

分離型マルチスケール解析法による超弾性複合材料の ミクロ構造トポロジー最適化

Topology optimization of microstructures for hyperelastic composites based on a decoupling multi-scale analysis

加藤 準治¹, 谷地 大舜¹, 西澤 峻祐¹, 高瀬 慎介¹, 寺田 賢二郎², 京谷 孝史¹

Junji KATO, Daishun YACHI, Shunsuke NISHIZAWA, Shinsuke TAKASE, Kenjiro TERADA and
Takashi KYOYA

¹ 東北大学大学院工学研究科土木工学専攻 (〒 980-8579 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-06)

² 東北大学災害科学国際研究所 (〒 980-0845 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 468-1)

The present study proposes topology optimization for microstructure of two-phase composite considering hyperelasticity to minimize the end compliance of the macrostructure based on a multi-scale analysis. In general the structural behavior of macrostructure depends on the geometric properties of the microstructure. In other words, optimizing microstructure is an effectual way to improve the macroscopic structural performance applying a multi-scale analysis. However, it needs unrealistic computational costs when structural optimization with nonlinear structural response based on the conventional micro-macro coupling multi-scale analysis is considered. The present study challenges to make it possible to solve the problem by introducing a so-called decoupling multi-scale analysis assuming hyperelasticity.

Key Words: multi-scale topology optimization, adjoint sensitivity analysis, decoupling multi-scale analysis, hyperelasticity, homogenization

1. はじめに

構造の力学的挙動は、材料のミクロ領域における構成材料の配置や形状、寸法などの幾何学的特性に強く依存し、またその依存性は材料の非線形領域においてより顕著になることが知られている。そのため、材料開発の分野ではマクロ的な構造の力学的性能を目的どおりに制御する、あるいは最大限に引き出す、最適な材料微細構造（以降はミクロ構造と称す）を見つけるために多くの時間とエネルギーが費やされている。具体的な方法としては、材料実験の中で構成材料のパラメータを適宜変化させてその力学的性能の変化と傾向を把握したり、新たな材料を混入してその性能の変化を観察する方法が一般的であろう。しかし、繊維補強プラスチックや特殊合金などをはじめとする先端材料を扱う場合、実験に依存し過ぎた材料開発は膨大な時間とコストを要することから、近年ではCAEを活用し

た合理的な材料設計法の開発が望まれている。

このような背景を踏まえ、本研究は材料微細構造の構造幾何を最適化し、それを数値的アプローチによって最適化することでマクロ構造の力学的性能を最大にする手法の確立を目指すものである。ここでは、構造幾何の基本といえる「構成材料の配置」、すなわち「ミクロ構造のトポロジー」に着目した手法の開発を目指す。

ところで、トポロジー最適化の研究については、これまでマクロ構造のトポロジーを対象とした研究開発が主体的であったが、近頃は材料のミクロ構造を対象としたトポロジー最適化の研究が少しずつ増えてきている。ミクロ構造のトポロジー最適化を実施した代表的な研究報告を述べると、例えば、Sigmund⁽¹⁾は逆均質化法と称する方法を用いて、所与のマクロ材料剛性 C^H と等価な剛性を発現するミクロ構造のトポロジー決定手法を提案している。また、Sigmund and Torquato⁽²⁾はその応用として、所与の熱膨張係数と等価になるミクロ構造トポロジーの決定手法を提案し、Larsen et al.⁽³⁾は負のポアソン比を発現できるミクロ構造トポロジーを紹介している。しかし、これらはミクロ構造だけの、つまり、ミクロ領域における境界値問題のみで構成される支配方程式を解き、マクロ構造の挙動については考慮していない。一方、Rodrigues et al.⁽⁴⁾は、マクロ構

* 原稿受付 2015 年 08 月 18 日, 改訂 2015 年 10 月 01 日, 発行 2015 年 11 月 06 日. ©2015 年日本計算工学会.

Manuscript received, August 18, 2015; final revision, October 01, 2015; published, November 06, 2015. Copyright ©2015 by the Japan Society for Computational Engineering and Science.

造とマイクロ構造の両方の挙動を加味し、両者のトポロジーを同時に最適化できる階層的な手法を提案している。しかし、この手法は一つのマクロ構造に異なるマイクロ構造トポロジーが多数存在できるという状態を許容しており、厳密には均質化法で仮定する周期性を逸脱するとともに製作可能性を考慮しても非現実的な問題設定であるといえる。均質化法の周期性の仮定に逸脱しない問題設定としては、Niu et al.⁽⁵⁾の研究報告がある。その研究報告では低次固有振動数の最大化を目的としてマイクロとマクロ構造両方のトポロジーを同時に最適化する手法を提案しており、ここでは「マイクロ構造はマクロ構造全体において一つ（一種類）だけ存在する」とした問題設定を行っている。

本研究では、製作可能な範囲を考慮して、「マクロ構造の幾何（トポロジーや形状）は初期の状態から不変とし、あくまでマクロ構造のパフォーマンスを最大にする唯一のマイクロ構造トポロジー（マクロ構造全体で一種類のみ存在）を決定する」という問題設定を行うことにする。具体的には、マイクロ構造トポロジーはマクロ構造のどの物質点を取り出しても同じものが周期的に配置されているという設定である。この問題設定の実用的な例として、タイヤの設計を取り上げると理解しやすい。タイヤの設計では、（溝を除いて）タイヤの基本形状をほとんど変えようがないため、その力学的性能の改善に向けてはゴムの材料設計・開発が鍵となる。当該問題設定は、言わばゴムの中にひとつの代表マイクロ構造（ユニットセル）が存在し、それが周期的に配置されているものと仮定して、その最適な材料配置を求ようとする問題であるといえよう。

ところで、上記のようなマイクロ-マクロ連成問題を解くためには、均質化法を基本としたマルチスケール解析法の導入が必要となる。均質化法によるマルチスケール解析法については、これまで多くの研究成果が報告され、現在では材料・幾何学的非線形特性を考慮に入れた様々な解析手法が提案されている^{(6)~(9)}

これらは、マイクロおよびマクロ双方の境界値問題の精度を高めるために二変数境界値問題をマイクロ-マクロを相互にやり取りしながら同時に解くもので「マイクロ-マクロ連成型のマルチスケール解析法」と呼ばれており、理論的にも確立された信頼できる手法である。しかし、これらの解析手法は理論的に難解であることに加え、計算量が膨大となることから実設計に応用されることは少ない。そのため、Niu et al.⁽⁵⁾の最適化手法をはじめ、「マイクロ-マクロ連成型のマルチスケール解析法」を基本とする最適化手法は、線形弾性問題であれば適用可能であるが、それを非線形構造問題へ拡張することは、理論を複雑化するだけでなく計算量が著しく増加するため、実用上の課題が大きい。

なお、著者らの知る限りでは、連成型マルチスケール解析法を基本としたマルチスケールトポロジー最適化の研究のうち非線形構造問題を扱ったものはNakshatrala et al.⁽¹⁰⁾の研究報告しか見当たらない。Nakshatrala et al.⁽¹⁰⁾

は、超弾性Neo-Hookeanモデルを用いた場合のマルチスケールトポロジー最適化手法を提案しているが、やはり計算量が膨大となることからmultilevel nested Newton法と称される近似法^{(11) (12)}を取り入れて計算量を減らし、さらに80個のプロセッサを用いた並列計算によって計算を実行可能なものになっている。しかし、今後弾塑性モデルのように経路依存型の構造最適化問題への拡張も視野に入れると、連成型マルチスケール解析法を基本としたトポロジー最適化のこれ以上の発展は困難であると思われる。

このような背景から、Kato et al.⁽¹³⁾、加藤ら⁽¹⁴⁾、谷地ら⁽¹⁵⁾は、「分離型マルチスケール解析法」と呼ばれる計算コストを大幅に削減できる新しい手法を用いたマルチスケールトポロジー最適化手法を提案している。分離型マルチスケール解析法は、Terada et al.⁽¹⁶⁾および寺田ら⁽¹⁷⁾、Watanabeら⁽¹⁸⁾によって紹介されたもので、マイクロ-マクロ二変数境界値問題を分離して解く手法である。この手法は、マクロ構成則を仮定した上で「数値材料実験」と称する均質化解析の結果からマクロ構成則の材料パラメータを同定するため、マクロ解析および局所化解析を少ない計算負荷で効率的に解くことができ、さらに様々な非線形材料モデルおよび幾何学的非線形問題にも同じ枠組みが適用可能である点で汎用性に優れている。

なお、Kato et al.⁽¹³⁾、加藤ら⁽¹⁴⁾、谷地ら⁽¹⁵⁾の研究報告は、分離型マルチスケール解析法を最適化問題に導入する基礎的研究であるため、線形弾性体を前提としたものであった。本研究は分離型マルチスケール解析手法の適用を前提としつつ、新たに超弾性体モデルを適用した場合のマルチスケールトポロジー最適化手法の開発を行うものである。また、当該最適化問題では、所与のマイクロ材料体積量が一定という条件のもと、目的関数はNakshatrala et al.⁽¹⁰⁾と同様にマクロ構造のエンドコンプライアンス最小化とした。なお、本研究では数値解析上有効な最適化アルゴリズムとして、勾配基本法のひとつである最適性規準法⁽¹⁹⁾ (optimality criteria method: 以下、OC法と略す)を適用する。以下では、有限変形理論を踏まえた分離型マルチスケール解析法の概要を述べた後、使用材料モデルおよび当該最適化問題の設定、さらに分離型マルチスケール解析を用いた場合の一連の解法および感度解析について提案する。

最後にいくつかの数値解析例を用いて本手法の性能検証を実施する。

2. 使用材料モデル

本研究では、分離型マルチスケール解析において、マイクロ境界値問題およびマクロ境界値問題で用いる構成則をそれぞれマイクロ構成則およびマクロ構成則と呼ぶ。ここでは、そのマイクロ構成則およびマクロ構成則として採用する超弾性構成則についてそれぞれ提示する。なお、マイクロ構成則には等方性の超弾性体モデルを、マクロ構成則にはマイクロ構造の非均質性に起因す

る異方性を再現するために異方性の超弾性体モデルを用いている。なお、以下では簡単のため、ミクロ変数とマクロ変数を区別せずにそれぞれの構成則の定式化を行うこととする。

