フェーズフィールド法と感度解析に基づく構造最適化*

竹澤 晃弘^{*1}, 西脇 眞二^{*2}, 北村 充^{*1}Structural Optimization Based on the Phase Field Method
and Sensitivity AnalysisAkihiro TAKEZAWA^{*3}, Shinji NISHIWAKI and Mitsuru KITAMURA^{*3} Department of Social and Environmental Engineering, Hiroshima University,
1-4-1 Kagamiyama, Higashi-Hiroshima-shi, Hiroshima, 739-8527 Japan

This paper discusses a structural optimization method that achieves optimum shape and topology based on the phase field method. The proposed method has the same functional capabilities as a structural optimization method based on the level set method. Since the proposed method does not require extra operations such as re-initialization of the level set function or smoothing of sensitivities, the computational cost is lower than that of typical level set methods. Structural shapes are represented by the phase field function defined in the design domain and optimization of this function is performed by solving a time-dependent reaction diffusion equation. The artificial double-well potential function used in the equation is derived from sensitivity analysis. The proposed method is applied to a two-dimensional linear elastic problem. The provided numerical examples illustrate the convergence of the compliance minimization problem.

Key Words: Shape Optimization, Topology Optimization, Phase Field Method, Sensitivity Analysis, Level Set Method

1. 緒 言

ある条件下における機械構造物の最適設計案を考えることは、機械設計者及び研究者にとって非常に重要な課題である。このような構造最適化問題は、偏微分方程式で状態が表される領域において、領域形状を設計変数として、ある物理量を最適化する問題として定式化され、様々な解法が提案されてきた。構造最適化の一般的な分類として、対象となる領域の境界形状の最適化を行う形状最適化と、対象の形状のみならず形態も最適化可能なトポロジー最適化とが挙げられる。形状最適化は、非常に長い歴史を持ち、多くの研究者によって発展させられてきた(例えば⁽¹²⁾⁽¹⁸⁾⁽²¹⁾)。しかし、従来の一般的な方法においては二つの欠点がある。一つは領域の状態を表現する偏微分方程式を数値計算で解く際に、有限要素法を用いるのが一般的なため、解析の精度を保つためには領域の形状の更新に伴い有限要素メッシュを再生成する必要があり、計算コストが非常に高いこと。もう一つは、スプライン関数等で領域を表現するため、境界同士の接触による穴の

消失等の境界のトポロジー変化を表現できないことである。他方、トポロジー最適化は Bendsøe と Kikuchi⁽⁴⁾によって初めて形状・形態最適化手法として実装された。この方法は、領域最適化問題を、均質化法に基づき複合材料の材料密度分布最適化問題として表すため、領域の形状のみならず形態も最適化可能であり、様々な工学的問題に適用されている⁽⁶⁾。しかし、材料密度分布で表された最適解から明確な構造を得ることが難しいことや、圧力や熱放射等の境界形状に依存するような境界条件の設定が困難であることという問題点がある。

近年、これらの問題を解消する方法として、レベルセット法に基づく構造最適化が提案された。この方法は Sethian による応力制約に基づく構造最適化⁽²⁰⁾、Osher の二相複合材料の最適化⁽¹⁶⁾の研究をきっかけに、Allaire⁽¹⁾と Wang⁽²²⁾によって、感度解析に基づく一般的な構造最適化手法として提案された。レベルセット法は Osher と Sethian⁽¹⁷⁾によって平均曲率流の数値計算法として提案され、現在では数値流体力学、画像処理等の様々な分野における移動境界問題に適用されている。レベルセット法では、領域の境界が陰関数を用いて表現されるため、空間に固定されたメッシュを用いて数値計算が可能であり、最適化の過程で計算コスト

* 原稿受付 2009年4月10日。

^{*1} 正員、広島大学大学院工学研究科社会環境システム専攻
(〒739-8527 広島市鏡山1-4-1)。^{*2} 正員、京都大学大学院工学研究科機械理工学専攻(〒606-8501 京都市左京区吉田本町)。

E-mail: akihiro@hiroshima-u.ac.jp

トが一定である点や、境界同士の接触、穴の消失といった形態の変化が実現可能である点等の利点がある。しかし、最適化の過程で、数値計算の精度を保つためにはレベルセット関数の符号付き距離関数への再初期化が必要である点や、滑らかな最適形状を得るためには、ハミルトン・ヤコビ方程式の速度関数を滑らかにする操作が必要である点等、計算コストの増加に繋がる特性も伴っている。

