

フェーズフィールド法による ミクロ構造トポロジー最適化の基礎的研究

加藤 準治¹・加茂 純宜²・高瀬 慎介³・森口 周二⁴・車谷 麻緒⁵
寺田 賢二郎⁶・京谷 孝史⁷

¹正会員 東北大学助教 災害科学国際研究所 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 468-1)

E-mail: jkato@civil.tohoku.ac.jp

²学生会員 東北大学大学院工学研究科 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-06)

³正会員 東北大学助教 大学院工学研究科 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-06)

⁴正会員 東北大学准教授 災害科学国際研究所 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 468-1)

⁵正会員 茨城大学准教授 大学院理工学研究科 (〒316-8511 日立市中成沢町 4-12-1)

⁶正会員 東北大学教授 災害科学国際研究所 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 468-1)

⁷正会員 東北大学教授 大学院工学研究科 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-06)

構造および材料の力学的挙動は、材料の微視構造（ミクロ構造）における幾何学的特性、例えば材料配置や形状、寸法に強く依存することが知られている。そのため、ミクロ構造の幾何学的特性を最適化することでマクロ構造の力学的パフォーマンスを最大限に引き出す、あるいは制御するための研究が盛んに行われている。そこで、本研究では近年材料開発分野において注目されているフェーズフィールド法を導入し、ミクロ構造のトポロジーを最適化するための手法の開発を目指す。本論文では、まずその基礎的研究としてマクロ変形は考慮せずに、ミクロ構造に周期境界と一様変形を与えた条件下で、その剛性を最大にするためのミクロ構造トポロジー最適化を定式化し、さらに本手法がどの程度の初期値依存性を有するかについて幾つかの数値計算例を用いて検証した。

Key Words : phase-field method, topology optimization, microstructures, homogenization

1. はじめに

構造および材料の力学的挙動は、材料の微視構造における幾何学的特性、例えばミクロな領域における材料配置や形状、寸法に強く依存し、この依存性は材料の破壊に至るような非線形領域において顕著になることが知られている。例えば、金属のマクロ的な力学的特性である強度や靱性の向上を図る場合、それを可能とするミクロ結晶組織の研究開発が行われる。しかし、材料の構成元素の選択はもとより、そのようなミクロ構造を発見することは容易ではなく、蓄積された知見をもとにトライアルアンドエラーによる材料開発が行われるため、ある一定の強度や靱性の改善は期待できるものの、それにより得られたミクロ構造組織は必ずしも最適な構造であるとは言い難い。

このような背景から、近年、数理的アプローチを活用して最適なミクロ構造組織を決定する研究が盛んに行われている。特に、先端材料などの開発分野においては、蓄積された情報が少ない場合も多く、数理的手法に対する期待は大きい。そのため、本研究ではミクロ構造の幾何構造を最適化することでマクロ構造の力学的特性を最大にする数理的手法の開発に向けた基礎

的研究を行う。ここでは、材料ミクロ組織の幾何構造を示す最も基本的なものとしてその材料配置、すなわち、ミクロ構造のトポロジーを最適化する問題を取り上げる。

ところで、ミクロ構造のトポロジー最適化を実施した研究報告については、その問題設定によって、「マクロ構造の力学的挙動は考慮せずに、ミクロ構造だけを対象とした研究」と「ミクロ-マクロスケール間の階層的な力学関係を考慮した、いわゆるマルチスケール解析を導入した研究」の2つに区別することができる。前者については、例えば、Sigmund³⁾の提案した、所与のマクロ材料剛性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、Sigmund と Torquato⁴⁾の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、Larsen ら⁵⁾の負のポアソン比を発現できるトポロジー最適化法など、現在も多くの研究開発が行われている。一方、後者については、近年その研究が増えつつあり、Rodrigues ら⁶⁾、Niu ら⁷⁾、Nakshatrala ら⁸⁾、また、著者らの研究グループが行った研究報告^{1),2)}がある。

上で記した研究報告は、いずれも固定した有限要素メッシュを用い、多孔質材料、あるいは複合材料の材料パラメータを密度法などによって正則化 (regularization)

した後、設計変数に対する感度を情報源として、そのトポロジを更新するものである。しかし、合金をはじめ、実際の材料ミクロ組織は非常に複雑な形態を呈しているため、一般的な有限要素メッシュによる幾何構造の表現方法では、その形態を正しく表現することは困難である。例えば、斜め方向に配向した繊維補強材の材料配置を一般的な直交格子メッシュを用いて表現しようとしても、材料界面は要素メッシュに依存してジグザク形状となってしまう（メッシュ依存性）。また、いわゆる‘グレースケール’が存在する限り、材料界面を正確に表現することはできない。もちろん、有限要素メッシュを細かくすることで、その影響を極力小さく抑えることも可能であるが、膨大な計算コストを招く結果となる。これに加えて、有限要素メッシュを用いたトポロジ最適化では、トポロジを更新する過程でフィルタリングと呼ばれる操作が必要であり、そのパラメータの初期値や設定次第で最終のトポロジも大きく異なるなどの課題もある。そのため、材料のミクロ組織を最適化する研究を遂行するためには、実材料の複雑なミクロ構造幾何をフレキシブルに表現でき、さらにメッシュ依存性やパラメータの初期値依存性の少ない表現方法の導入が必要とされる。

このような経緯を踏まえると、近年盛んに用いられているレベルセット法やフェーズフィールド法などの自由度の高い幾何学的表現性能を活用することが解決策として考えられる。レベルセット法を導入したトポロジ最適化について言えば、多くの研究報告がなされており、著者らの知見では、その有効性については概ね認められたものと認識している。一方、フェーズフィールド法を活用したトポロジ最適化については、現在も開発段階であるといえる。フェーズフィールド法は、材料科学のナノからメゾスケールにおける複雑・多様な組織形成シミュレーションに特化した手法であり、材料の幾何構造を制御するフェーズフィールド変数と呼ばれる秩序変数を用いて系の全自由エネルギーを定義し、そのエネルギーが小さくなるように熱力学第2法則に従う時間発展方程式を解くものである。

すなわち、これまでのトポロジ最適化は、大抵は設計変数に対する感度を求め、それを情報源として解を最適解へ近づけるのに対し、フェーズフィールド法を導入したトポロジ最適化では、まずは力学問題として有限要素法を解き、その力学現象に基づく時間発展方程式を解くというこれまでとは異なるアプローチとなる。

そこで、本研究では、フェーズフィールド法による表現方法を導入し、ミクロ構造のトポロジ最適化問題と解法を定式化する。なお、フェーズフィールド法を用いたトポロジ最適化の研究報告に関して、著者ら

の知る限りではBurgerとStainko¹⁰⁾、GainとPaulino¹¹⁾、TavakoliとMohseni¹²⁾、高木¹³⁾、竹澤ら¹⁴⁾などがある。これらの研究はいずれもマクロ構造のトポロジ最適化を対象にしたもので、フェーズフィールド法の本来の役割から言えばミクロ構造の幾何表現に用いられるべきである。このような観点からいうと、フェーズフィールド法をミクロ構造のトポロジ最適化に適用させることは、学術的にも意義の高いものであると言える。ただし、本研究はフェーズフィールド法をミクロ構造に導入するための基礎的研究であり、まずはマクロ構造の変形挙動は考慮せずに、ミクロ構造（ユニットセル）に周期境界と一様変形を与えた条件下で、その剛性を最大にするミクロ構造のトポロジ最適化問題を定式化する。また、本研究では、高木¹³⁾が提案する、マクロ構造を対象としたトポロジ最適化の手法を参考とし、それをミクロ境界値問題へ適用したものである。ここでは、基礎的検討としてまずは単純な多孔質材料を対象とした最適化問題を設定し、本手法の妥当性の検証およびミクロ構造の初期値依存性に着目した検証例を示す。