2.1 等方性超弾性構成則 等方性超弾性体のポテンシャル関数は、観測者に依存しない客観性を持つことから変形勾配 \mathbf{F} あるいは右 Cauchy-Green テンソル $\mathbf{C} (= \mathbf{F}^T \mathbf{F})$ の関数で表すことができる。

$$\Psi = \Psi(\mathbf{F}) = \Psi(\mathbf{C}) \quad (1)$$

ゴム材料の非圧縮性や微圧縮性を扱いやすくするために、近年では超弾性のポテンシャル関数を体積変形と等容変形の成分に分離することが多い。これに従い、本研究においても、ポテンシャル関数 Ψ を体積変形に起因する W_{vol} と等容変形に起因する W_{iso} との和として次式のように定義する。

$$\Psi = W_{\text{vol}}(J) + W_{\text{iso}}(\bar{\mathbf{C}}) \quad (2)$$

ここで、 $J = \det \mathbf{F}$ はヤコビアン、 $\bar{\mathbf{C}} = \bar{\mathbf{F}}^T \bar{\mathbf{F}}$ は右 Cauchy-Green テンソルの等容変形成分をそれぞれ示している。また、 $\bar{\mathbf{F}}$ は変形勾配 \mathbf{F} の等容変形成分であり、次式で表される。

$$\bar{\mathbf{F}} = J^{-1/3} \mathbf{F} \quad (3)$$

ポテンシャル関数の体積成分 $W_{\text{vol}}(J)$ の具体形はスカラーパラメータ D を用いた次式として与える。

$$W_{\text{vol}}(J) = \frac{1}{D} (J - 1)^2 \quad (4)$$

なお、このモデルでは、極限操作 $D \rightarrow 0$ により非圧縮状態 ($J = 1$) に近づけることができ、有限要素解析においてもこの操作によって非圧縮性を模擬することが多い。

一方、等容成分 $W_{\text{iso}}(\bar{\mathbf{C}})$ には Mooney-Rivlin モデルを採用し、 $\bar{\mathbf{C}}$ の第1, 第2不変量を用いた次式を定義する。

$$\begin{aligned} W_{\text{iso}}(\bar{\mathbf{C}}) &= W_{\text{iso}}(\bar{I}_1, \bar{I}_2) \\ &= C_1 (\bar{I}_1 - 3) + C_2 (\bar{I}_2 - 3) \end{aligned} \quad (5)$$

ここで、 \bar{I}_1, \bar{I}_2 は、次式で示される $\bar{\mathbf{C}}$ の第1, 第2不変量であり、 C_1, C_2 はそれらに関する材料パラメータである。

$$\bar{I}_1 = \text{tr} \bar{\mathbf{C}} \quad (6)$$

$$\bar{I}_2 = \frac{1}{2} (\text{tr}^2 \bar{\mathbf{C}} - \text{tr} \bar{\mathbf{C}}^2) \quad (7)$$

弾性ポテンシャルの定義より、第2 Piola-Kirchhoff 応力 \mathbf{S} (以下、第2PK 応力と呼ぶ) は、ポテンシャル関数を右 Cauchy-Green テンソル \mathbf{C} で微分することで得られる。

$$\mathbf{S} = 2 \frac{\partial W}{\partial \mathbf{C}} = 2 \frac{\partial W_{\text{vol}}}{\partial \mathbf{C}} + 2 \frac{\partial W_{\text{iso}}}{\partial \mathbf{C}} = \mathbf{S}_{\text{vol}} + \mathbf{S}_{\text{iso}} \quad (8)$$

ここで、式(4)より、体積変形に関する応力成分は次式で与えられる。

$$\mathbf{S}_{\text{vol}} = 2 \frac{\partial W_{\text{vol}}(J)}{\partial \mathbf{C}} = J \frac{\partial W_{\text{vol}}}{\partial J} \mathbf{C}^{-1} \quad (9)$$

また、式(5)より、等容変形に関する応力成分は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{\text{iso}} &= 2 \frac{\partial W_{\text{iso}}(\bar{I}_1, \bar{I}_2)}{\partial \mathbf{C}} = \left(2 \frac{\partial W_{\text{iso}}}{\partial \bar{\mathbf{C}}} \right) : \frac{\partial \bar{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{C}} \\ &= (J^{-2/3} \mathbb{Q}) : \left(2 \frac{\partial W_{\text{iso}}}{\partial \bar{\mathbf{C}}} \right) = I_3^{-1/3} \mathbb{Q} : \bar{\mathbf{S}} \end{aligned} \quad (10)$$

ここで、 $I_3 = \det \mathbf{C}$ であり、 \mathbb{Q} と $\bar{\mathbf{S}}$ はそれぞれ次のように与えられる。

$$\mathbb{Q} = \mathbb{I} - \frac{1}{3} \mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C} \quad (11)$$

$$\bar{\mathbf{S}} = 2 \frac{\partial W_{\text{iso}}}{\partial \bar{\mathbf{C}}} = 2 \frac{\partial W_{\text{iso}}}{\partial \bar{I}_1} \frac{\partial \bar{I}_1}{\partial \bar{\mathbf{C}}} + 2 \frac{\partial W_{\text{iso}}}{\partial \bar{I}_2} \frac{\partial \bar{I}_2}{\partial \bar{\mathbf{C}}} \quad (12)$$

ここで、 \mathbb{I} は4階の恒等テンソルであり、2階の恒等テンソル $\mathbf{1}$ を用いて $\mathbb{I} = \mathbf{1} \otimes \mathbf{1}$ と表せる。また、不変量 \bar{I}_1, \bar{I}_2 の $\bar{\mathbf{C}}$ による偏微分は次式で与えられる。

$$\frac{\partial \bar{I}_1}{\partial \bar{\mathbf{C}}} = \mathbf{1} \quad (13)$$

$$\frac{\partial \bar{I}_2}{\partial \bar{\mathbf{C}}} = (\bar{I}_1 \mathbf{1} - \bar{\mathbf{C}}) \quad (14)$$

2.2 異方性超弾性構成則 本研究では、Kaliske⁽²⁰⁾ および Kaliske and Schmidt⁽²¹⁾ により提案された異方性超弾性体構成則をマクロ構成則として採用する。この材料モデルを採用した理由は、当該材料モデルがミクロ材料モデルである Mooney-Rivlin 則を基本に発展させたものであるため親和性があり、後述のマクロ材料パラメータ同定をやりやすくするためである。

Kaliske⁽²⁰⁾ および Kaliske and Schmidt⁽²¹⁾ は、繊維強化複合材料の異方性は繊維の方向を示す単位ベクトル \mathbf{A} , \mathbf{B} によって特徴づけられるものと仮定し、ポテンシャル関数を次のように定義している。

$$\Psi = W_{\text{vol}}(J) + W_{\text{iso}}(\bar{\mathbf{C}}, \mathbf{A}, \mathbf{B}) \quad (15)$$

ここで、 $W_{\text{vol}}(J)$ は前節同様に式(4)として定義されている。 $W_{\text{iso}}(\bar{\mathbf{C}}, \mathbf{A}, \mathbf{B})$ は $\bar{\mathbf{C}}$ の不変量を用いた以下の具体形で与えられる。

$$\begin{aligned} W_{\text{iso}}(\bar{\mathbf{C}}, \mathbf{A}, \mathbf{B}) &= W_{\text{iso}}(\bar{I}_1, \bar{I}_2, \bar{I}_4, \bar{I}_5, \bar{I}_6, \bar{I}_7, \bar{I}_8, \bar{I}_9) \\ &= \sum_{i=1}^3 a_i (\bar{I}_1 - 3)^i + \sum_{j=1}^3 b_j (\bar{I}_2 - 3)^j \\ &\quad + \sum_{k=2}^6 c_k (\bar{I}_4 - 1)^k + \sum_{l=2}^6 d_l (\bar{I}_5 - 1)^l \\ &\quad + \sum_{m=2}^6 e_m (\bar{I}_6 - 1)^m + \sum_{n=2}^6 f_n (\bar{I}_7 - 1)^n \\ &\quad + \sum_{o=2}^6 g_o (\bar{I}_8 - s)^o \end{aligned} \quad (16)$$

ここで \bar{I}_i ($i = 1, 2, 4 \sim 9$) は、式(13), 式(14)と次式で与えられる $\bar{\mathbf{C}}$ の不変量を示し、 $a_i \sim g_o$ は、それらに関する

材料パラメータである。

$$\bar{I}_4 = \mathbf{A} \cdot \bar{\mathbf{C}}\mathbf{A} \quad (17)$$

$$\bar{I}_5 = \mathbf{A} \cdot \bar{\mathbf{C}}^2 \mathbf{A} \quad (18)$$

$$\bar{I}_6 = \mathbf{B} \cdot \bar{\mathbf{C}}\mathbf{B} \quad (19)$$

$$\bar{I}_7 = \mathbf{B} \cdot \bar{\mathbf{C}}^2 \mathbf{B} \quad (20)$$

$$\bar{I}_8 = (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) \mathbf{A} \cdot \bar{\mathbf{C}}\mathbf{B} \quad (21)$$

なお、 $\varsigma = (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})^2$ である。

また、等方性の場合と同様に、エネルギー関数を右 Cauchy-Green テンソルの等容変形テンソル $\bar{\mathbf{C}}$ で偏微分することにより、第 2PK 応力の一般形が式 (9)、式 (10) で得られ、異方性では式 (10) 中の $\bar{\mathbf{S}}$ が次式のように定義できる。

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{S}} &= 2 \frac{\partial W_{\text{iso}}}{\partial \bar{\mathbf{C}}} = 2 \frac{\partial W_{\text{iso}}}{\partial \bar{I}_1} \frac{\partial \bar{I}_1}{\partial \bar{\mathbf{C}}} + 2 \frac{\partial W_{\text{iso}}}{\partial \bar{I}_2} \frac{\partial \bar{I}_2}{\partial \bar{\mathbf{C}}} \\ &+ 2 \frac{\partial W_{\text{iso}}}{\partial \bar{I}_4} \frac{\partial \bar{I}_4}{\partial \bar{\mathbf{C}}} + 2 \frac{\partial W_{\text{iso}}}{\partial \bar{I}_5} \frac{\partial \bar{I}_5}{\partial \bar{\mathbf{C}}} + 2 \frac{\partial W_{\text{iso}}}{\partial \bar{I}_6} \frac{\partial \bar{I}_6}{\partial \bar{\mathbf{C}}} \\ &+ 2 \frac{\partial W_{\text{iso}}}{\partial \bar{I}_7} \frac{\partial \bar{I}_7}{\partial \bar{\mathbf{C}}} + 2 \frac{\partial W_{\text{iso}}}{\partial \bar{I}_8} \frac{\partial \bar{I}_8}{\partial \bar{\mathbf{C}}} \end{aligned} \quad (22)$$