他方、レベルセット法と同様に平均曲率流を含む移動境界を表現可能な方法として、フェーズフィールド法⁽⁷⁾⁽¹⁰⁾⁽¹⁴⁾がある。フェーズフィールド法は相転移をシミュレートする方法として開発され、レベルセット法と同様に様々な移動境界問題に適用されてきた。さらに、フェーズフィールド法のトポロジー最適化への適用もいくつか提案されている⁽⁸⁾⁽⁹⁾⁽²³⁾⁽²⁴⁾⁽²⁶⁾⁽²⁷⁾。しかし、フェーズフィールド法がレベルセット法と同様に、境界移動に基づく構造最適化法として実装された例はない。そこで、本研究では、フェーズフィールド法を用い、空間に固定したメッシュでの計算が可能で、形態変化も実現可能というレベルセット法と同様の特性を持ち、かつ、レベルセット関数の再初期化とハミルトン・ヤコビ方程式の速度関数を滑らかにする操作が不要な構造最適化法の構築を目指す。

2. フェーズフィールド法について

2.1 フェーズフィールド関数と発展方程式

フェーズフィールド法⁽⁷⁾⁽¹⁰⁾⁽¹⁴⁾は物質の相転移現象における移動境界をシミュレートするための方法として開発された。フェーズフィールド法では、領域全体に相の状態を表すフェーズフィールド関数を設定し、それぞれ異なる相に対応する値を設定する。これにより、領域内のある箇所における相の状態が関数の値により決定される。異なる相間の境界では、フェーズフィールド関数は滑らかに補間され、その領域は拡散インターフェイスと呼ばれる。領域内に二つの相が存在するとき、フェーズフィールド関数を $\phi(\mathbf{x})$ とし、二つの相にそれぞれ $\phi = 0$, $\phi = 1$ とした場合の例を図1に示す。このフェーズフィールド関数を用いて、二つの相に関する Van der Waals の自由エネルギーは以下のように表される。

$$F(\phi) = \int_{\Omega} \left\{ \frac{\varepsilon}{2} |\nabla \phi|^2 + \varepsilon^{-1} f(\phi) \right\} dV \quad (1)$$

第一項は平均場理論における干渉エネルギーを表し、第二項の $f(\phi)$ は二重井戸型ポテンシャルを表す。図1のように二つの相にそれぞれ $\phi = 0, \phi = 1$ が対応する場合は、 $f(\phi)$ は $f'(0) = f'(1) = 0$ という性質を持つ。この二重井戸型ポテンシャルは、それぞれの相では自

(a) A 2D domain represented by phase field function

(b) 1D illustration of phase field function

Fig. 1 Example of domain represented by phase field function

由エネルギーが極小値をとり、安定となることを意味する。また、異なる相間でフェーズフィールド関数が急激に変化し勾配が大きくなることは、第一項の値の増加に繋がるため、結果的にその間に $0 < \phi < 1$ の値をとる微小なインターフェイス領域が生じ、関数は滑らかに補間される。

次に、このフェーズフィールド関数の時間変化を決定する発展方程式について述べる。式(1)が減少するように、フェーズフィールド関数 ϕ が変化率 $M(\phi) > 0$ で時間変化すると仮定すると、

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M(\phi) \frac{\delta F(\phi)}{\delta \phi} \quad (2)$$

が得られる。式(2)に式(1)を代入すると、次式が得られる。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M(\phi) \{ \varepsilon \nabla^2 \phi - \varepsilon^{-1} f'(\phi) \} \quad (3)$$

式(3)は Allen-Cahn 方程式⁽²⁾と呼ばれ、非保存場のフェーズフィールド関数の発展方程式として用いられる。

2.2 フェーズフィールド法における界面移動について

フェーズフィールド関数が式(3)のAllen-Cahn方程式に従い時間発展するとき、その系においては、十分時間がたてば拡散インターフェイス領域が形成され、それが法線方向に次式で表される速度で移動することが知られている。

$$v = s + \frac{1}{t}H + O\left(\frac{1}{t^2}\right), t \gg 1 \quad (4)$$

ここで、 s は二重井戸型ポテンシャルによって定まる定数であり、 H は拡散インターフェイスの曲率を表す。拡散インターフェイス領域のポテンシャルにおいて、極小値間に差がある場合には、小さな極小値の方向に関数 ϕ が変化するように速度 s が定まる。二重井戸型ポテンシャルの二つの極小値が等しい場合には、 s は0となり、式(4)は完全な平均曲率運動を表す。このことは文献⁽³⁾⁽¹¹⁾⁽¹⁹⁾等で証明されている。本研究では、この拡散インターフェイスの法線方向の移動速度に関する性質を用いて、フェーズフィールド法を用いた新たな構造最適化法を提案する。