2. フェーズフィールド法を用いミクロ構造トポロジ最適化問題

本研究ではフェーズフィールド法を導入してミクロ構造のトポロジ最適化を実施するが、ここでは2相の材料で構成されるユニットセルに対し、所与のマクロひずみ（もしくは相対変位）を与え、また、ユニットセル全体では初期の材料の体積は変化しないという制約条件を課した上で、その剛性を最大にする問題を解く。そのため、この問題は所与の（一定の）変形量を与えた条件化におけるひずみエネルギー最大化問題として取り扱う。

ところで、フェーズフィールド法は、領域内にある境界の移動を、領域全体の相の状態を表すフェーズフィールド変数 ϕ の時間発展方程式を解くことで、境界を追従することなく表現できる手法である。時間発展方程式は、フェーズフィールド変数 ϕ を用いて、領域全体の自由エネルギーを定義した後、熱力学第2法則「系の自発的变化は自由エネルギーが時間とともに減少する方向へ進む」という原理に基づいて導出される。時間発展方程式については、本最適化問題のように領域全体において相の総体積量が保存される、いわゆる保存系の問題の場合は、一般にCahn-Hilliard方程式、非保存系の場合はAllen-Cahn方程式に従う。しかし、Cahn-Hilliard方程式は4階の微分方程式であり、計算コストの増大が懸念されるため、本研究ではAllen-Cahn方程式にペナルティ項として体積制約条件を付加した手法を用

いた。この手法の妥当性については、Blank¹⁵⁾の研究報告で詳細に述べられている。

以下では、高木¹³⁾が示した方法に従いながら、順に自由エネルギー汎関数の構築および係数と物性値の関連付け、Allen-Cahn 方程式に従う時間発展方程式と最適化のための更新式を示す。なお、構成する 2 相をそれぞれ phase-1 ($\phi = 0$), phase-2 ($\phi = 1$) と定め、相の境界において ϕ は滑らかに変化し、この領域を界面と呼ぶ。また、多孔質材料を想定しているため、phase-1 を空隙、phase-2 を固体材料として考える。この問題設定においては、フェーズフィールド変数 ϕ は最適化問題でいうところの設計変数を意味し、一般的なトポロジー最適化の場合と同様に $0 \leq \phi \leq 1$ の間で連続的に変化する関数として定義する。界面領域は、図-1 で示すように、 λ を用いて $\lambda \leq \phi \leq (1 - \lambda)$ で定義し、この領域内では phase-1、phase-2 の 2 相混合状態であると考ええる。

(1) 自由エネルギー汎関数の構築

ここでは、フェーズフィールド変数 ϕ を用いて自由エネルギー関数 F を以下のように構築する。

$$F = F_m + F_p \quad (1)$$

ここで、 F_m はバルクの自由エネルギー、 F_p は体積一定条件を満足するために導入されるエネルギーであり、それぞれ以下のように書くことができる。

$$F_m = \int_Y f dy, \quad (2)$$

$$F_p = k|V - V_0| \quad (3)$$

ここで、 y はミクロスケールを意味する。また、 f は自由エネルギー密度を意味し、次式のように書くことができる。

$$f = f_{\text{doub}} + f_{\text{grad}} - f_{\text{elast}} \quad (4)$$

ここで、 f_{doub} , f_{grad} , f_{elast} はそれぞれダブルウェルポテンシャル、勾配エネルギー、弾性ひずみエネルギーであり、それぞれ以下の式で表される。

$$f_{\text{doub}} = Wq(\phi) = W\phi^2(1 - \phi)^2 \quad (5)$$

$$f_{\text{grad}} = \frac{a^2}{2} |\nabla \phi|^2 \quad (6)$$

$$f_{\text{elast}} = \frac{1}{2} \mathbb{C}_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} \quad (7)$$

ここで、 a は勾配エネルギーの大きさを示す勾配係数、 W はエネルギー障壁と呼ばれる。また、 ε は線形のひずみテンソル、 $\mathbb{C}$ は有効材料弾性係数であり、phase-1 の弾性係数をゼロと考えれば以下のように表される。

$$\mathbb{C} = \mathbb{C}^0 \rho(\phi) = \mathbb{C}^0 \phi^3 (10 - 15\phi + 6\phi^2) \quad (8)$$

ここで、 $\mathbb{C}^0$ は phase-2 の材料弾性係数である。 $\rho(\phi)$ はエネルギー密度分布関数で一般によく使用される関数を用いた。この式から明らかなように、有効材料弾性

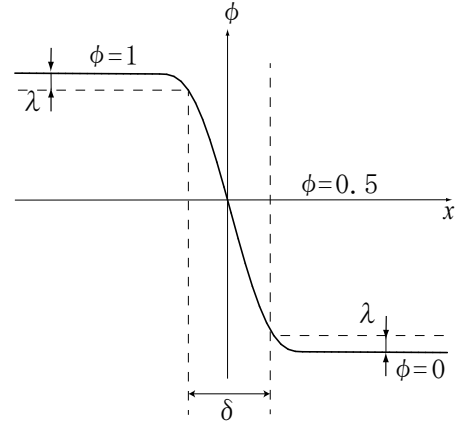


図-1 界面幅の定義

係数 $\mathbb{C}$ はフェーズフィールド変数 ϕ に陽的に依存するものである。また、式 (3) の V は

$$V = \int_Y \rho(\phi) dy \quad (9)$$

で表される phase-2 の体積であり、 V_0 は領域全体で phase-2 の占める初期体積、 k は更新される体積 V が初期体積から外れると利いてくるペナルティー係数である。

(2) 係数と物性値の関連付け

フェーズフィールド法では、時間発展方程式に現れる係数と物性値を関係づけることができるため、それにより時間と空間に対して定量的な評価が可能となる。外力が作用せず、内部応力がゼロなる状態を仮定して式 (1) の一次平衡問題を解くとエネルギー障壁 W と勾配係数 a は、界面幅 δ および界面エネルギー γ を用いて以下のように関係づけられることが知られている。

$$W = \frac{6\gamma b}{\delta} \quad (10)$$

$$a = \sqrt{\frac{3\delta\gamma}{b}} \quad (11)$$

ここで、 b は $b = 2 \tanh^{-1}(1 - 2\lambda)$ で与えられる。 λ は、一般に $\lambda = 0.1$ を用いて算出されることが多く、その場合 $b \approx 2.2$ となる。係数と物性値の関係式の導出については、文献^{13),16)}に詳細に示されているため、それを参考にしたい。

(3) 時間発展方程式の導出

構築した自由エネルギー関数 F を用いて時間発展方程式を導出する。まず、式 (1) の汎関数微分は以下のよ

うになる.

$$\frac{\delta F}{\delta \phi} = -a^2 \nabla^2 \phi - 4W\phi(1-\phi) \cdot \left(\phi - \frac{1}{2} + \frac{15}{2W} \frac{1}{2} \mathbb{C}_{ijkl}^0 \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} \phi(1-\phi) \pm \frac{15}{2W} k\phi(1-\phi) \right) \quad (12)$$

これを次式の Allen-Cahn 式に代入し,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M_\phi \frac{\delta F}{\delta \phi} \quad (13)$$