ここで、各不変量 \bar{I}_i ($i = 1, 2, 4 \sim 9$) の $\bar{\mathbf{C}}$ による偏微分は、式 (13)、式 (14) に加え、以下のように表される。

$$\frac{\partial \bar{I}_4}{\partial \bar{\mathbf{C}}} = \mathbf{A} \otimes \mathbf{A} \quad (23)$$

$$\frac{\partial \bar{I}_5}{\partial \bar{\mathbf{C}}} = \mathbf{A} \otimes \bar{\mathbf{C}}\mathbf{A} + \bar{\mathbf{C}}\mathbf{A} \otimes \mathbf{A} \quad (24)$$

$$\frac{\partial \bar{I}_6}{\partial \bar{\mathbf{C}}} = \mathbf{B} \otimes \mathbf{B} \quad (25)$$

$$\frac{\partial \bar{I}_7}{\partial \bar{\mathbf{C}}} = \mathbf{B} \otimes \bar{\mathbf{C}}\mathbf{B} + \bar{\mathbf{C}}\mathbf{B} \otimes \mathbf{B} \quad (26)$$

$$\frac{\partial \bar{I}_8}{\partial \bar{\mathbf{C}}} = (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) \mathbf{A} \otimes \mathbf{B} \quad (27)$$

3. 有限変形理論における分離型マルチスケール解析

3.1 手法の概要 分離型マルチスケール解析手法は、マイクロ-マクロ 2 変数境界値問題を同時に連成して解く一般的な手法と異なり、マイクロおよびマクロ個々の境界値問題に分離して解く手法である。本手法の手順は、初めにマイクロ境界値問題において、均質化法によっ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。そして、ここで得られたマイクロ解析結果を均質化法に基づき、マクロな材料変数に変換することで、マクロ材料応答を計測したものと考える。このようにコンピュータ上で仮想的な材料実験を行い、マクロ材料応答を得る一連の操作は「数値材料試験」と称される。

次に、数値材料試験により得られたマクロ材料応答を計測データとして利用し、マクロ材料構成則の材料

パラメータの同定を最適化アルゴリズムを用いて行う。すなわち、数値材料試験により得られたマクロ材料応答と同等の挙動を示すマクロ構成則の材料パラメータを決定する。ちなみに、ここでいう最適化アルゴリズムは、構造最適化で設計変数を更新するために用いる最適化アルゴリズムとは別であることに注意されたい。

最後に、同定されたマクロ材料パラメータを用いてマクロ境界値問題を個別に解く。また、必要に応じて、マクロ構造内部の任意の物質点におけるひずみ履歴データを再びユニットセルに入力することで、そのポイントにおけるマイクロレベルでの材料応答を観察することも可能である。この操作は一般に局所化解析と呼ばれる。以下では、マイクロ-マクロ 2 変数境界値問題の定式化およびマイクロ境界値問題を解くために導入された外部節点の概念、さらにマクロ材料パラメータの同定方法について説明する。

3.1.1 ミクロ-マクロ 2 変数境界値問題 ここでは、固体の有限変形理論の枠組みで均質化法により導かれるマイクロ-マクロ 2 変数境界値問題を示す。

まず、材料の非均質性を特徴づけるユニットセルについて、その物理領域の初期配置 \mathcal{Y}_0 に対して設定した初期座標 \mathbf{Y} と現配置 \mathcal{Y} における空間位置 $\mathbf{y} = \varphi(\mathbf{Y})$ からマイクロ変形勾配 \mathbf{F}_m が次式で定義される。

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_m &= \nabla_{\mathbf{Y}} \varphi(\mathbf{Y}) = \nabla_{\mathbf{Y}} \mathbf{w} + \mathbf{1} \\ &= \tilde{\mathbf{H}} + \nabla_{\mathbf{Y}} \mathbf{u}^* + \mathbf{1} \end{aligned} \quad (28)$$

ここで、 $\mathbf{1}$ は 2 階の恒等テンソル、 $\tilde{\mathbf{H}}$ は後述する (\mathbf{Y} に独立な) マクロ変位勾配テンソル、 \mathbf{u}^* はミクロスケールの周期的な擾乱変位場であり、ユニットセルの変位場 \mathbf{w} は \mathbf{c} を定数ベクトルとして次式で与えられる。

$$\mathbf{w} = \tilde{\mathbf{H}} \cdot \mathbf{Y} + \mathbf{u}^* + \mathbf{c} \quad (29)$$

このとき、ミクロスケールのユニットセル \mathcal{Y}_0 についての平衡方程式は、

$$\nabla_{\mathbf{Y}} \cdot \mathbf{P}_m = \mathbf{0} \quad (30)$$

で与えられ、マイクロ第 1 Piola-Kirchhoff 応力 \mathbf{P}_m （以下、マイクロ第 1 PK 応力と呼ぶ）は式 (28) の変形勾配 \mathbf{F}_m を介して導入される任意の構成則により決定される。

また、初期配置 \mathcal{Y}_0 のユニットセル境界上では擾乱変位場 \mathbf{u}^* に周期拘束が与えられる。

$$\mathbf{u}^*|_{\partial \mathcal{Y}_0^{[k]}} = \mathbf{u}^*|_{\partial \mathcal{Y}_0^{[-k]}}, \quad \text{for } k = 1, 2, 3 \quad \text{on } \partial \mathcal{Y}_0 \quad (31)$$

ここで、Fig.1 に示すようにユニットセルが立方体でその境界面が座標軸と平行におかれているとすれば $\partial \mathcal{Y}_0^{[k]}$ は正規直交基底ベクトル $\mathbf{e}^{[k]}$ が法線ベクトルとなる境界面である。さらに、この拘束条件は、式 (29) を用いることで変位場 \mathbf{w} に対する拘束条件に変換可能である。

$$\mathbf{w}^{[k]} - \mathbf{w}^{[-k]} = \tilde{\mathbf{H}} \cdot (\mathbf{Y}^{[k]} - \mathbf{Y}^{[-k]}) = \tilde{\mathbf{H}} \cdot \mathbf{L}^{[k]} \quad (32)$$

ここでは簡単のため、 $(\cdot)^{[\pm k]} := (\cdot)|_{\partial \mathcal{Y}_0^{[\pm k]}}$ とおいた。 $\mathbf{L}^{[k]}$ はユニットセルの k 方向の対となる境界線上の物質点を結合するためのベクトルであり、辺ベクトルと呼ばれる。

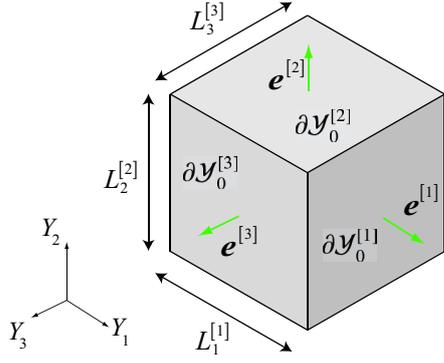


Fig. 1 Definition of unit cell and its basis axes

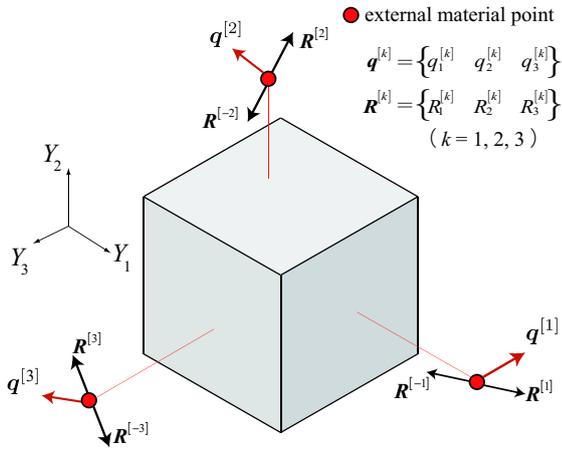


Fig. 2 Concept of external material points having degrees of freedom for relative displacement vector and the corresponding reaction force at an external material point in 3D

また、この周期拘束条件により、単位法線ベクトル N を有する境界面上のマイクロ表面力ベクトル $T_m = P_m \cdot N$ には、初期配置のユニットセル境界 ∂Y_0 における反対称性

$$T_m^{[k]} + T_m^{[-k]} = P_m \cdot e^{[k]} + P_m \cdot e^{[-k]} = \mathbf{0} \quad (33)$$

が課せられる。ここで、簡単のため $T_m^{[\pm k]} := T_m^{(\pm e^{[k]})}$ とおいた。

一方、マクロ領域の初期配置と現配置をそれぞれ $\mathcal{B}_0, \mathcal{B}$ 、物質点の初期座標 $X \in \mathcal{B}_0$ とその現在の位置を $x = \tilde{\varphi}(X) \in \mathcal{B}$ とすれば、マクロ変形勾配を $F_M = \tilde{H} + 1$ と定義できるが、これは次式に示すように対応するマイクロ変形勾配のユニットセル体積平均に等しい。

$$F_M = \frac{1}{|Y|} \int_Y F_m dY = \tilde{H} + 1 \quad (34)$$

ここで、 $|Y|$ は初期配置 \mathcal{Y}_0 におけるユニットセルの体積を示す。また、同様にマクロ第 1PK 応力 P_M も対応するマイクロ応力 P_m のユニットセル体積平均であり、反

対称条件 (33) より、

$$P_M = \frac{1}{|Y|} \int_{\mathcal{Y}_0} P_m dY = \frac{1}{|Y|} \int_{\partial \mathcal{Y}_0} T_m^{(N)} \otimes Y ds \quad (35)$$

で与えられる。したがって、ミクロスケールの基底ベクトル e をマクロスケールにも転用すれば、次式を導くことができる。

$$T_M^{[k]} = P_M \cdot e^{[k]} = \frac{1}{|\partial Y^{[k]}|} \int_{\partial \mathcal{Y}_0^{[k]}} P_m \cdot e^{[k]} ds = \frac{1}{|\partial Y^{[k]}|} \int_{\partial \mathcal{Y}_0^{[k]}} T_m^{[k]} ds \quad (36)$$