3. 定式化

3.1 フェーズフィールド関数を用いた領域表現

ここでは、状態の時間変化がAllen-Cahn方程式に基づく系において、インターフェイスの移動が式(4)で表されることを利用し、レベルセット法に基づく構造最適化と同様の機能を持つ構造最適化法を定式化する。最初に、 d 次元実数空間に属する、体積が一定値 V となる領域 Ω の最適化問題を考える。このとき、図2(a)に示すように、 Ω を包括するような設計領域 D を考え、その中の許容される解の集合 $\mathcal{U}_{ad}$ を以下のように定義する。

$$\mathcal{U}_{ad} = \{\Omega \subset D \mid \Omega \in \mathbb{R}^d, |\Omega| = V_0\} \quad (5)$$

このとき、領域 Ω の最適化問題は以下のように定義される。

$$\inf_{\Omega \in \mathcal{U}_{ad}} J(\Omega) \quad (6)$$

ここで、 $J(\Omega)$ は領域 Ω で定義される、任意の目標関数である。ここでは、この問題の数値解法として、レベルセット法に基づく構造最適化と同様に、設計領域 D 全体にフェーズフィールド関数 ϕ を定義し、領域 Ω を表すことを考える。即ち、図2(b)に示すように、 $\Omega_1 \subset \Omega$ となる Ω_1 と、 $\Omega_0 \subset D \setminus \Omega$ となる Ω_0 を定義し、さらに、領域 D のうち Ω_1 と Ω_0 の間に、微小な厚みを持つ領域 ξ が存在すると仮定し、 $\xi \subset D \setminus (\Omega_1 \cup \Omega_0)$ を定義する。即ち、以下の関係が成り立つと仮定する。

$$\Omega \subset (\Omega_1 \cup \xi), D \setminus \Omega \subset (\Omega_0 \cup \xi) \quad (7)$$

このとき、これらの領域 Ω_1 と Ω_0 をフェーズフィールド関数を用いて以下のように表す。

$$\begin{aligned} \phi &= 1 \iff x \in \Omega_1 \\ 0 < \phi < 1 &\iff x \in \xi \\ \phi &= 0 \iff x \in \Omega_0 \end{aligned} \quad (8)$$

Fig. 2 Example of domain representation

以上の定義において、境界 $\partial\Omega$ は ξ 内に存在することが示されているが、その位置は不定である。即ち、式(8)によって領域 Ω が厳密に表されるわけではない。しかし、領域 ξ の厚みは微小であり⁽¹⁵⁾、その厚みが十分小さい場合は、 $\partial\Omega \approx \xi$ と見なすことができる。このとき、 $\Omega \approx \Omega_1$ となり、領域 Ω が ϕ で近似的に表されることになる。

3.2 最適化問題の定式化 領域 D における線形弾性問題を考える。領域 Ω_1 が弾性テンソル A を有する材料で構成され、領域 Ω_0 はほぼ空孔とみなせる非常に弱い材料で構成されているとする。このとき、領域 D における弾性テンソル A^* を以下のように定義する。

$$A^*(x) = \begin{cases} A & \text{if } x \in \Omega_1 \\ \max(10^{-3}, \phi^3)A & \text{if } x \in \xi \\ 10^{-3}A & \text{if } x \in \Omega_0 \end{cases} \quad (9)$$

ここで、領域 ξ においては、材料の存在が明確に定義できないため、弾性テンソルの厳密な導出が不可能であるため、トポロジー最適化法の一つであるSIMP法⁽⁵⁾を参考に物性定数を仮定する。さらに、領域 D の境界 ∂D のうち、ディリクレ境界条件が設定される境界を ∂D_D 、ノイマン境界条件が設定される境界を ∂D_N とする。今、領域 D が境界 ∂D_D で完全固定され、領域 D に作用する体積力が0であるとし、境界 ∂D_N に分布荷重 g が作用するものとする、領域 D にお

る線形弾性問題は弱形式で以下のように表される。

$$\int_D \mathbf{A}^* \mathbf{e}(\mathbf{u}) : \mathbf{e}(\mathbf{v}) dx = \int_{\partial D_N} \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} ds, \text{ for } \mathbf{u} \in V, \forall \mathbf{v} \in V \quad (10)$$

Where

$$V = \{\mathbf{v} \in H^1(\Omega)^N \mid \mathbf{v} = 0 \text{ on } \partial D_D\} \quad (11)$$

$$\mathbf{e}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} \{\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T\} \quad (12)$$