それを整理すると次のように書き表される.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = M_\phi \left[a^2 \nabla^2 \phi + 4W\phi(1-\phi) \cdot \left(\phi - \frac{1}{2} + \frac{15}{2W} \frac{1}{2} \mathbb{C}_{ijkl}^0 \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} \phi(1-\phi) \pm \frac{15}{2W} k\phi(1-\phi) \right) \right] \quad (14)$$

さらに, 両辺を $4WM_\phi$ で除して時間を $t = 4WM_\phi t$ と無次元化し, 物性値と関係づけて整理すると次式を得る.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\delta^2}{8b^2} \nabla^2 \phi + \phi(1-\phi) \left(\phi - \frac{1}{2} + \beta \right) \quad (15)$$

β は界面エネルギーに対する弾性ひずみエネルギーと体積一定条件のペナルティー係数 k の比によって定まり, β の符号によって界面の移動方向が, 絶対値の大きさによって界面の移動速度がそれぞれ決まる. β は高木¹³⁾の提案に従い, 次式のように更新する.

$$\beta = \begin{cases} \frac{e(\phi)}{e_{ave}} \beta_1 + 4\phi(1-\phi)\alpha\beta_2 & \cdots & e(\phi) \leq e_{ave} \\ \beta_1 + 4\phi(1-\phi)\alpha\beta_2 & \cdots & e(\phi) > e_{ave} \end{cases} \quad (16)$$

ここで, $e(\phi)$ は

$$e(\phi) = \frac{1}{2} \mathbb{C}_{ijkl}^0 \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} \phi(1-\phi) \quad (17)$$

であり, e_{ave} は界面領域内の格子点を持つひずみエネルギーの平均値である. α は体積変化率により定まる値で, 式 (15) における β について, $\alpha = 0$, $\alpha = 1$ とした場合の n ステップ時の体積を求め, それぞれ V_1^n , V_2^n とし,

$$\alpha = \frac{V_1^n - V_0}{V_1^n - V_2^n} \quad (18)$$

によって決定する. また β_1 , β_2 は $\beta_1 + \beta_2 = 0.5$ を満たす定数である. このように β をモデリングすることで, トポロジーを剛性最大化へと向かわせることができる.

3. ミクロ境界値問題

(1) 境界値問題の設定

本研究ではフェーズフィールド法を用いてミクロ構造の幾何特性を表現し, その力学的挙動は有限要素法によって計算する. そのため, ここではミクロスケール

における境界値問題について記述する. まず, ミクロ変位場 $\mathbf{w}$ をマクロひずみ $\mathbf{E}$ に比例して線形分布する項 $\mathbf{E}\mathbf{y}$ とミクロ構造の非均質性に起因して生じる擾乱項 $\mathbf{u}^*$ を用いて次式のように定義する.

$$\mathbf{w} = \mathbf{E}\mathbf{y} + \mathbf{u}^* \quad (19)$$

ただし, この擾乱変位 $\mathbf{u}^*$ には, 次式のようにユニットセル境界上 ∂Y で周期的であるという拘束条件を与えた.

$$\mathbf{u}^*|_{\partial Y^{[k]}} = \mathbf{u}^*|_{\partial Y^{[k-1]}}, \quad \text{for } k = 1, 2, 3 \quad \text{on } \partial Y^{[k]} \quad (20)$$

ここで, $\partial Y^{[k]}$ は図 2 に示すようにユニットセルが矩形でその境界面が座標軸と平行に定義されていると仮定した場合に, 正規直交基底ベクトル $\mathbf{e}_k$ が法線ベクトルとなるような境界領域を意味する. また, この擾乱変位 $\mathbf{u}^*$ の周期性より, 実変位についても次式のような対となる境界面間の相対変位に関する拘束条件式が得られる.

$$\mathbf{w}^{[k]} - \mathbf{w}^{[-k]} = \mathbf{E}\mathbf{L}^{[k]} \quad (21)$$

ここで, 簡単のため $\mathbf{w}^{[k]} := \mathbf{w}|_{\partial Y^{[k]}}$ とおいた. また, $\mathbf{L}^{[k]}$ は, 矩形ユニットセルの $\mathbf{e}_k$ 軸方向において対となる境界面上の物質点を結合するための境界辺ベクトルと呼ばれ, 以下のように定義される.

$$\mathbf{L}^{[k]} := \mathbf{y}|_{\partial Y^{[k]}} - \mathbf{y}|_{\partial Y^{[k-1]}} \quad (22)$$

ユニットセルのもう一つの周期境界条件として, 単位ベクトル $\mathbf{n}$ を有する境界面上のミクロ表面応力ベクトル $\mathbf{t}^{[n]} = \boldsymbol{\sigma}\mathbf{n}$ はユニットセルの対となる境界面において反対称性が課せられる.

$$\mathbf{t}^{[k]} + \mathbf{t}^{[-k]} = \mathbf{0} \quad (23)$$

ここでも, 簡単のため $\mathbf{t}^{[\pm k]} := \mathbf{t}^{[\pm \mathbf{e}_k]}$ とおいた. 以上に述べた式にミクロスケールの平衡方程式とミクロ材料の構成則を加えた式により, ユニットセルに対するミクロ境界値問題が定義できる. これらを再び整理して書き下すと以下ようになる.

$$\left. \begin{aligned} \nabla_y \cdot \boldsymbol{\sigma} &= \mathbf{0} \\ \boldsymbol{\sigma} &= \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon} \\ \boldsymbol{\varepsilon} &= \nabla_y^{\text{sym}} \mathbf{w} \end{aligned} \right\} \quad \text{in } Y \quad (24)$$

$$\mathbf{w}^{[k]} - \mathbf{w}^{[-k]} = \mathbf{E}\mathbf{L}^{[k]} \quad \left. \right\} \quad \text{on } \partial Y^{[k]} \quad (25)$$

ここで, $\mathbb{C}$ はミクロ構造内に分布する材料の線形弾性係数であり, 式 (8) で紹介した有効材料弾性係数である.

(2) 仮想仕事式および離散化

ここでは, ミクロ境界値問題の解法について概説する. 最初にミクロ境界値問題の有限要素解析を行う準備として, ユニットセル領域を有限要素メッシュで離

散化する。マイクロ境界値問題 (24) の第 1 式と反対称性の式 (23) を考慮すると、マイクロ構造の仮想仕事式は以下のように定式化できる。

$$\int_Y \delta \boldsymbol{\varepsilon}^* : \boldsymbol{\sigma} \, dy = \int_Y \nabla_y^{\text{sym}} \delta \mathbf{u}^* : \boldsymbol{\sigma} \, dy = 0 \quad (26)$$

ここで、 $\delta \mathbf{u}^*$ と $\delta \boldsymbol{\varepsilon}^*$ はそれぞれ周期境界条件を満たす仮想擾乱変位と仮想擾乱ひずみを示す。この仮想仕事式 (26) は、以下の有限要素近似の仮定のもと離散化することができる。

$$\mathbf{w} = \sum_{\alpha=1}^{n_{\text{node}}} N_{\alpha} \hat{\mathbf{w}}_{\alpha}^e \quad \text{or} \quad \mathbf{w} = \mathbf{N} \hat{\mathbf{w}}^e \quad (27)$$

$$\delta \mathbf{w} = \sum_{\alpha=1}^{n_{\text{node}}} N_{\alpha} \delta \hat{\mathbf{w}}_{\alpha}^e \quad \text{or} \quad \delta \mathbf{w} = \mathbf{N} \delta \hat{\mathbf{w}}^e \quad (28)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \sum_{\alpha=1}^{n_{\text{node}}} \mathbf{B}_{\alpha} \hat{\mathbf{w}}_{\alpha}^e \quad \text{or} \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{B} \hat{\mathbf{w}}^e \quad (29)$$

$$\delta \boldsymbol{\varepsilon} = \sum_{\alpha=1}^{n_{\text{node}}} \mathbf{B}_{\alpha} \delta \hat{\mathbf{w}}_{\alpha}^e \quad \text{or} \quad \delta \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{B} \delta \hat{\mathbf{w}}^e \quad (30)$$