ここで、 $|\partial Y^{[k]}|$ は境界 $\partial \mathcal{Y}_0^{[k]}$ の面積を表す。マクロ境界値問題では以上の式に加えて、次式の平衡方程式が与えられる。

$$\nabla_X \cdot P_M + B_M = \mathbf{0} \quad (37)$$

ここで B_M は物体力である。

以上をまとめると、所与のマクロ変形 (例えば \tilde{H}) を入力データとして、擾乱変位場 u^* に周期拘束条件を与えて平衡方程式 (30) を解く問題がマイクロ境界値問題であり、このマイクロ問題の解として得られるマイクロ応力 P_m のユニットセル平均をマクロ応力 P_M とみなしてマクロ構造の平衡方程式 (37) を解くものがマクロ境界値問題である。

最後に解くべきマクロおよびマイクロのつり合い式を以下に記しておく。

$$\int_{\mathcal{B}_0} \delta F_M : P_M d\Omega - \int_{\mathcal{B}_0} \delta U \cdot B_M d\Omega - \int_{\partial \mathcal{B}_0} \delta U \cdot \hat{T}_M d\Gamma = \mathbf{0} \quad (38)$$

$$\int_{\mathcal{Y}_0} \delta F_m : P_m dY = \mathbf{0} \quad (39)$$

ここで、 $\delta(\bullet)$ の表記は仮想場、 $(\hat{\bullet})$ は境界上で定義された所与の値であることを意味する。

3.1.2 ミクロ境界値問題における外部節点の導入
 数値材料試験では、ユニットセルの有限要素モデルに対して理想的な境界条件 (マクロ変位勾配 \tilde{H}) を与え、以上で述べた均質化法の過程に則ってマクロ応力を得ることを目的としている。この理想的な境界条件を与えるために、前節のマイクロ境界値問題の境界条件を制御する「外部節点」を導入する。

まず、ユニットセルに与える変位拘束条件式 (32) を

$$w^{[k]} - w^{[-k]} = q^{[k]} \quad (40)$$

と書くことにする。ここで、 $q^{[k]}$ は

$$q^{[k]} = \tilde{H} \cdot L^{[k]} \quad (41)$$

とおいた。そして、初期配置におけるユニットセルの対面する境界面の組 $\partial \mathcal{Y}_0^{[k]}$ に対応して、Fig.2 に示すような 3 つの外部節点をユニットセル領域の外部に設ける。この外部節点は、対応する境界面 $\partial \mathcal{Y}_0^{[k]}$ に含まれるすべての節点の自由度拘束を関連付ける制御点である。すなわち、外部節点に与える変位は境界面 (に含まれるすべての節点) に与える相対変位となる。この

外部節点に対して自由度拘束 $q^{[k]}$ を与えることで対面するユニットセルの境界面の組に含まれる節点に対して相対変位 $q^{[k]}$ を与えることができる。境界面 $\partial Y_0^{[k]}$ に対して与える i 方向の相対変位を $q_i^{[k]}$ と記述すると、外部節点に対して既知データ $q_i^{[k]}$ を与えた際に、その外部節点にかかる反力ベクトル $R_i^{[k]}$ は境界面 $\partial Y_0^{[k]}$ 上のマイクロ表面力ベクトル $T_{mi}^{[k]}$ の面積分となる。すなわち、外部節点にかかる反力ベクトルは

$$R_i^{[k]} = \int_{\partial Y_0^{[k]}} T_{mi}^{[k]} ds \quad (42)$$

と表される。この反力ベクトル $R_i^{[k]}$ を初期配置のユニットセル境界面の表面積 $|\partial Y^{[k]}|$ で除した量がマクロ第1PK応力 $P_{Mi}^{[k]}$ として算出される。

以上より、数値材料試験では、ユニットセルの有限要素モデルに設けられた $k=1,2,3$ の各外部節点に対して $i=1,2,3$ 方向に一定の条件で自由度拘束を与え、それぞれに対するマクロ応力を得ることができる。

3.2 材料パラメータ同定 ミクロ構造の幾何学的特性をマクロ材料特性に反映させる役割を果たすのがマクロ材料構成則に存在する材料パラメータである。本節では、非均質なミクロ構造の材料特性を均質体であるマクロ構造の材料特性に置き換えるためのパラメータ同定について概説する。ここでは、以下に示す負荷パターンの数値材料試験により得られるマクロ応力-ひずみ関係を計測データとして利用し、マクロ構成則として採用する異方性超弾性構成則の材料パラメータを最適化アルゴリズムによって同定する。

3.2.1 数値材料試験の負荷パターン 本研究では、Fig.3に示す6種類のマクロ変形パターンの数値材料試験を行う。以下に、それぞれの変形に対応する入力データ（マクロ変位勾配 \tilde{H} ）を示す。

- 変形パターン1： y_1 軸引張

$$\tilde{H} = \begin{bmatrix} \hat{H}_{11} & 0 & 0 \\ 0 & * & 0 \\ 0 & 0 & * \end{bmatrix} \quad (43)$$

- 変形パターン2： y_2 軸引張

$$\tilde{H} = \begin{bmatrix} * & 0 & 0 \\ 0 & \hat{H}_{22} & 0 \\ 0 & 0 & * \end{bmatrix} \quad (44)$$

- 変形パターン3： y_3 軸引張

$$\tilde{H} = \begin{bmatrix} * & 0 & 0 \\ 0 & * & 0 \\ 0 & 0 & \hat{H}_{33} \end{bmatrix} \quad (45)$$

- 変形パターン4： y_1, y_2 面せん断

$$\tilde{H} = \begin{bmatrix} 0 & \hat{H}_{12} & 0 \\ \hat{H}_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (46)$$

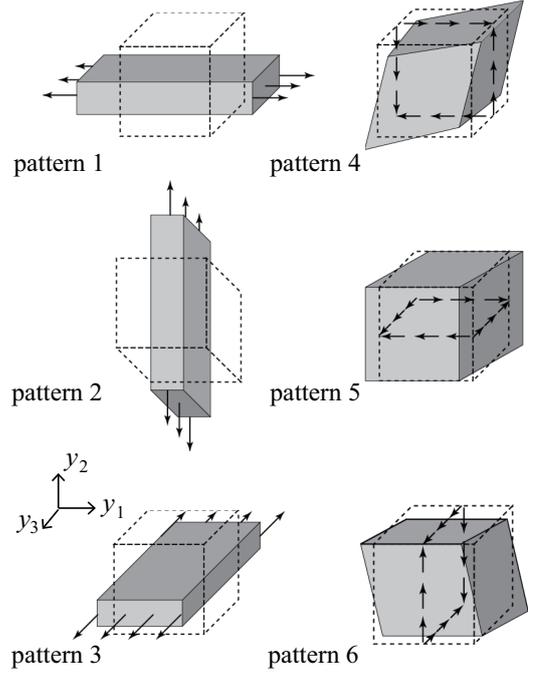


Fig. 3 Original and deformed homogenized bodies of unit cells

- 変形パターン5： y_1, y_3 面せん断

$$\tilde{H} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \hat{H}_{13} \\ 0 & 0 & 0 \\ \hat{H}_{13} & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (47)$$

- 変形パターン6： y_2, y_3 面せん断

$$\tilde{H} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \hat{H}_{23} \\ 0 & \hat{H}_{23} & 0 \end{bmatrix} \quad (48)$$

ここで、 \hat{H}_{ij} は数値材料試験で与えるマクロ変位勾配の制御する成分を示し、* はマクロ変位勾配の制御しない成分であり、解析を行って初めてその値が得られる。また、0 は解析を通して常にゼロに固定することを意味する。

3.2.2 同定方法 本研究では、最適化アルゴリズムの中でも、計算速度や計算精度の面で高い性能を有するとされる差分進化法⁽²²⁾ (Differential Evolution; 以下、DE と略す) を用いて異方性超弾性構成則の材料パラメータを同定した。なお、DE をパラメータ同定に適用するには適切な個体と評価関数を定義する必要がある。個体とは実行可能領域内に複数用意される最適化問題の解候補であり、全設計変数を成分として持つベクトルである。DE では個体が定められた規則に従って更新されていくことで最適解の探索が行われる。一方、評価関数とはそれぞれの個体の最適解としての適合度を示す関数でこの値によって個体間の優劣が決められ、最終的に最も優秀な個体が最適解として得られる。パラメータ同定では、個体を決定したいマクロ材料パラ

メータ数の次元を持つベクトルとして定義する。したがって、異方性超弾性構成則の同定すべきパラメータは、式(4)における D と式(16)における係数 $a_i \sim g_o$ および繊維方向を示す単位ベクトル A, B の各成分の計36個であることから、個体は最大36次元のベクトルとなる。また、本同定では数値材料試験から得られる応力ひずみデータと、マクロ構成則により得られる同定曲線を一致させる(カーブフィッティング)ようなマクロ材料パラメータを求めることを目標とし、その同定精度を評価する評価関数 ϕ を次式のように定義した。

$$\phi = \sum_{l=1}^6 \phi^{[l]} \quad (49)$$

$$\phi^{[l]} = \frac{1}{n_{\text{step}}} \sqrt{\sum_{i=1}^{n_{\text{step}}} (iS_{IJ}^{[l]} - i\hat{S}_{IJ}^{[l]})^2} \quad (50)$$

ここで、 $i\hat{S}_{IJ}^{[l]}$ は変形パターン l の数値材料試験の荷重ステップ i において計測されるマクロ第2PK応力の IJ 成分を示しており、 $iS_{IJ}^{[l]}$ はその数値材料試験と同じひずみ量をマクロ構成則に与えることにより得られるマクロ第2PK応力である。また、 n_{step} は全荷重ステップ数である。DEでは、この評価関数を最小化するように最適解の探索が行われ、これにより、数値材料試験と同等の応答結果を模擬できるマクロ材料パラメータが最適解として得られる。

4. 提案するマイクロ構造トポロジー最適化

本節では、超弾性体の2種複合材からなる非均質なマイクロ構造とそれを内部構造に持つマクロ構造を対象としたトポロジー最適化手法を提案する。ここでは、前述のとおり、マクロ構造のトポロジーは不変でマイクロ構造のトポロジーを設計対象とする。

4.1 ミクロ設計変数とマイクロポテンシャル関数の正則化 トポロジー最適化は連続体内の材料配置を最適化する手法であり、その基本概念は、設計空間において任意の点 x が材料の存在する領域(Ω_s)に位置するか否かでその位相を決定することにある。特性関数 $\chi(x)$ を用いてそれを表すと以下のように書ける。

$$\chi(x) = \begin{cases} 0 & \rightarrow \text{no material} & : \forall x \in \Omega_s \setminus \Omega_m \\ 1 & \rightarrow \text{material} & : \forall x \in \Omega_m \end{cases} \quad (51)$$