ここで、 $\mathbf{u}$ は変位ベクトル、 $\mathbf{v}$ はテスト関数、 $\mathbf{e}$ はひずみテンソル、 $:$ はテンソルプロダクトを表す。

本研究では、線形弾性問題における最も基本的な最適化問題である、コンプライアンス（外力によって成される仕事）最小化問題を扱う。目標関数とするコンプライアンスは以下で表される。

$$J(\phi) = \int_{\partial D_N} \mathbf{g} \cdot \mathbf{u} ds \quad (13)$$

また、以上の目標関数に、式(5)に含まれる体積制約を、ラグランジュ未定乗数 μ を乗じて加え、最適化問題を以下のように定式化する。

$$\min_{\phi} \bar{J}(\phi) = J(\phi) + \mu \int_D \phi(\mathbf{x}) dx \quad (14)$$

3.3 フェーズフィールド関数の時間発展方程式の定式化 最適化の繰り返し計算に対応する仮想的な時間 $t(0 < t_1 \leq t \leq t_2)$ を設定したとき、フェーズフィールド関数 ϕ を、以下の方程式に従い更新する。

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \kappa \nabla^2 \phi - f'(\phi), & t_1 \leq t \leq t_2 \\ \frac{\partial \phi}{\partial n} = 0 \text{ on } \partial D \end{cases} \quad (15)$$

このとき、2.2 節で述べたように、この領域内における拡散インターフェイスはその法線方向に式(4)に表される速度で移動する。ここで、 $f(\phi)$ を以下のように定める。

$$f(\phi) = W(\mathbf{x})w(\phi) + G(\mathbf{x})g(\phi) \quad (16)$$

ここで、 $w(\phi)$ は $w(0) = w(1) = w'(0) = w'(1) = 0$ を満たす関数、即ち等しい極小値を持つ二重井戸型ポテンシャルで、 $W(\mathbf{x})$ はポテンシャル中央の高さを決定する係数である。また、 $g(\phi)$ は $g(0) = 0, g(1) = 1, g'(0) = g'(1) = 0$ を満たし $0 < \phi < 1$ で単調増加の関数であり、 $G(\mathbf{x})$ はその係数であり、この項により、ポテンシャル $f(\phi)$ の極小値間に差が与えられる。2.2 節で述べたように、式(15)で $f(\phi)$ の運動が表されるとき、拡散イン

ターフェイスは、その箇所におけるポテンシャル $f(\phi)$ の低い極小値の方向に ϕ が変化するように移動する。ここで、最適化過程で、この拡散インターフェイスが目標関数を減少させる方向に移動するように $G(\mathbf{x})$ を以下のように定める。

$$G(\mathbf{x}) = h \bar{J}'(\phi_{t_1}) \quad (h > 0) \quad (17)$$

ここで、 ϕ_{t_1} は時間 t_1 におけるフェーズフィールド関数を表す。これにより、関数 f の概形は図3に示すようになる。

式(17)を式(15)に代入すると、以下の式が得られる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} &= \kappa \nabla^2 \phi - \frac{\partial}{\partial \phi} \{W(\mathbf{x})w(\phi) + h \bar{J}'(\phi_{t_1})g(\phi)\} \\ &= \kappa \nabla^2 \phi - \{W(\mathbf{x})w'(\phi) + h \bar{J}'(\phi_{t_1})g'(\phi)\} \end{aligned} \quad (18)$$

この式により、拡散インターフェイスは、時間 $t_1 \leq t \leq t_2$ で感度 $\bar{J}'(\phi_{t_1})$ に基づき、目標関数が減少する方向に移動する。即ち、図3において、関数 ϕ が二つの極小値のうち、低い値の方向に変化する。以下、この原理を簡単に説明する。領域内のある点 $\mathbf{x}$ において $0 < \phi < 1$ となる場合、即ちこの点が拡散インターフェイス内に存在すると判断される場合は、図3からも明らかなように、 $f'(\phi) \neq 0$ となるため、 $-f'(\phi)$ の項の影響により、 ϕ は0か1に向かって値が変化する。しかし、これだけでは、 ϕ が0と1のどちらへ収束するかは、 f の形と ϕ の初期値のみに依存し、高い方の極小値へ値が収束する可能性もある。しかし、 ϕ にはさらに ϕ を0か1からそれを補間するような $0 < \phi < 1$ の状態へと変化させようとする（図1参照）拡散項の影響が働く。よって ϕ が仮に高い極小値に収束しようとしても、拡散項の影響により $0 < \phi < 1$ の状態へ押し戻されてしまう。対して、 ϕ が低い極小値に収束した場合は、関数の中央付近に存在する高い山の影響もあり、拡散項の影響があっても容易に値が変化しない。結果的に、 ϕ は $0 \leq \phi \leq 1$ の範囲で f が最小となる、0か1のどちらかの値に収束する。