ここで、 $\mathbf{N}$ は形状関数、 $\mathbf{B}$ はいわゆる $\mathbf{B}$ マトリックス、 $\hat{\mathbf{w}}^e$ はユニットセル中の要素のマイクロ節点変位ベクトルを指す。これと同様にして $\delta \mathbf{u}^*$ と $\delta \boldsymbol{\varepsilon}^*$ はそれぞれ $\delta \mathbf{u}^* = \mathbf{N}(\delta \hat{\mathbf{d}}^{*e})$ と $\delta \boldsymbol{\varepsilon}^* = \mathbf{B}(\delta \hat{\mathbf{d}}^{*e})$ のように離散化できる。これらの式より、仮想仕事式 (26) を離散化した式は以下になる。

$$\sum_{e=1}^{n_{\text{ele}}} (\delta \hat{\mathbf{d}}^{*e})^T \int_{Y_e} \mathbf{B}^T \mathbb{C} \mathbf{B} \, dy (\hat{\mathbf{w}}^e) = 0 \quad (31)$$

仮想擾乱変位 $\delta \hat{\mathbf{d}}^{*e}$ は任意であることから、式 (26) の離散化方程式は式 (31) をアセンブルすることで以下のように表せる。

$$\mathbf{K}^m \hat{\mathbf{w}} = \mathbf{0} \quad \text{with} \quad \mathbf{K}^m = \sum_{e=1}^{n_{\text{ele}}} \int_{Y_e} \mathbf{B}^T \mathbb{C} \mathbf{B} \, dy \quad (32)$$

ここで、 $\mathbf{K}^m$ はユニットセルにおける全体剛性マトリックスで、 $\hat{\mathbf{w}}$ は全体のマイクロ節点変位ベクトルである。

(3) フェーズフィールド変数の周期境界条件

本研究では、フェーズフィールド変数 ϕ の時間発展方程式を差分法を用いて解く。そのため、ユニットセル境界上格子点での空間微分を求めるために、**図-3** に示すようにユニットセル（設計領域）の外側に一列の格子点を設けている。いま、設計領域が $N \times N$ の格子点を持ち、各格子点におけるフェーズフィールド変数を $\phi(l, m)$, $\{l, m = 0, \dots, N+1\}$ のように表すとした場合、本研究では、次式で示すようなフェーズフィールド変数 ϕ の周期境界条件を与えた。

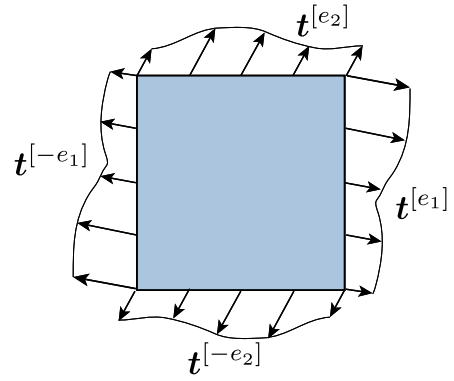


図-2 ユニットセルの表面力ベクトル

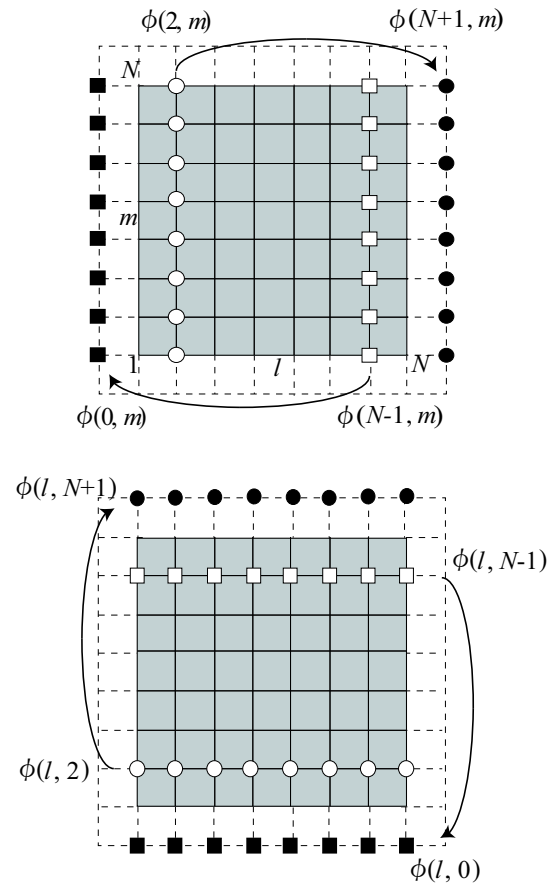


図-3 フェーズフィールド変数 ϕ の周期境界条件

$$\begin{cases} \phi(0, m) = \phi(N, m) \\ \phi(N+1, m) = \phi(1, m) \\ \phi(l, 0) = \phi(l, N) \\ \phi(l, N+1) = \phi(l, 1) \end{cases} \quad (33)$$

図-3 は、ユニットセルの各境界辺の前後列に課された周期境界条件を示している。

4. 最適化計算例を用いた初期値依存性の検証

(1) 解析モデル

ここでは、2次元平面問題を対象に本研究で提案するフェーズフィールド法を用いたマイクロ構造最適化手法の計算例を紹介し、その結果から本手法の妥当性および初期値依存性について検証する。マイクロ構造は、正規化して単位長さを持つ正方形のユニットセルでモデル化した。なお、本最適化問題では、力学問題を解くための有限要素メッシュとフェーズフィールド法に用いる格子メッシュの2つのメッシュを使用しており、有限要素メッシュは、フェーズフィールド法の時間発展方程式を解く格子メッシュと同じサイズおよび分割数のものを用いている。平面ひずみ問題を仮定した4節点四辺形要素で離散化し、要素数は10000 (100 × 100) である。なお、界面幅 δ は要素長の3倍として設定した。また、時間増分は拡散方程式の陽解法の安定性を考慮して、安全側に $\Delta t = 8b^2(\Delta x)^2/(5\delta)^2$ とした¹³⁾。ここで、 Δx は格子サイズである。

材料は前述のとおり多孔質材料とし、線形弾性体モデルで、phase-1 (青) を空隙、phase-2 (赤) を固体材料とした。固体材料のヤング係数を100GPa、空隙についても数値計算の安定性を考慮して 1.0×10^{-2} GPa のヤング係数を与えている。また、ポアソン比はともに $\nu = 0.3$ とした。この構造に含まれる材料は phase-1 の空隙、phase-2 の固体材料ともに50%ずつ含まれるものとし、最適化計算中も変化しないものとする。

上で用意したユニットセルに対し、周期境界条件を与えた上で図-4のような、(a) y_1 方向に一樣な引張変形、(b) y_2 方向に一樣な引張変形、(c) y_{12} 方向に一樣なせん断変形を与えた場合の3つのケースについて検討する。以下の最適化計算例では、初期の材料配置が最終的なマイクロ構造のトポロジーに与える影響を検証する。