しかし、これは‘0-1’整数値問題と呼ばれる解の一意性と安定性に欠く不良設定問題となり、そのままでは最適解を得ることはできない。そこで、不連続な‘0-1’間を連続関数で内挿し、勾配基本法による最適化が適用可能な良設定問題に置き換える方法が取られる。この操作を正則化と言い、中でも単純かつ計算量の小さいSIMP法⁽²³⁾などが提案されてきた。

本研究では、Nakshatralaら⁽¹⁰⁾と同様にSIMP法の概念を取り入れてマイクロ構造における設計変数を定義し、また、材料応答を担うポテンシャル関数をそれにより

正則化した。なお、本来SIMP法では単一の多孔質材料を扱うのに対し、本手法では2種類の異なる材料から構成される複合材料を対象とするため、これをそのまま適用することはできない。そこで、SIMP法の概念を複合材料へ拡張した2相材料最適化⁽²⁴⁾を採用した。2相材料最適化は、SIMP法におけるvoidとsolidをそれぞれphase-1とphase-2の固体材料で置き換えた方法である。この手法により、ミクロ構造が異なる2種類の材料phase-1とphase-2から構成されるとしたとき、ミクロ設計変数 s_i はユニットセル内の各有限要素 i におけるphase-2の材料体積比として定義される。すなわち、 s_i は0-1間の値を持ち、 $s_i = 0$ であればphase-1が要素 i を占め、 $s_i = 1$ であればphase-2がその要素を占めることを意味する。また、 $0 < s_i < 1$ の場合は、2つの材料が混ざり合った状態と考える。

上記の設計変数を用いて、マイクロポテンシャル関数を次式のように内挿近似する。

$$\Psi_m = (1 - s_i^\eta) \Psi_1 + s_i^\eta \Psi_2 \quad (52)$$

ここで、 Ψ_1, Ψ_2 はphase-1, phase-2のポテンシャル関数をそれぞれ示し、これらは等方性超弾性の式(2)で定義される。 η は内挿関数のべき乗数である。

また、ミクロ第1PK応力 \mathbf{P}_m は、マイクロポテンシャル関数 Ψ_m をミクロ変形勾配 \mathbf{F}_m で偏微分することで得られる。

$$\mathbf{P}_m = \frac{\partial \Psi_m}{\partial \mathbf{F}_m} = (1 - s_i^\eta) \frac{\partial \Psi_1}{\partial \mathbf{F}_m} + s_i^\eta \frac{\partial \Psi_2}{\partial \mathbf{F}_m} = (1 - s_i^\eta) \mathbf{P}_1 + s_i^\eta \mathbf{P}_2 \quad (53)$$

ここで、 $\mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2$ は、それぞれphase-1とphase-2のミクロ第1PK応力を意味しており、ミクロ変形勾配 \mathbf{F}_m が決まっていれば一意に求まるものである。

4.2 最適化問題の定式化

最適化問題は、一般に設計変数に依存する目的関数、等式・不等式制約条件で定義される。本研究では、材料体積量一定の制約の下、マクロ構造のエンドコンプライアンスを最小化する(最終荷重ステップ時における剛性の最大化)という等式制約条件付きの最適化問題を設定した。なお、エンドコンプライアンスとは、最終つり合い点における変位ベクトルと外力ベクトルの内積を意味する。そこで目的関数を制御する変数は、マクロの変位場 \mathbf{U} およびミクロ設計変数 \mathbf{s} であるから、目的関数は $f(\mathbf{U}, \mathbf{s})$ のように記述できる。

制約条件についてはユニットセル内にあるphase-2の体積はユニットセル全体で最適化計算中でも変化しないという等式制約条件 $h(\mathbf{s}) = 0$ を与えた。

以上より、本手法で扱う最適化問題を次のように定義する。

•最適化問題

$$\min f(\mathbf{U}, \mathbf{s}) = \int_{\partial B_0} \hat{\mathbf{T}}_M \cdot \mathbf{U} d\Gamma \quad (54)$$

$$\text{subject to: } h(\mathbf{s}) = \int_{y_0} s_i dY - \hat{V}_m = 0 \quad (55)$$

$$0 \leq s_i \leq 1 \quad I = 1, \dots, n_s \quad (56)$$

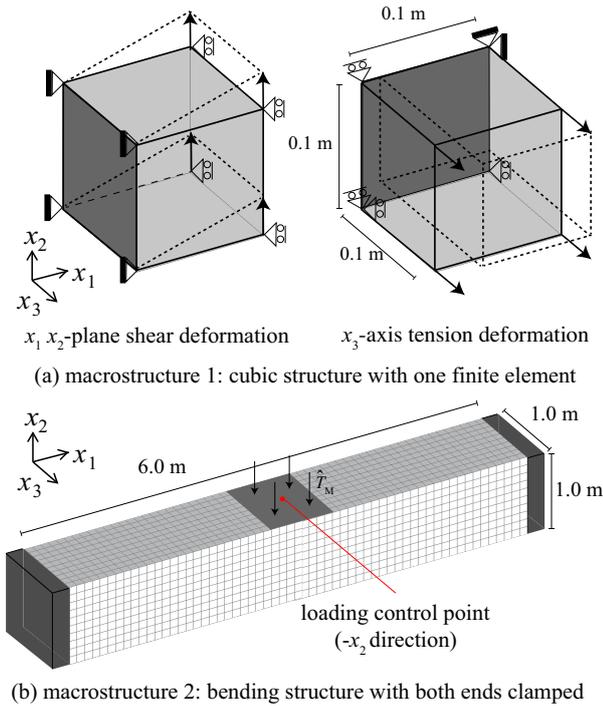


Fig. 4 Structural situation of macrostructures

Table 1 ミクロ材料定数

	C_1	C_2	D
phase-1	1.923×10^2	0	1.6×10^{-3}
phase-2	1.923×10^3	0	1.6×10^{-4}

ここで、 \hat{T}_M はマクロ境界で定義される所与のマクロ表面力ベクトルである。また、 \hat{V}_m はユニットセル内における所与の phase-2 材料の総体積であり、 n_s はユニットセルを構成する有限要素数を示す。

ちなみに、ここでは等式制約条件ではなく不等式制約条件（例えば $g(s) = \int s_i dY - \hat{V}_m \leq 0$ ）を課してもよい。ただし、当該最適化問題は設計変数値の増加（あるいは材料剛性の増加）に伴って目的関数が単調増加する問題であるため、最適解 s^* が求まった際には材料総体積量はその最大値 \hat{V}_m と等しくなる、つまり、 $g(s^*) = 0$ を満たすこととなり、予め等式制約条件を課した場合とほとんど変わらない結果となる。そのため、当該問題では最適解への収束速度の早さと扱いやすさを考慮して等式制約条件を課している。

4.3 感度解析 本研究では、勾配基本法 (gradient-based method) に分類される OC 法によって最適解の探索を行う。したがって、マクロ構造解析実施後に目的関数と等式制約条件の設計変数 s に関する勾配（感度）をそれぞれ求める必要がある。

4.3.1 目的関数の感度

本研究では、マクロのつり合い式 (38) を用いて目的関数の感度を導出する。ここでは、感度の導出を効率

Number of element: 1000
Number of node: 1331

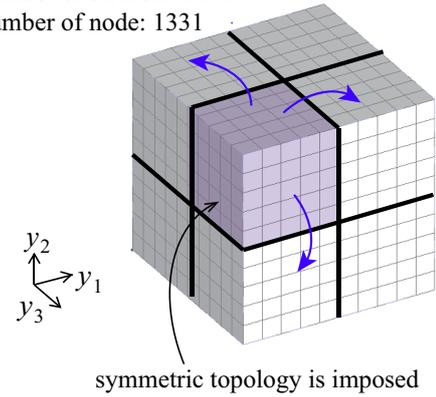


Fig. 5 Unit cell and a way imposing symmetric topology

よく行うために離散的随伴法を用いることとする。離散的随伴法とは、目的関数とつり合い条件式（ここでは仮想仕事式）を離散化した上で随伴ベクトルと呼ばれる任意のベクトルを導入し、数学的な操作によって導出が困難とされる陰的な感度項を取り除き、陽的な感度項のみで目的関数の感度を導く方法である。これにより、感度の計算に要する計算コストを大幅に低減できるようになる。いま、随伴ベクトルを λ として次式のように目的関数を書き換えるが、括弧の中が零であることからこの書き換えによって数学的な問題は生じない。

$$f' = f - \lambda^T \mathbf{R}_M \quad (57)$$

$$= \mathbf{F}_{\text{ext}}^T \mathbf{U} - \lambda^T \left(\mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{U}) - \mathbf{F}_{\text{ext}} \right)_{\mathbf{R}_M=0} \quad (58)$$

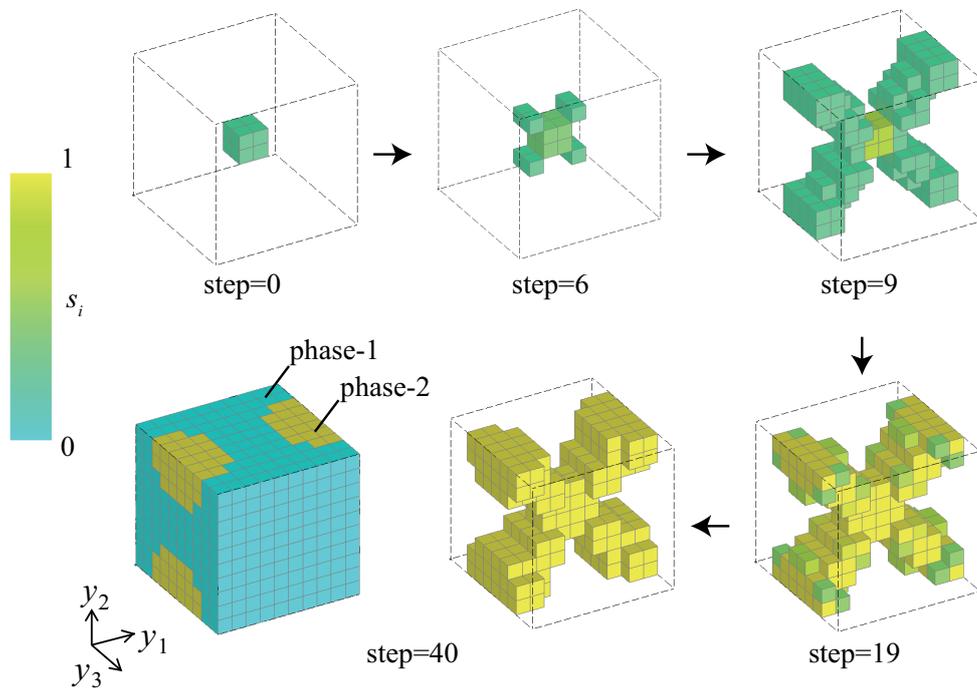
ここで、 $\mathbf{R}_M(\mathbf{U}, s)$ は残差ベクトルである。また、 \mathbf{F}_{int} と \mathbf{F}_{ext} は、マクロ構造解析の最終荷重ステップ時のつり合い点における内力ベクトルと外力ベクトルを意味し、以下のように書くことができる。

$$\mathbf{F}_{\text{int}} = \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{B}_0^T \bar{\mathbf{P}}_M d\Omega, \quad \mathbf{F}_{\text{ext}} = \int_{\partial \mathcal{B}_0} \mathbf{N}^T \hat{\mathbf{T}}_M d\Gamma \quad (59)$$

