design for tissue engineering," Nat.

- Mater., **4** (2005) 518-524.
- 6) C. Y. Lin, T. Wirtz, F. LaMarca, and S. J. Hollister, "Structural and mechanical evaluations of a topology optimized titanium interbody fusion cage fabricated by selective laser melting process," J. Biomed. Mater. Res., **83** (2007) 272-279.
- 7) D. Xiao, Y. Yang, X. Su, D. Wang, and J. Sun, "An integrated approach of topology optimized design and selective laser melting process for titanium implants materials," Bio-Med. Mater. Eng., **23** (2013) 433-445.
- 8) J. Schwerdtfeger et al., "Design of auxetic structures via mathematical optimization," Adv. Mater., **23** (2011) 2650-2654.
- 9) E. Andreassen, B. S. Lazarov, and O. Sigmund, "Design of manufacturable 3D extremal elastic microstructure," Mech. Mater., **69** (2014) 1-10.
- 10) A. Takezawa, M. Kobashi, and M. Kitamura, "Porous composite with negative thermal expansion obtained by photopolymer additive manufacturing," APL Mater., **3** (2015) 076103.
- 11) Z. Hashin, "Analysis of composite materials – a survey," J. Appl. Mech., **50** (1983) 481-505.
- 12) O. Sigmund and S. Torquato, "Composites with extremal thermal expansion coefficients," Appl. Phys. Lett., **69** (1996) 3203-3205.
- 13) W. E. Frazier, "Metal additive manufacturing: A review," J. Mater. Eng. Perform., **23** (2014) 1917-1928.
- 14) Q. Yang et al., "Finite element modeling and validation of thermomechanical behavior of Ti-6Al-4V in directed energy deposition additive manufacturing," Addit. Manuf., **12** (2016) 169-177.