以上より、 $\bar{J}'(\phi_{t_1}) > 0$ の場合は $f'(0) < f'(1)$ となり ϕ は減少する。 $\bar{J}'(\phi_{t_1}) < 0$ の場合は $f'(0) > f'(1)$ となり ϕ は増加する。このことより、拡散インターフェイス内の関数 ϕ の変化は、時間ごとの変化量を表す係数 $a(t) > 0$ を仮定して、以下のように近似的に表すことができる。

$$\phi_2(\mathbf{x}) \approx \phi_1(\mathbf{x}) - a(t_1) \bar{J}'(\phi_{t_1}), \mathbf{x} \in \xi \quad (19)$$

式(19)は、最急降下法において、設計変数がステップ幅 $a(t) > 0$ で更新される場合の式と同一であり、本手

法では、領域 Ω において目標関数の減少が最急降下法と同様に保障されていることを示す。

Fig. 3 Sketch of double well potential

3.4 感度解析 本研究では、式(17)のポテンシャルの決定に目標関数 $J(\phi)$ の感度を用いるため、ここではその導出を行う。最初に、式(13)の ϕ に関する θ 方向へのフレシェ微分（以下微分と表記する）は以下のように得られる。

$$\begin{aligned} \langle J'(\phi), \theta \rangle &= \int_{\partial D_N} \mathbf{g} \cdot \langle \mathbf{u}'(\phi), \theta \rangle ds \\ &= \int_{\partial D_N} \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} ds \end{aligned} \quad (20)$$

ただし、 $\mathbf{v} = \langle \mathbf{u}'(\phi), \theta \rangle$ とする。次に、随伴状態 $\mathbf{p}$ を用いて、ラグランジアン $L(\phi)$ を以下のように定義する。

$$L(\phi) = \int_{\partial D_N} \mathbf{g} \cdot \mathbf{u} ds + \left(\int_D \mathbf{A}^*(\phi) \mathbf{e}(\mathbf{u}) : \mathbf{e}(\mathbf{p}) dx - \int_{\partial D_N} \mathbf{g} \cdot \mathbf{p} ds \right) \quad (21)$$

このラグランジアンを用いて、式(20)は以下のようにも表される。

$$\begin{aligned} \langle J'(\phi), \theta \rangle &= \left\langle \frac{\partial L}{\partial \phi}(\phi, \mathbf{u}, \mathbf{p}), \theta \right\rangle + \left\langle \frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}}(\phi, \mathbf{u}, \mathbf{p}), \langle \mathbf{u}'(\phi), \theta \rangle \right\rangle \\ &= \left\langle \frac{\partial L}{\partial \phi}(\phi, \mathbf{u}, \mathbf{p}), \theta \right\rangle + \left\langle \frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}}(\phi, \mathbf{u}, \mathbf{p}), \mathbf{v} \right\rangle \end{aligned} \quad (22)$$

第二項を展開すると、

$$\left\langle \frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}}(\phi, \mathbf{u}, \mathbf{p}), \mathbf{v} \right\rangle = \int_{\partial D_N} \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} ds + \int_D \mathbf{A}^*(\phi) \mathbf{e}(\mathbf{v}) : \mathbf{e}(\mathbf{p}) dx \quad (23)$$

$\left\langle \frac{\partial L}{\partial \phi}(\phi, \mathbf{u}, \mathbf{p}), \theta \right\rangle = 0$ のとき、 $\mathbf{p} = -\mathbf{u}$ とおくと、式(23)は式(10)に等しくなる。即ち、この問題は自己随伴問題である。また、式(10)の両辺を ϕ で微分する。

$$\begin{aligned} & \int_D \langle \mathbf{A}^{*'}(\phi), \theta \rangle \mathbf{e}(\mathbf{u}) : \mathbf{e}(\mathbf{p}) dx \\ & + \int_D \mathbf{A}^*(\phi) \mathbf{e}(\langle \mathbf{u}'(\phi), \theta \rangle) : \mathbf{e}(\mathbf{p}) dx \\ & = \int_D \mathbf{A}^{*'}(\phi) \mathbf{e}(\mathbf{u}) : \mathbf{e}(\mathbf{p}) \theta dx + \int_D \mathbf{A}^*(\phi) \mathbf{e}(\mathbf{v}) : \mathbf{e}(\mathbf{p}) dx \\ & = 0 \end{aligned} \quad (24)$$