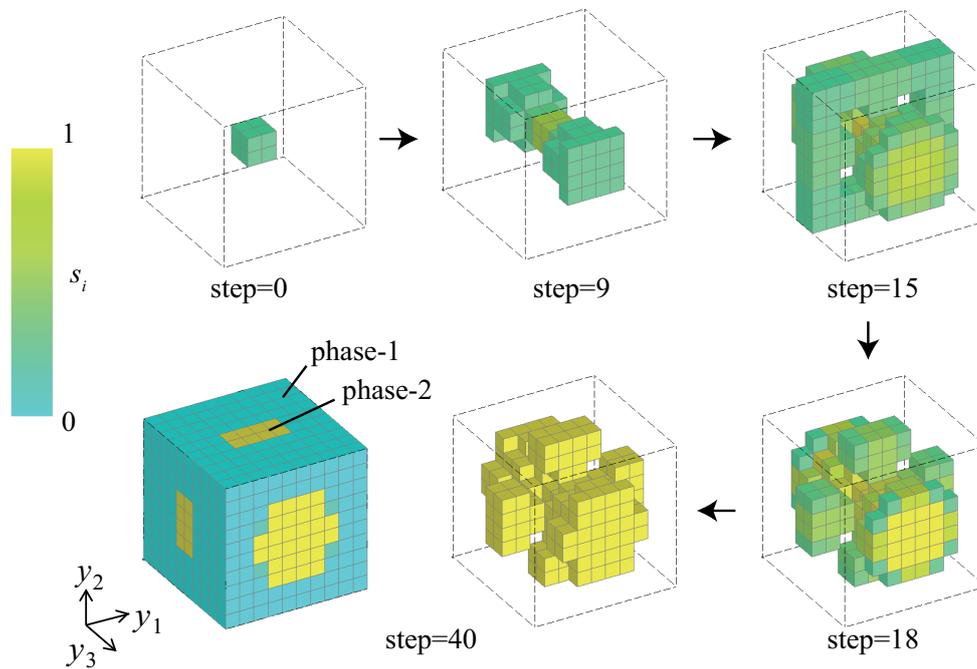
ここで、 \mathbf{N} は形状関数、 \mathbf{B}_0 は初期配置を参照する B マトリックスである⁽²⁵⁾。なお、簡単のため、外力ベクトル \mathbf{F}_{ext} には物体力による影響はないものとし、またマクロ変形および設計変数 s_i に依存しないと仮定した上で、目的関数の設計変数に対する感度を随伴法によって導出する。これをミクロ設計変数 s_i で微分すると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial s_i} = \frac{\partial f'}{\partial s_i} &= \mathbf{F}_{\text{ext}}^T \frac{d\mathbf{U}}{ds_i} - \lambda^T \left(\frac{\partial \mathbf{R}_M}{\partial \mathbf{U}} \frac{d\mathbf{U}}{ds_i} + \frac{\partial \mathbf{R}_M}{\partial s_i} \right) \\ &= \left(\mathbf{F}_{\text{ext}}^T - \lambda^T \frac{\partial \mathbf{R}_M}{\partial \mathbf{U}} \right) \frac{d\mathbf{U}}{ds_i} - \lambda^T \frac{\partial \mathbf{R}_M}{\partial s_i} \quad (60) \end{aligned}$$

となる。ここで、随伴ベクトル λ は任意のベクトルで



(a) optimization history of topology for the case of x_1x_2 -plane shear deformation



(b) optimization history of topology for the case of x_3 -directional tension deformation

Fig. 6 Optimization history of topology of microstructure for macrostructure 1, (a) case of x_3 -directional tension deformation, (b) case of x_1x_2 -plane shear

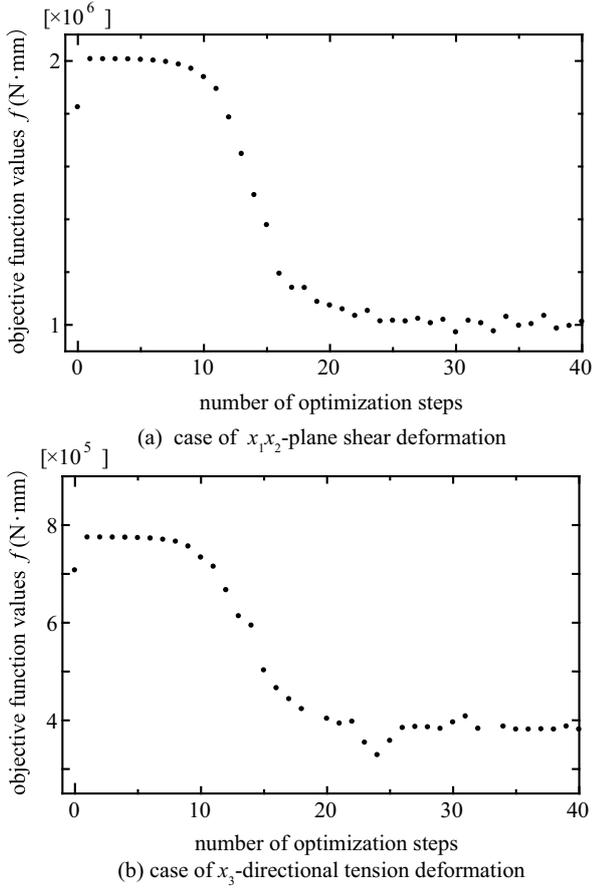


Fig. 7 Optimization history of objective values for macrostructure 1, (a) case of x_1x_2 -plane shear, (b) case of x_3 -directional tension deformation

あるので,

$$\left(\mathbf{F}_{\text{ext}}^T - \lambda^{*T} \frac{\partial \mathbf{R}_M}{\partial \mathbf{U}} \right) \frac{d\mathbf{U}}{ds_i} = 0 \quad (61)$$

を満たすように λ^* を定める. すなわち, 線形化したつり合い方程式と同様の形式である次式を解くことで随伴ベクトル λ^* が得られる.

$$\mathbf{K}_T^T \lambda^* = \mathbf{F}_{\text{ext}} \quad (62)$$

ここで, \mathbf{K}_T は最終荷重ステップ時のつり合い点における接線剛性行列を示す.

よって目的関数の感度は次式のようになる.

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial s_i} &= -\lambda^{*T} \frac{\partial \mathbf{R}_M}{\partial s_i} = -\lambda^{*T} \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{B}_0^T \frac{\partial \bar{\mathbf{P}}_M}{\partial s_i} d\Omega \\ &= -\lambda^{*T} \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{B}_0^T \left(\rho_l^\eta \frac{\partial \mathbf{P}_M}{\partial s_i} \right) d\Omega \end{aligned} \quad (63)$$

ここで問題となるのが, $\partial \mathbf{P}_M / \partial s_i$ の算出方法である. つまり, \mathbf{P}_M はマクロ領域で, s_i はミクロ領域でそれぞれ定義された変数であることから, それらの間に直接的な関係性がなく $\partial \mathbf{P}_M / \partial s_i$ を陽に求めることはできな

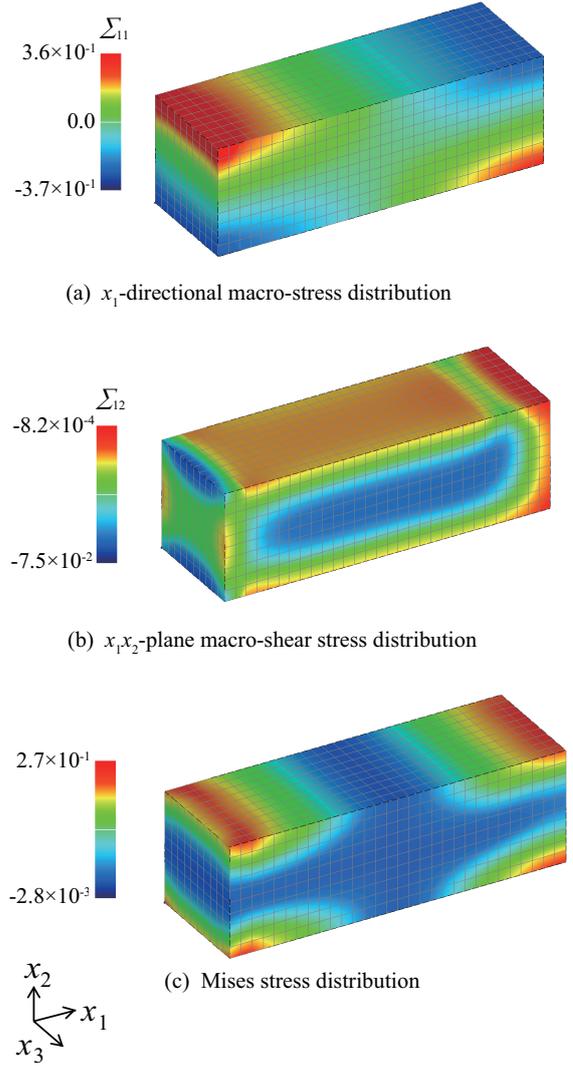


Fig. 8 Macro-stress distribution of macrostructure 2 (only the left half of the structure is displayed)

い. そこで, 本研究ではまず, 式 (35) と式 (53) の関係を念頭に, 感度 $\partial \mathbf{P}_M / \partial s_i$ を均質化法によって以下のように定式化した.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{P}_M}{\partial s_i} &= \frac{1}{|Y|} \int_{y_0} \frac{\partial \mathbf{P}_m}{\partial s_i} dY \\ &= \frac{1}{|Y|} \int_{y_0} \eta s_i^{\eta-1} \left(\frac{\partial \Psi_2}{\partial \mathbf{F}_m} - \frac{\partial \Psi_1}{\partial \mathbf{F}_m} \right) dY \\ &= \frac{1}{|Y|} \int_{y_0} \eta s_i^{\eta-1} (\mathbf{P}_2 - \mathbf{P}_1) dY \end{aligned} \quad (64)$$

よって, 上式の第3行にあるミクロ第1PK応力 \mathbf{P}_1 , \mathbf{P}_2 さえ求めれば, $\partial \mathbf{P}_M / \partial s_i$ が得られることになる. しかし, このミクロ第1PK応力 \mathbf{P}_1 と \mathbf{P}_2 は式 (53) の均質化解析で用いた \mathbf{P}_1 , \mathbf{P}_2 とは別のもので, この感度の導出のために新たに計算される状態変数であることに注意が必要である. 本研究では所与のマクロひずみを与えてユニットセル内のミクロひずみと応力とを計算する, “局所化解析” によってこのミクロ第1PK応力 \mathbf{P}_1 と \mathbf{P}_2 を求めることとした.