最初に、図-5に示す case-A, case-B, case-C のような3種類の穴の配置を与えた場合の計算例を実施する。次に、図-10のように phase-1 と phase-2 の材料配置を反転させた場合の計算例、さらに、穴を不規則に配置した場合の最適化例を実施する。最後に、材料配置の初期値依存性を無くすことを意図して、すべての格子点上で $\phi = 0.5$ とすることで領域のすべての点において、phase-1 と phase-2 が一樣に50%ずつ含まれた状態に設定した例について紹介する。ちなみに、本計算例の多くは、初期構造において円形状の配置を用いるため、材料体積を厳密に制御するのは困難であり、極力50%ずつとなるように設定しているものの僅かな誤差が残ることは避けられない。

なお、この検証にあたってはいずれの最適化例も「一意に解が求まらない最適化問題」、すなわち非一意性の

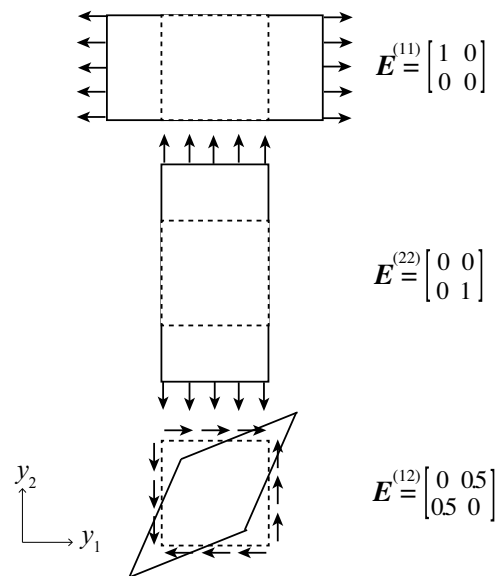


図-4 ユニットセルに与える一樣変形図; 上から順に、荷重ケース (a) y_1 軸方向引張り、(b) y_2 軸方向引張り、(c) y_{12} 方向せん断変形を与えた図および所与のマクロひずみ成分

問題であることに注意されたい。「一意に解が求まらない」とは、数学上同じ目的関数値を与える最適解が複数存在することを意味する。そのため、同じトポロジー最適化問題であっても、異なる最適化トポロジーが得られ、しかもそれらはともに最適解であることを意味する⁹⁾。

(2) 最適化計算例 1: 穴の大きさを変えた場合

本計算例では、図-5に示すように、空隙である phase-1 を異なる大きさの円形の穴として規則的に並べた3つの初期構造、case-A, case-B, case-C に対し、前述の3種類の変形を与えた場合の最適化計算例を示す。図-6は、得られた最適化トポロジー、図-7はその応力分布図を示している。

まず、(a) y_1 方向に引張変形、(b) y_2 方向に引張変形を与えた場合の最適化結果を見てみると、それぞれ y_1 方向、 y_2 方向に固体材料が配置されており、引張に抵抗する期待通りの合理的なトポロジーが得られていることがわかる。また、(c) y_{12} 方向にせん断変形を与えた場合の最適化結果については、引張を受ける方向と圧縮を受ける方向に固体材料が配置される、いわゆるクロス型のトポロジーが得られ、せん断変形に抵抗する合理的な構造であるといえる。ただし、図-6 (a3) ~ (c3) から分かるように、穴は完全な矩形にならずに停留していることがわかる。これは、界面領域が減少する方向に発展するフェーズフィールド法の特徴を示すものであるが、格子サイズを小さくするなどの工夫をすれば実用上問題はないものと考えられる。

また、図-8および図-9は、case-A ~ C のひずみエネ

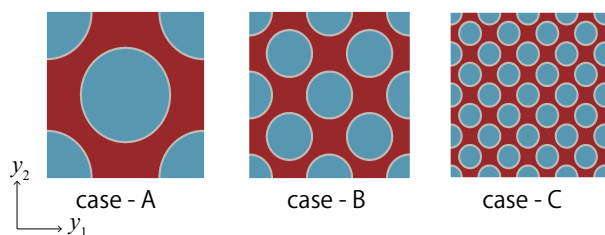


図-5 穴の大きさを変えた場合の初期構造（青が phase-1 で空隙，赤が phase-2 で固体材料）

ルギーの推移を荷重ケース (a) と (c) の 2 ケースについて比較したものである。なお，荷重ケース (b) の結果については，荷重ケース (a) を 90 度回転したものと同一であるため，誌面の関係上ここでは省略した。これらの結果から，いずれの場合においても最適化計算によってひずみエネルギーが増加し，変位一定の条件下で剛性が増加していることが分かる。このことから，本手法によって力学的に合理的な構造が得られることが確認されたといえる。なお，前述のとおり，ここで対象とする問題は非一意性の最適化問題であるため，最適なトポロジーがいくつか存在する。よって，上記で得られたトポロジーは初期構造に依存するものの，いずれも最適構造であると言える。

ところで，図-8 および図-9 を見ると，case-A～C の最適化されたトポロジーにおいて，ひずみエネルギー値に差が生じていることがわかる。これは界面領域の量に起因するもので，界面領域は固体材料よりも剛性が低く，界面領域の多い case-C についてはひずみエネルギーが小さく見積もられてしまうためである。別の見方をすれば，界面領域が多い分，固体に充てがわれる実際の材料体積量が僅かに減少し，それがひずみエネルギー値の差を生む原因となっている。

このような観点から厳密に言えば，フェーズフィールド法を扱う上では「界面領域が最も少ない最適化構造」，すなわち，引張り変形に対しては「変形を受ける方向に平行な一本の太い層」，せん断変形に対しては「斜め 45° あるいは -45° の一本の太い層」が最も剛性の高い構造となりえる（ちなみに，クロス型のトポロジーは界面領域が多いため，「斜め 45° あるいは -45° の一本の太い層」に比べて僅かにひずみエネルギーが小さい）。しかし，本研究で扱う界面は単に 2 つの相を滑らかにつないだもので，そこに特別な物理が存在するわけではない。このような観点からいうと，界面の量によって最適構造が決定されてしまう方法は力学の本質的な問題を捉えたものであるとはいえない。そこで，本研究ではこれらは非一意性の問題として扱い，得られた最適化構造はいずれも最適構造であるとした。