式(23)と式(24)を式(20)に代入して、両辺を比較すると、 $J'(\phi)$ の ϕ に関する感度が以下の式で得られる。

$$J'(\phi) = -\mathbf{A}^{*'}(\phi) \mathbf{e}(\mathbf{u}) : \mathbf{e}(\mathbf{u}) \quad (25)$$

4. 数値計算法の実装

4.1 アルゴリズム 以上の議論をふまえ、最適化アルゴリズムを以下のように構築する。

1. 初期形状 Ω_0 に対応する ϕ の初期値を決定する。
2. 目標関数が収束するまで以下のループを繰り返す。
 - (a) 有限要素法により変位 $\mathbf{u}$ を計算する。
 - (b) 目標関数を計算する。
 - (c) 目標関数の感度を導出し、二重井戸型ポテンシャル $f(\phi)$ を式(16)より計算する。
 - (d) 式(15)の反応拡散方程式を有限差分法で解く。

4.2 任意関数の設定 本研究では、式(16)に用いる関数を、文献⁽²⁵⁾を参考に以下のように設定する。

$$g(\phi) = \phi^3(6\phi^2 - 15\phi + 10), \quad w(\phi) = \phi^2(1 - \phi^2) \quad (26)$$

関数 g と w の概形をそれぞれ図4に示す。関数 g は $g(0) = 0, g(1) = 1$ となる、式(16)の関数 f において $f(0)$ と $f(1)$ の間に高低差を設定する関数である。また、関数 w は $w(0) = 0, w(1) = 0$ となる、関数 f において $f(0)$ と $f(1)$ の間に存在する山の高さを設定する関数である。さらに、関数 $w(\phi)$ の係数 $W(\mathbf{x})$ は $W(\mathbf{x}) = \frac{1}{0.53}H(\mathbf{x})$ とする。

Fig. 4 Sketches of the functions g and w

4.3 有限差分法における時間の更新幅の決定法 ここで、式(15)を解くための有限差分法について補足する。本研究では陰解法を用いて関数 ϕ を更新する。このとき、時間 t の更新幅 Δt は、最急降下法における最急降下幅に相当するため、効率的な収束を得るためには適切な値を設定する必要がある。そのため、 Δt を以下のように更新する。 k 回目の繰り返し計算における関数 ϕ の値を ϕ_k 、目標関数の値を $\bar{J}_k(\phi_k)$ 、時間 t

の更新幅を Δt_k , 目標関数の変化率の閾値を $\varepsilon_f > 0$ とすると,

1. $\frac{J_k(\phi_k) - J_{k-1}(\phi_{k-1})}{J_{k-1}(\phi_{k-1})} \leq \varepsilon_f$ のとき.
 - $\Delta t_{k+1} = \max(1.5\Delta t_k, \Delta t_{\max})$ として, $k+1$ 回目の繰り返し計算へ.
2. $\frac{J_k(\phi_k) - J_{k-1}(\phi_{k-1})}{J_{k-1}(\phi_{k-1})} > \varepsilon_f$ のとき.
 - $\Delta t_k = 0.5\Delta t_k$ として, k 回目の繰り返し計算をやり直し, ϕ_k を再導出する.
 - 1 の条件を満たすまで, これを繰り返す.

5. 数 値 例

簡単な数値例を用いて本手法の妥当性を検証する. 簡単のため, 各物理量は無次元化された単位量として扱う. いずれの数値例においても, 材料のヤング率 E は 1.0, ポアソン比 ν は 0.3 とする. 式 (15) の計算においては, 有限要素法による $f(\phi)$ の計算と, 有限差分法による ϕ の更新を 1 ステップずつ交互に行い, 有限要素法と有限差分法においては共通のメッシュを使用するものとする. また, 有限要素の定式化にはアイソパラメトリック要素を用いる,

5.1 片持ち梁の剛性最大化問題 最も有名なベンチマーク問題として, 二次元片持ち梁の最適化を行う. 設計領域を図 5 に示す. 設計領域は 2×1 の長方形で, 設計領域の左端を完全固定し, 右端中央に垂直荷重 1.0 を作用させる. この領域を 200×100 個の長方形メッシュで分割し, 式 (14) のラグランジュ未定乗数 μ は定数 80 とする. 式 (15) の繰り返し計算一回分の時間更新幅の最大値 $\Delta t_{\max}$ は 50, また, 係数は $\kappa = 5 \times 10^{-6}$, $h = 2.0$ と設定する.