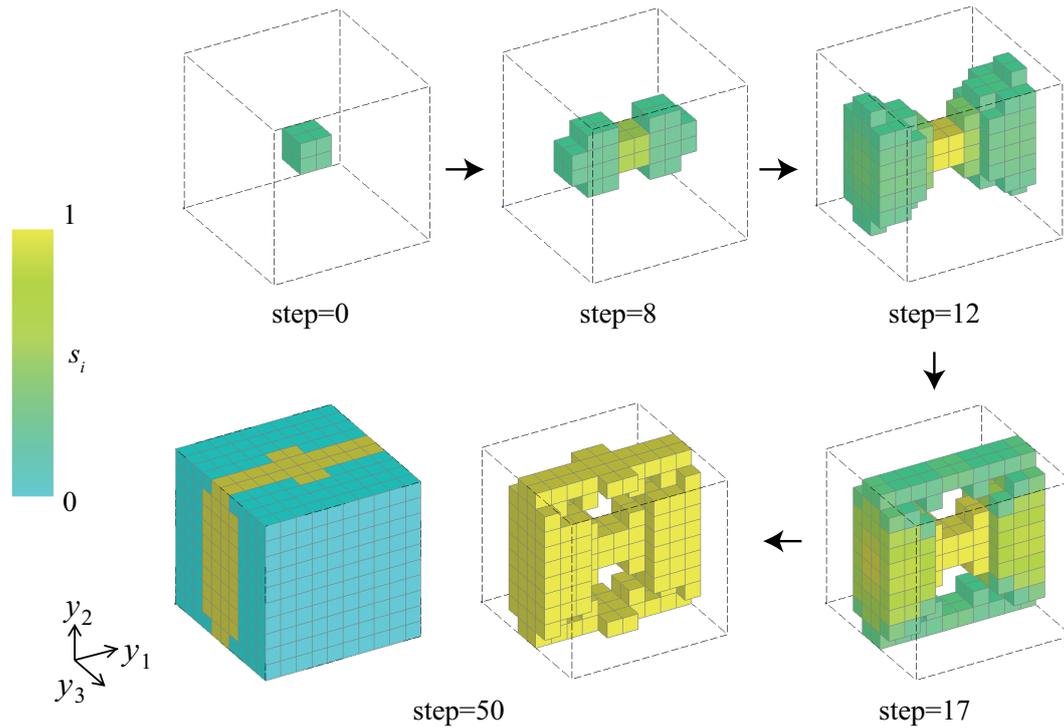


Fig. 9 Optimization history of topology of microstructure for macrostructure 2

以上をまとめると、この局所化解析を利用した感度解析は、マクロ構造解析の最終荷重ステップ時におけるつり合い点において、(i)マクロ要素の応力積分点におけるマクロ変形勾配 \mathbf{F}_M を所与の変形、すなわち境界条件としてユニットセルに負荷してミクロ境界値問題（局所化解析）を解き、(ii)各ミクロ要素の応力積分点におけるミクロ第1PK応力 $\mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2$ をそれぞれ求め、(iii)それらを式(64)に代入して、 $\partial \mathbf{P}_M / \partial s_i$ を求めるという手順となる。

よって、最終の感度である式(63)を求めるためには、この局所化解析を応用した感度解析をマクロ構造の全積分点で行う必要があるため、マクロの応力積分点の数が増加するにつれてその計算コストは大きくなる。しかし、一般のミクロ-マクロ連成型のマルチスケール解析を適用する場合に比べて大幅に計算コストを抑えることができる点を強調しておく。

4.3.2 等式制約関数の感度 本研究における等式制約条件式(55)は、変位 \mathbf{U} に依存しないため、その感度は以下のように陽的に求められる。

$$\frac{\partial h}{\partial s_i} = \int_{y_0} s_i dY = dY_i \quad (65)$$

ここで、 dY_i は初期配置における i 番目のミクロ要素の体積である。等式制約条件の感度は以上のとおり、常に一定値となる。

5. 最適化計算例

5.1 計算条件 本節では、具体的最適化計算を実施して本論文で提案するミクロ構造トポロジー最適化

手法の妥当性を検証する。計算に使用するマクロ構造は、Fig.4に示す2つのモデルを用意した。マクロ構造1では、簡単な例として1要素で構成されるマクロ構造を想定し、これに x_1x_2 面せん断変形と x_3 軸引張変形という2種類の単純な変形モードを課す载荷について検討する。ちなみに敢えて1要素という単純なマクロ構造を用いた理由は、複雑なマクロ構造を用いた場合、得られた結果の検証が困難となることからまずは単純な構造モデルを用いて詳しく考察することを重視したためである。マクロ構造2は、その応用例として要素数を増やし具体的な構造を想定したモデルである。

一方、使用するユニットセルは全ての計算例において、Fig.5に示す8節点六面体要素を用いた立方体形状とし、これが2つの材料 (phase-1, phase2) で構成されると仮定している。本計算例では、Fig.5に示すように構造解析についてはユニットセル全体を用いているが最適化のための設計領域はユニットセルの1/8領域とし、これを他の領域に対称的に割り当てることでユニットセル全領域のトポロジーを得るようにした。もちろん、このようなトポロジーの対称性を課さない条件下で最適設計を実施してもよいが、そもそもミクロ構造のトポロジー最適化は一意に解が求まらない問題であるため、最終的に得られるトポロジーの力学的な解釈が困難となることが多い。このような背景から、事前にミクロ構造の対称性を課した上で最適化計算を行うことが多い。この点については、未だ議論の余地があり今後の課題としたい。また、メッシュ依存性の影響を軽減させるために文献⁽²⁶⁾に示される方法でフィルタリン

グを行っている。

ミクロ材料モデルは、Mooney-Rivlin 則による等方性超弾性構成則で Table1 に示した材料定数を用いて、phase-2 が phase-1 より硬い材料となるよう設定した。べき乗数はいずれの場合も $\eta = 3$ とした。また、phase-2 の材料体積比はいずれも 25% とし、設計変数の初期値は上記の材料体積比を一様に与え、中心部の要素のみ周囲よりも 0.01 大きな値を与えた。ちなみに、全ての要素に同じ初期値を与えた条件下で一様変形を課すと、どの要素でも同じ応力およびひずみ分布となるため、感度 (f/s_i) の値も全ての要素において同じとなる。これは数値的に特異な状態を意味しており、それ以降最適化を実行できなくなるため、それを回避するために行う数値的な処置である。

なお、いずれの計算例においても結果を理解しやすいようにマクロの座標軸 x_1, x_2, x_3 とミクロの座標軸 y_1, y_2, y_3 の方向がそれぞれ一致するように設定した。また、後に示すマクロ応力分布図では次式に従い、マクロ第 1PK 応力 \mathbf{P}_M (あるいは $\bar{\mathbf{P}}_M$) から算出したマクロ Cauchy 応力 $\boldsymbol{\Sigma}$ を表示している。

$$\boldsymbol{\Sigma} = \frac{1}{J_M} \mathbf{P}_M \mathbf{F}_M^T \quad (66)$$

ここで、 $J_M = \det \mathbf{F}_M$ はマクロ変形勾配のヤコビアンを表す。

5.2 1要素立方体構造 (マクロ構造 1) による検証

ここでは、一辺が 100mm の 8 節点 6 面体 1 要素で構成されるマクロ構造 1 に、せん断変形と引張変形を与えたときの最適化結果をそれぞれ示し、本手法の妥当性を検証した。まず、それぞれのマクロ変形に対して最適化されていくミクロ構造のトポロジーの様子を Fig.6 に示す。この図では、ユニットセル内部の形状がみえるように、設計変数が 0.26 以上の領域を表示しており、黄色の領域を phase-2 の材料としている。

まず、Fig.6(a) では、少し大きな初期値を与えた中心部を起点としてマクロせん断変形に抵抗する斜め方向のトポロジーが形成されていく様子がわかる。

一方、Fig.6(b) では、中心部を起点とし、マクロ引張変形の y_3 軸方向にミクロトポロジーが形成されている様子がわかる。また、それに引き続き y_1, y_2 軸方向の収縮に抵抗するような材料配置が step=15 で見られ、最終的には y_3 軸方向の引張り変形に抵抗しながら、横方向の収縮に抵抗するようなトポロジーが得られた。

また、Fig.7 は各最適化ステップにおける目的関数値の履歴を示している。ここで、目的関数値は Fig.7 に示すとおり、どちらのケースにおいても小さくなっており、本手法によって妥当なミクロ構造トポロジーが得られていることが確認できる。ただし、目的関数値はどちらも安定的に一定の最適値へ収束している訳ではなく、やや不安定な状態を保ちながら収束している様子が伺える。これは、本手法が解析的な感度式を導出しているものの、DE によるマクロ材料パラメータの