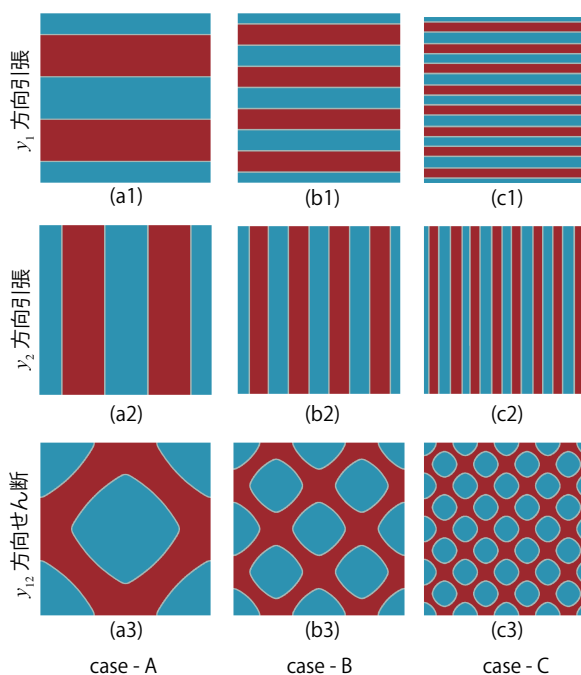


図-6 穴の大きさを変えた場合の最適化結果

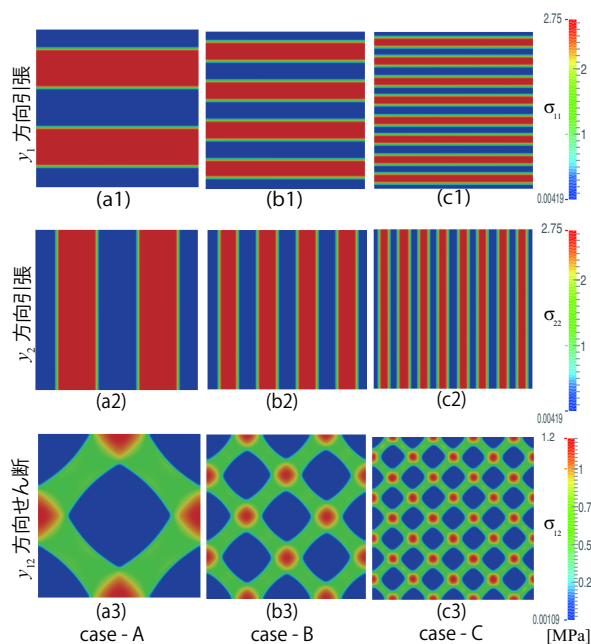


図-7 応力分布図: (a1～c1) y_1 方向軸応力，(a2～c2) y_2 方向軸応力，(a3～c3) y_{12} 方向せん断応力

(3) 最適化計算例 2: 材料配置を反転させた場合

ここでは，図-10 のように case-B における phase-1 と phase-2 の初期の材料配置を反転させた初期構造を持つ case-D について，荷重ケース (a) y_1 方向に引張変形と荷重ケース (c) y_{12} 方向にせん断変形を与えた場合の最適化計算例を示す。図-11 および図-12 は，それぞれ y_1 方向および y_{12} 方向に変形を与えた場合のトポロ

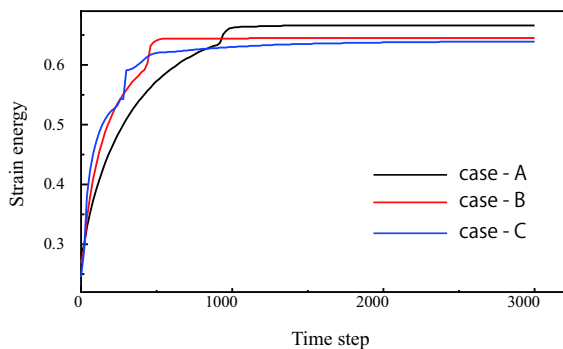


図-8 y_1 方向に変形を与えた場合のひずみエネルギーの推移

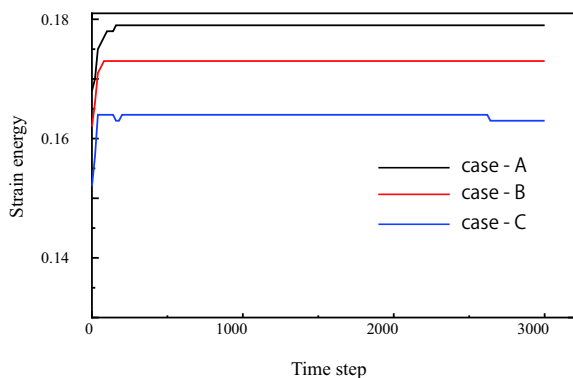


図-9 y_{12} 方向にせん断変形を与えた場合のひずみエネルギーの推移

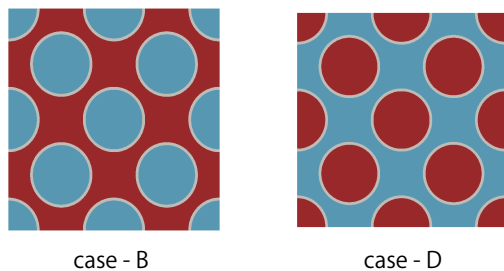


図-10 材料配置を反転させた場合の初期構造

ジの変化の過程を示している。この場合、最適化途中で同じようなトポロジーが現れ、以降、同様のトポロジーの変化がおり、最終的に得られたトポロジーも同じであった。また、図-13および図-14もそれぞれのひずみエネルギーの変化を示しており、ほぼ同じひずみエネルギー値に収束することが確認できた。この結果から、材料を規則的に配置した条件下で、2種の材料配置を反転させても最終的には同じトポロジーが得られることが確認された。

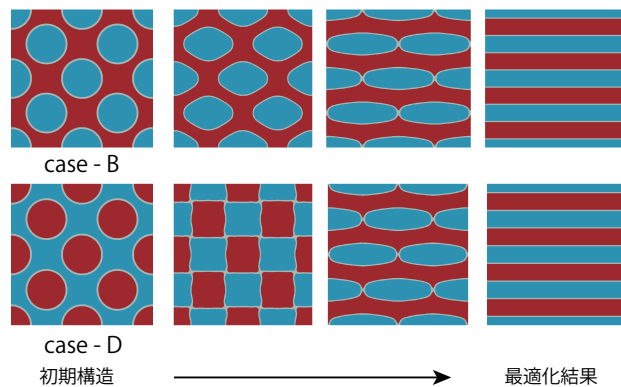


図-11 y_1 方向に変形に一樣な変形を与えた場合のトポロジーの変化 (材料配置を反転させた場合)

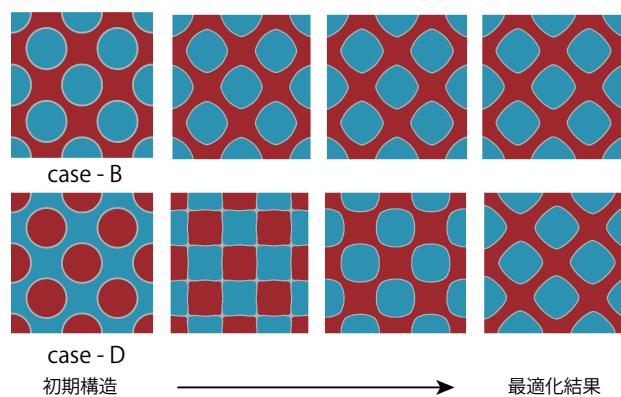


図-12 y_{12} 方向に一樣なせん断変形を与えた場合のトポロジーの変化 (材料配置を反転させた場合)

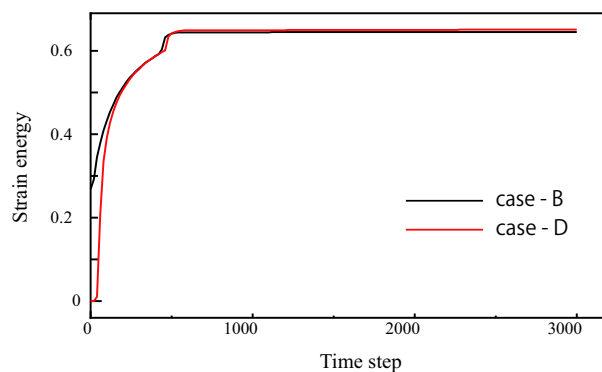


図-13 y_1 方向に一樣な変形を与えた場合のひずみエネルギーの推移 (材料配置を反転させた場合)

(4) 最適化計算例 3: 穴を不規則に配置した場合

ここでは、図-15 (左端の図) のように穴を不規則に配置した初期構造を持つ case-E およびその材料配置を反転させた case-F を用いた最適化計算例を示す。同図は、 y_1 方向に一樣な引張変形を与えた場合のトポロジーの最適化過程を、図-16 は、得られた最適化トポロジーの