Fig. 5 A design domain for the cantilever example

図 6 にそれぞれ, 初期形状, 10 回目の繰り返し計算で得られた構造, 100 回目の繰り返し計算で得られた最適構造を示す. これより, 本手法において, 最適化過程で穴の消失のトポロジー変化が起こり, 妥当な最適構造へと収束することがわかる. また, 目標関数の収束過程を図 7 に示す. 約 100 回の繰り返し計算最適解への収束しており, 他の方法と比較しても妥当な収束性といえる. また, 繰り返し計算の一回目に目標関

Fig. 7 The convergence history of the objective function of the cantilever example

数の値が大きく上昇しているが, これは, 図 6(a) に示す初期形状には拡散インターフェイスが存在せず, 繰り返し計算の一回目はその生成のみが行われ, 感度解析に従う移動は二回目以降の繰り返し計算でのみ行われるためである.

5.2 初期解依存性の検証 次に, 最適解の初期解依存性について検証する. 図 10 の (a) と (c) に示す二種類の構造を初期解として, 前例題と同様の設定で最適化を行う. 図 10 の (b) と (d) にそれぞれの場合に得られた最適構造を示す. 図と図 10 それぞれ全く異なる形状が得られており, 本手法が初期解依存性を示すことがわかる. これは, 本手法における最適化が, 境界移動にのみ基づいており, 最適化過程で穴の生成が起こりえず, 局所最適解に陥るためであると考えられる.

5.3 メッシュ依存性の検証 次に, 本手法のメッシュ依存性を同じ問題で検証する. 図 5 の領域を 100×50 個の長方形メッシュで分割して計算を行う. 式 (15) において $\kappa = 2 \times 10^{-5}$ と設定し, 初期構造とその他パラメータは前の例題と同様とする. 図 9 に, 五回目の繰り返し計算で得られた構造と, 五十回目の繰り返し計算で得られた最適解を示す. 図 6 とほぼ同一の形状が得られていることがわかる.

次に, 領域を三角形メッシュで分割する場合について検証する. 図 5 の領域を総数 41421 個と 10325 個との二通りの三角形メッシュで分割して計算を行う. 式 (15) において, 細かいメッシュに対しては $\kappa = 5 \times 10^{-6}$ と設定し, 荒いメッシュに対しては $\kappa = 2 \times 10^{-5}$ とそれぞれ設定する. この非構造メッシュを用いた式 (15) の計算には有限体積法⁽¹³⁾を用いる. 図 10 にそれぞれのメッシュ分割で得られた最適解を示す. この場合にも, 図 6 とほぼ同一の形状が得られていることがわかる. 以上の検討により, 本手法においては, 式 (15) の

Fig. 6 Optimal configurations of the cantilever example on a 200×100 mesh at iterations 10 and 100

Fig. 8 Another initial shapes and optimal configurations for cantilever optimization example

パラメータ κ の適切な設定により、メッシュ依存性が回避できることがわかった。

6. 結 言

本研究では、フェーズフィールド法を用い、空間に固定したメッシュで数値計算可能で、穴の消失等のトポロジー変化を実現可能な構造最適化法を提案し、簡単な数値例により本研究で提案する方法の妥当性を検証した。結果を以下に示す。

1. 最適化の対象とする領域をフェーズフィールド関数により表現した。
2. 感度解析の結果に基づき極小値が決定される二重井戸型ポテンシャルを設定し、仮想的な時間発展とともに設計変数が目標関数を減少させるように変化する時間発展方程式を構築した。
3. 最適化問題として、剛性最大化問題を考え、目標関数を定式化した。また、目標関数のフェーズ

フィールド関数に関する感度を導出した。

4. 以上の定式化に基づき、有限要素法と有限差分法を用いた最適化アルゴリズムを構築した。
5. 簡単な数値例により、本研究で提唱する方法論の検証を行った。本研究で妥当な最適解が得られること、初期解依存性を有すること、パラメータの適切な設定によりメッシュ依存性を回避できることがわかった。

文 献

- (1) G. Allaire, F. Jouve, and A.M. Toader. Structural optimization using sensitivity analysis and a level-set method, *Journal of Computational Physics*, Vol. 194, No. 1(2004), pp.363–393.
- (2) S. M. Allen and J. W. Cahn. A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening, *Acta Metallurgica*, Vol. 27, (1979), pp.1085–1095.