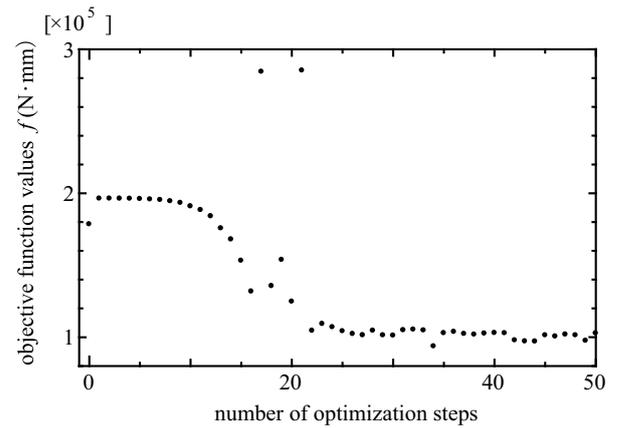


Fig. 10 Optimization history of objective values for macrostructure 2

同定精度が時折低下することによる影響である。しかし、これは DE という進化論的アルゴリズムを用いてパラメータ同定をしている限りに起こりえる、予想どおりの現象であるといえる。

5.3 両端固定梁構造 (マクロ構造 2) を用いた計算例

ここでは、前節の応用として、Fig.4 のマクロ構造 2 に示す両端固定梁構造に対する最適化計算例を紹介する。なお、マクロ構造解析では設計領域の対称性から左半分の 1/2 モデルを使用した。

まず、Fig.8 に最終荷重ステップにおけるマクロ構造の応力分布を示す。また、Fig.9 に各最適化ステップで得られるミクロトポロジーを、Fig.10 に最適化による目的関数値の履歴を示す。Fig.8 から、ここで対象とするマクロ構造では x_1 軸応力 Σ_{11} が卓越し、また、 $x_1 x_2$ 面せん断応力 Σ_{12} が広範囲に渡って分布している様子がわかる。よって、Fig.9 をみると、まずは y_1 方向を補強するように phase-2 材料が形成され、続けて $y_1 y_2$ せん断の補強が行われるような合理的な構造が得られていることが確認できる。さらに、目的関数値も小さくなり、変位量も大幅に減少することから本最適化手法により有効なミクロ構造トポロジーが得られたことがわかる。なお、最適化ステップ 17, 21 回目における目的関数値が不自然に大きい値となっているのは、不適切なマクロ材料パラメータを同定してしまったためであると考えられる。これについては、前述のとおりマクロ材料パラメータの同定精度が低下した場合に生じる現象である。本研究では、目的関数値の収束具合から明らかに不適切なパラメータが同定されたと判断された場合はひとつ前の最適化ステップに戻り、再度 DE によってパラメータ同定をやり直してから次の最適化ステップに進むというやり方で計算を進めた。

以上より、本研究で提案したミクロ構造トポロジー最適化は、DE によるパラメータ同定の精度に依存するものの、概ね最適解に近づけることが可能な実用的な手法であることが確認できた。

6. 結論

従来のマルチスケルトポロジ最適化では、マイクロ-マクロ連成型のマルチスケール解析法を前提としているため、計算コストが膨大になる。その結果、ほとんどの場合は線形弾性体を仮定した問題のみを扱ってきた。このような背景から、本研究では計算コストを低く抑えることが可能な分離型マルチスケール解析法の適用を前提として、非線形構造問題を対象とする新しいマルチスケルトポロジ最適化手法を開発した。以下に本研究で得られた知見と今後の課題を記す。

- 最適化計算例で示された結果から、力学的に合理的なマイクロ構造トポロジが得られており、本手法の妥当性と性能の高さが確認された。
- 本研究では、超弾性体を仮定した場合のトポロジ最適化を扱ったが本手法のしくみから言えば弾塑性材料など他の非線形材料モデルにおいても同様の枠組みで適用可能であるため汎用性が高い手法と考えられる。ただし、その場合には数値材料試験から得られる応答を精度よく近似できる（異方性の）マクロ材料構成則が存在するということが前提となる。これは、ここで提案した最適化手法の問題ではなく分離型マルチスケール解析法固有の問題である。
- 本文では述べていないが、実際の最適化計算において要素の変形量が大きくなりすぎると、要素のヤコビ行列式が破綻して計算が止まってしまうという問題が生じる。これは、有限変形を考慮したトポロジ最適化共通の課題であり、いくつかの対処法^(27,28)が提案されている。したがって、本手法にもこのような仕組みを導入し、変形量の大きなモデルに対しても安定的に計算できるように改善することが期待される。

参考文献

- (1) Sigmund, O., Materials with prescribed constitutive parameters: An inverse homogenization problem, *Int. J. Solid. Struct.*, Vol.31, No.13, 1994, pp.2313–2329.
- (2) Sigmund, O., Torquato, S., Design of materials with extreme thermal expansion using a three-phase topology optimization method, *J. Mech. Phys. Solids*, Vol.45, No.6, 1997, pp.1037–1067.
- (3) Larsen, U.D., Sigmund, O., Bouwstra, S., Design and fabrication of compliant micromechanisms and structures with negative Poisson's ratio, *J. MEMS*, Vol.6, No.2, 1997, pp.99–106.
- (4) Rodrigues, H., Guedes, J.M. Bendsoe, M.P., Hierarchical optimization of material and structure, *Struct. Multidisc. Optim.*, Vol.24, 2002, pp.1–10.
- (5) Niu, B., Yan, J. and Chen, G., Optimum structure with homogeneous optimum cellular material for maximum fundamental frequency, *Struct. Multidisc. Optim.*, Vol. 39, No. 2, 2009, pp. 115–132.
- (6) Smit, R.J.M., Brekelmans, W.A.M., Meijer, H.E.H., Prediction of the mechanical behavior of nonlinear heterogeneous systems by multi-level finite element modeling, *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, Vol.155, 1998, pp.181–192.
- (7) Zheng, S.F., Ding, K., Denda, M., Weng, G.J., A dual homogenization and finite-element study on the in-plane local and global behavior of a nonlinear coated fiber composite, *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, Vol.183, 2000, pp.141–155.
- (8) Feyel, F., Chaboche, J.-L., FE² multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fibre SiC/Ti composite materials, *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.* Vol.183, 2000, pp.309–330.
- (9) Terada, K., Kikuchi, N., A class of general algorithms for multi-scale analyses of heterogeneous media, *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, Vol.190, 2001, pp.5427–5464.
- (10) Nakshatrala, P.B., Tortorelli, D.A., Nakshatrala, K.B., Nonlinear structural design using multi scale topology optimization, Part I: Static formulation, *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, Vol.261–262, 2013, pp.167–176.
- (11) Baaijens, F.P.T., Kouznetsova, V., Brekelmans, W.A.M., An approach to micromacro modeling of heterogeneous materials, *Comput. Mech.*, Vol.27, 2001, pp.37–48.
- (12) Simo, J.C., Taylor, R.L., Consistent tangent operators for rate-independent elastoplasticity, *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, Vol. 48, No. 1, 1985, pp. 101–118.
- (13) Kato, J., Terada, K. and Kyoya, T., Topology optimization of micro-structure for composites applying a decoupling multi-scale analysis, *Struct. Multidisc. Optim.*, Vol. 49, 2014, pp. 595–608.
- (14) 加藤 準治, 寺田 賢二郎, 京谷 孝史, 複合材料のマクロ構造挙動を考慮したマイクロ構造トポロジ最適化, 土木学会論文集 A2(応用力学), Vol. 68, No. 2, 2012, pp. 279–287.
- (15) 谷地大舜, 加藤 準治, 高瀬 慎介, 寺田 賢二郎, 京谷 孝史, マルチスケルトポロジ最適化手法と解析の感度導出法の提案, 日本計算工学会論文集 (Transactions of JSCES), 2013, Paper No.20130022.
- (16) Terada, K., Kato, J., Hirayama, N., Inugai, T. and Yamamoto, K., A method of two-scale analysis with micro-macro decoupling scheme: application to hyperelastic composite materials, *Comput. Mech.*, Vol. 52, 2013, 1199–1219.
- (17) 寺田 賢二郎, 犬飼 壮典, 濱名 康彰, 見寄 明男, 平山 紀夫, 数値材料試験による異方性超弾性体のパラメータ同定, *Transactions of JSCES*, 2008, 20080024, 2008.

- (18) Watanabe, I. and Terada, K., A method of predicting macroscopic yield strength of polycrystalline metals subjected to plastic forming by micro-macro de-coupling scheme, *Int. J. Mech. Sci.*, Vol. 52, No. 2, 2010, pp. 343–355.
- (19) Patnaik, S.N., Guptill, J.D. and Berke, L., Merits and limitations of optimality criteria method for structural optimization, *Int. J. Num. Meth. Eng.*, Vol. 38, 1995, pp. 3087–3120.
- (20) Kaliske, M., A formulation of elasticity and viscoelasticity for fiber reinforced material at small and finite strains, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, Vol. 185, 2000, pp.225–243.
- (21) Kaliske, M., Schmidt, J., Nonlinear Anisotropic Elasticity at Finite Strains, *22nd CAD-FEM Users' Meeting 2004 International Congress on FEM Technology with ANSYS CFX & ICEM CFD Conference*, 2004.
- (22) Storn, R. and Price, K., Differential Evolution - A Simple and Efficient Heuristic for Global Optimization over Continuous Spaces, *Journal of Global Optimization*, Vol. 11, 1997, pp.341-359.
- (23) Zhou, M., Rozvany, G.I.N., The COC algorithm, part II : Topological, geometrical and generalized shape optimization, *Comp. Meths. Appl. Mech. Eng.*, Vol. 89, 1991, pp.309–336.
- (24) Kato, J., Lipka, A., Ramm, E., Multiphase material optimization for fiber reinforced composites with strain softening, *Struct. Multidisc. Optim.*, Vol. 39, 2009, pp.63–81.
- (25) Belytschko, T., Liu, W.K., and Moran, B., *Nonlinear finite elements for continua and structures*, John Willey & Sons, Ltd., 2000.
- (26) Sigmund, O., Peterson, J., “Numerical instabilities in topology optimization: A survey on procedures dealing with checkerboards, mesh-dependencies and local minima”, *Struct. Multidisc. Optim.*, Vol. 16, No. 1, 1988, pp. 68–75.
- (27) Wang, F., Lazarov, B.S., Sigmund, O. and Jensen, J.S., Interpolation scheme for fictitious domain techniques and topology optimization of finite strain elastic problems, *Comput. Methods Appl.*, Vol. 276, 2014, pp.453-472.
- (28) Dijk, van N.P., Langelaar, M., and van Keulen, F., Element deformation scaling for robust geometrically nonlinear analyses in topology optimization, *Struct. Multidisc. Optim.*, Vol. 50, 2014, pp.537-560.