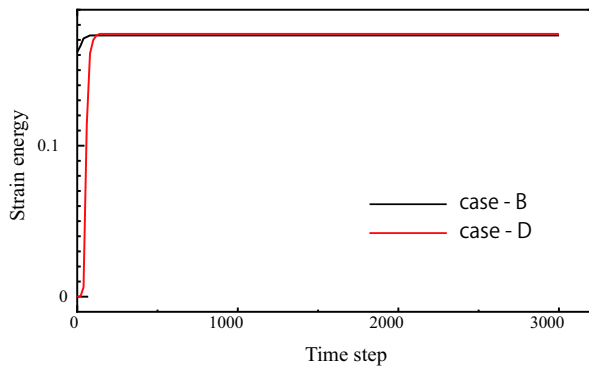


図-14 y_{12} 方向に一樣なせん断変形を与えた場合のひずみエネルギーの推移 (材料配置を反転させた場合)

パッチ図 (2×2 枚の貼付け) を示している。また、同様に図-17および図-18 は、 y_{12} 方向にせん断変形を与えた場合のものである。まず、図-15 の示す、穴を不規則に配置したケース (case-E) とその反転させたケース (case-F) を比較すると、規則的に配置した前項の結果と異なり、初期構造に依存する結果が得られた。もちろん、いずれも力学的に合理的な最適構造であるといえる。

また、図-17 に示したせん断変形を与えた場合のうち case-F については、圧縮方向 (鉛直軸より時計周りに -45° の斜め一方向) のみに抵抗するようなトポロジーが得られた。これは、これまで得られていたクロス型のトポロジーや引張方向 (鉛直軸より時計周りに 45° 斜め一方向) にのみに抵抗するトポロジーと同じく最適構造のひとつである。なお、図-18 で示されるように、せん断に対してクロス型および斜め一方向のどちらのトポロジーが得られるかを予測するのは困難である。

ただし、著者らのこれまでの経験から言えば、計算例 1 のように幾何学的に固体材料が母材、空隙が介在物のような初期の材料配置では、固体材料がユニットセル全体でつながっている状態であり、既に比較的大きな剛性を有することから、そこからのトポロジーの変化はあまり大きくなく、その初期構造に影響を受けたものに収束しやすい。一方、母材が空気、介在物が固体というような状態と考えられる case-F については、力学的に支配的な材料である固体材料が個々に不連続に存在するしているためその段階での剛性は低く、剛性最大化に向けて大きなトポロジーの変化が期待される。このことを図-12 および図-14 を使って見てみると固体材料が介在物である case-D の初期のひずみエネルギーは図-14 からゼロに近いものであることがわかり、最適解に収束するまでに介在物であった固体材料が母材に変わるような大きな変化をもたらしたと言える。ただし、トポロジーに関しては、初期の穴の配置が規則的であったため、その影響を受けて結果的にはクロス型の

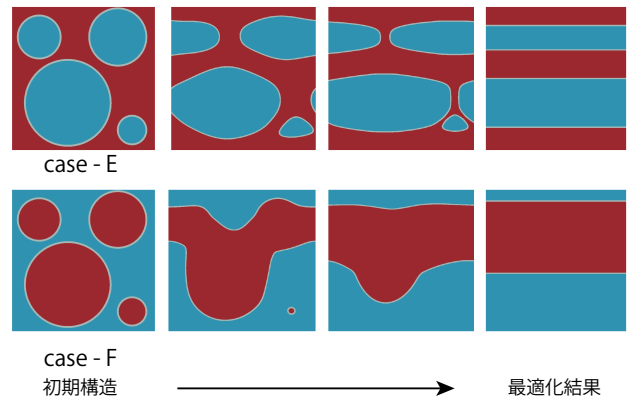


図-15 y_1 方向に一樣な変形を与えた場合のトポロジーの変化 (穴を不規則に配置した場合)

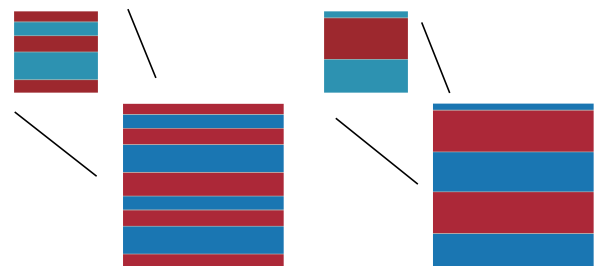


図-16 y_1 方向に一樣な変形を与えた場合の (左) case-E の最適化結果とパッチ、(右) case-F の最適化結果とパッチ

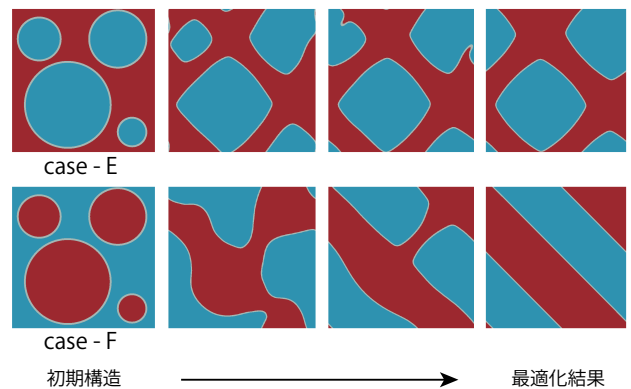


図-17 y_{12} 方向に一樣な変形を与えた場合のトポロジーの変化 (穴を不規則に配置した場合)

トポロジーに収束しており、一方、本計算例の case-F では不規則な配置であったため、クロス型ではなく斜め一方向のトポロジーに収束したと言える。なお、ミクロ構造のせん断変形においては、直感的にクロス型のトポロジーへの収束を期待するが著者らの最適化計算に関する経験では、初期構造で穴を規則的に配置するという特殊な場合を除いて、大抵は斜め一方向のトポロジーが得られる傾向にある。

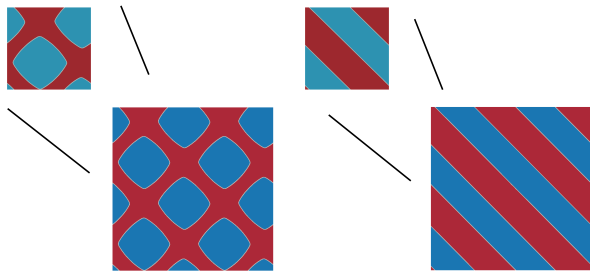


図-18 y_{12} 方向に一樣なせん断変形を与えた場合の (左) case-E の最適化結果とパッチ, (右) case-F の最適化結果とパッチ

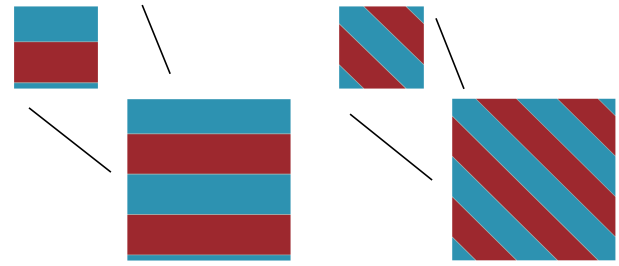


図-20 (左) y_1 方向に一樣な変形を与えた場合の最適化結果とパッチ, (右) y_{12} 方向に一樣なせん断変形を与えた場合の最適化結果とパッチ (材料配置を一樣にした場合)

5. 結論

本研究では, 材料開発分野で注目を浴びているフェーズフィールド法を用いて, ミクロ構造トポロジー最適化手法を構築するための基礎的検討を行った. 具体的には, 初期の材料配置が異なるミクロ構造に一樣な変形を与えた条件下で本手法が有する初期値依存性について考察するとともに, 得られた最適化構造について検証を行った. 本研究で得られた知見は, 本手法は初期の材料配置に対する初期値依存性を有しているが, これらは工学的に一意に解が求まらない問題であるため, いずれも最適解であると見なせること, また, 得られた最適化トポロジーは力学的に合理的な最適構造であることが確認された. さらに, 初期値依存性を極力回避するためには, 初期構造において一樣な材料配置とすることが望ましい点を示された.