(a) Iteration 5

(b) Iteration 50

Fig. 9 Optimal configurations of the cantilever example on a rougher 100×50 mesh at iterations 5 and 50

(a) On a finer mesh

(b) On a rougher mesh

Fig. 10 Optimal configurations of the cantilever example on triangle meshes

- (3) G. Barles, H. M. Soner, and P. E. Souganidis. Front propagation and phase field theory, *SIAM Journal on Control and Optimization*, Vol. 31, (1993), pp.439–469.
- (4) M. P. Bendsøe and N. Kikuchi. Generating optimal topologies in structural design using a homogenization method, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 71, No. 2(1988), pp.197–224.
- (5) M. P. Bendsøe and O. Sigmund. Material interpolation schemes in topology optimization. *Archive of Applied Mechanic*, Vol. 69, No. 9(1999), pp.635–654.
- (6) M. P. Bendsøe and O. Sigmund. *Topology Optimization: Theory, Methods, and Applications*, (2003), Springer-Verlag.
- (7) W. J. Boettinger, J. A. Warren, C. Beckermann, and A. Karma. Phase-field simulation of solidification. *Annual Review of Materials Research*, Vol. 32, (2002), pp.163–194.
- (8) B. Bourdin and A. Chambolle. Design-dependent loads in topology optimization. *ESAIM Control, Optimisation and Calculus of Variations*, Vol. 9, (2003), pp.19–48.
- (9) M. Burger and R. Stainko. Phase-field relaxation of topology optimization with local stress constraints. *SIAM Journal on Control and Optimization*, Vol. 45, No. 4(2006), pp.1447–1466.
- (10) L. Q. Chen. Phase-field models for microstructure evolution, *Annual Review of Materials Research*, Vol. 32, (2002), pp.113–140.
- (11) P. Fife. *Dynamics of Internal Layers and Diffusive Interfaces*, (1988), SIAM.
- (12) J. Haslinger and R. A. E. Mäkinen. *Introduction to Shape Optimization: Theory, Approximation, and Computation*, (2003), SIAM.
- (13) R.J. LeVeque. *Finite volume methods for hyperbolic problems*, (2002), Cambridge University Press.
- (14) G. B. Macfadden. Phase-field models of solidification, *Contemporary Mathematics*, Vol. 306, (2002), pp.107–145.
- (15) L. Modica. The gradient theory of phase transitions and the minimal interface criterion, *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, Vol. 98, No. 2(1987), pp.123–142.
- (16) S. J. Osher and F. Santosa. Level set methods for optimization problems involving geometry and constraints. i. frequencies of a two-density inhomogeneous drum, *Journal of Computational Physics*, Vol. 171, (2001), pp.272–288.
- (17) S. Osher and J. A. Sethian. Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on hamilton-jacobi formulations, *Journal of Computational Physics*, Vol. 79, (1988), pp.12–49.
- (18) O. Pironneau. *Optimal Shape Design for Elliptic Systems*, (1984), Springer-Verlag.
- (19) J. Rubinstein, P. Sternberg, and J. B. Keller. Fast reaction, slow diffusion, and curve shortening, *SIAM Journal on Applied Mathematics*, Vol. 49, pp.116–133, 1989.
- (20) J. A. Sethian and A. Wiegmann. Structural boundary design via level set and immersed interface methods, *Journal of Computational Physics*, Vol. 163, No. 2(2000), pp.489–528.
- (21) J. Sokołowski and J. P. Zolesio. *Introduction to Shape Optimization: Shape Sensitivity Analysis*, (1992), Springer-Verlag.
- (22) M. Y. Wang, X. Wang, and D. Guo. A level set method for structural topology optimization, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 192, No. 1-2(2003), pp.227–246.
- (23) M. Y. Wang and S. Zhou. Phase field: A variational method for structural topology optimization, *Com-*

- puter Modeling in Engineering and Sciences*, Vol. 6, No. 6(2004), pp.547–566.
- (24) M. Y. Wang and S. Zhou. Synthesis of shape and topology of multi-material structures with a phase-field method, *Journal of Computer-Aided Materials Design*, Vol. 11, No. 2(2004), pp.117–138.
- (25) J. A. Warren, R. Kobayashi, A. E. Lobkovsky, and W. Craig Carter. Extending phase field models of solidification to polycrystalline materials, *Acta Materialia*, Vol. 51, No. 20(2003), pp.6035–6058.
- (26) S. Zhou and M.Y. Wang. Multimaterial structural topology optimization with a generalized cahn–hilliard model of multiphase transition, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, Vol. 33, No. 2(2007), pp.89–111.
- (27) S. Zhou, M.Y. Wang, and C. Source. 3d multi-material structural topology optimization with the generalized cahn–hilliard equations, *Computer Modeling in Engineering and Sciences*, Vol. 16, No. 2(2006), pp.83–102.
-