なお, 以上は基礎的検討として, ミクロスケールというひとつのスケールに的を絞った研究成果であるが, 今後はマクロ構造の変形を考慮したマルチスケールトポロジー最適化への拡張が期待される. また, 実際のミクロ構造の材料組成を表現するためには, 複数の材料を用いて最適化を行うことが前提となるため, 現在学術的に注目されている「マルチフェーズフィールド法」の導入が期待される.

参考文献

- 1) Kato J, Yachi D, Terada, K. and Kyoya, T. (2014) "Topology optimization of micro-structure for composites applying a decoupling multi-scale analysis", *Struct. Multidisc. Optim.*, 49, pp. 595–608.
- 2) 谷地 大舜, 加藤 準治, 高瀬 慎介, 寺田 賢二郎, 京谷 孝史: マルチスケールトポロジー最適化手法と解析の感度導出法の提案, *Transcriptions of JSCES*, No. 20130022, 1997
- 3) Sigmund, O.: Materials with prescribed constitutive parameters: An inverse homogenization problem, *Int. J. Solid. Struct.*, 31, 13, pp. 2313–2329, 1994.
- 4) Sigmund, O., Torquato, S.: Design of materials with extreme thermal expansion using a three-phase topology optimization method, *J. Mech. Phys. Solids*, 45, 6, pp. 1037–1067, 1997.
- 5) Larsen, U. D., Sigmund, O., Bouwstra, S.: Design and fab-

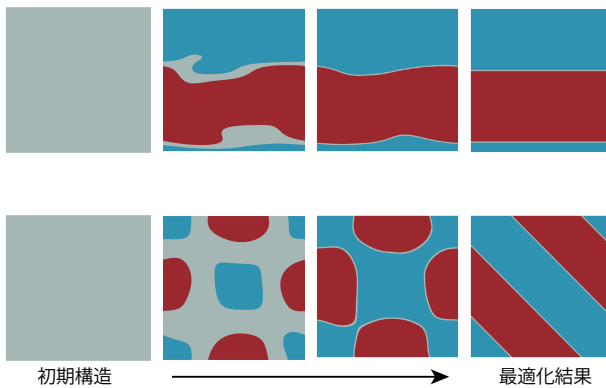


図-19 (上) y_1 方向に一樣な変形を与えた場合のトポロジーの変化, (下) y_{12} 方向に一樣なせん断変形を与えた場合のトポロジーの変化 (材料配置を一樣にした場合)

(5) 最適化計算例 4: 初期の材料配置を一樣にした場合

最後に, 初期の材料配置を領域すべての点において, phase-1 と phase-2 が 50 % ずつ含まれた状態に設定し, 同様の変形を与えた場合の最適化計算例を紹介する. まず, トポロジーの変化の過程と最適化結果をそれぞれ, 図-19, 図-20 に示す. y_1 方向に一樣な引張変形を与えた場合の最適化結果は, y_1 方向に固材材料が等間隔で配置され, y_{12} 方向にせん断変形を与えた場合については, 斜め -45° 方向の圧縮方向に固材材料が等間隔で配置されたトポロジーが得られた. この結果から, 一樣な材料配置の初期構造を用いれば, 前項の固材材料を介在物, 空気が母材と考えたような構造と同様に固材材料の変化する自由度が高く, 最終的には太い繊維材のようなレイアウトを模擬するような単純なトポロジーに収束する傾向にあると思われる.

以上をまとめると, 本論文で実施した最適化計算例において, 初期の材料配置に対する初期値依存性を持ちつつも, いずれも力学的に合理的な最適構造が得られることが確認された. また, 初期値依存性を極力回避するためには, 初期の構造において一樣な材料配置とするのが望ましい点を示された.

- rication of compliant micromechanisms and structures with negative Poisson's ratio, J. MEMS, 6, 2, pp. 99–106, 1997.
- 6) Rodrigues, H., Guedes, J. M., Bendsøe, M. P.: Hierarchical optimization of material and structure, Struct. Multidisc. Optim., 24, pp. 1–10, 2002.
 - 7) Niu, B., Yan, J., Chen, G.: Optimum structure with homogeneous optimum cellular material for maximum fundamental frequency, Struct. Multidisc. Optim., 39, 2, pp. 115–132, 2009.
 - 8) 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. Engrg., 261–262, pp. 167–176, 2013.
 - 9) Sigmund, O., Pettersson, J.: Numerical instabilities in topology optimization: A survey on procedures dealing with checkerboards, mesh-dependencies and local minima, Struct. Multidisc. Optim., 16, 1, pp. 68–75, 1998.
 - 10) Burger, M., Stainko, R.: Phase-field relaxation of topology optimization with local stress constraints, SIAM J. CONTROL. OPTIM., 45, pp. 1447–1466, 2006.
 - 11) Gian, A. L., Paulino, G. H.: Phase-field based topology optimization with polygonal elements: a finite volume approach for the evolution equation, Struct. Multidisc. Optim., 46, pp. 327–342, 2009.
 - 12) Tavakoli, R., Mohseni, S. M.: Alternating active-phase algorithm for multimaterial topology optimization problems 115-line matlab implementation, Materials Science and Engineering Department, Sharif University of Technology, Tehran, Iran, 2013.
 - 13) 高木知弘: Phase-field トポロジー最適設計モデルの構築と基本特性評価, 日本機械学会論文集 (A 編), 77, pp. 1840–1850, 2012.
 - 14) 竹澤晃弘, 西脇眞二, 北村充: フェーズフィールド法と感度解析に基づく構造最適化, 日本機械学会論文集 (A 編), 76, pp. 1–9, 2012.
 - 15) Blank, L., Garcke, H., Sarbu, L., Srisupattarawanit, T., Styles, V. and Voigt, A.: Phase-field Approaches to Structural Topology Optimization, Int. Series Num. Math., 16, 1, pp. 245–256, 2012.
 - 16) 高木知弘, 山中晃徳: フェーズフィールド法 - 数値シミュレーションによる材料組織設計, 養賢堂, 2012.

(2014. 6. 20 受付)

PRELIMINARY INVESTIGATION OF PHASE-FIELD TOPOLOGY OPTIMIZATION FOR MICROSTRUCTURES

Junji KATO, Yoshiki KAMO, Shinsuke TAKASE, Shuji MORIGUCHI, Mao KURUMATANI, Kenjiro
TERADA and Takashi KYOYA

It is well known that the mechanical behavior of material mainly depends on the geometric properties of the microstructure, such as material distribution, shape or size of the material. It is said that it will be possible to maximize the mechanical performance of a macro-structure, if ‘types or kinds of materials to be mixed or the combinations thereof’ are optimized and ‘the geometric properties of micro-structure’ are optimized. For this reason, the authors have developed topology optimization of microstructure using the general finite element method as a numerical approach. However, the general finite element mesh is not necessary appropriate to express the complicated real material distribution of microstructure and furthermore depends considerably on the initial value of some parameters. Thus, the present study applies a new approach, *the phase-field method*, to express the complicated topology of microstructure and introduces the formulation to maximize the stiffness of the microstructure with a prescribed material volume under linear elastic regime. For the fundamental research, we firstly start from investigation of the initial value dependency of the present method on the final optimization solution by making use of a series of numerical examples.