マルチスケールトポロジー最適化手法と解析的感度導出法の提案

Analytical sensitivity analysis for decoupling multi-scale topology optimization of composites

谷地大舜¹,加藤準治²,高瀬慎介²,寺田賢二郎²,京谷孝史¹

Daishun YACHI, Junji KATO, 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(〒980-8579 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉6-6-06)

The present study proposes an analytical sensitivity analysis for a so-called multi-scale topology optimization introduced to minimization of compliance of three dimensional structural problems. The multiscale topology optimization is a strategy to optimize topology of microstructures applying a decoupling multi-scale analysis based on a homogenization method. The stiffness of the macrostructure is maximized with a prescribed material volume of constituents under linear elastic regime. A gradient–based optimization strategy is applied and an analytical sensitivity approach based on the adjoint method is proposed to reduce the computational costs. It was verified from a series of numerical examples that the proposed method has great possibility for microscopic advanced material designs.

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

1. はじめに

複合材料の力学的挙動は、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、その依存性は材料の破壊に至るような非線形領 域においてより顕著になることが知られている.材料 開発の分野では、このようなスケール間の階層的な依 存性を考慮して材料設計が行われることが多い.例え ば合金の材料開発分野では材料強度の改善や靱性の向 上を図る場合、それを可能にするミクロ結晶構造の研 究が行われ、繊維補強材においては、強度や耐衝撃性 能の改善を目指して、ミクロ的な観点から補強材の最 適配置や形状の検討が行われる.これらに共通するこ とは、最適なミクロ構造を見つけることによって、マ クロ構造の力学的パフォーマンスを目的どおりに制御 する、あるいは最大限に引き出すことを意図している ことである.

近年,材料のミクロな特性を制御できる生産技術が 現実のものとなりつつあるという背景を踏まえ,本研 究ではミクロ構造の材料配置(ここではトポロジー) を最適化することでマクロ構造のパフォーマンスを最 大にする手法の開発を行う.

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行われて きた経緯があり、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についてはそれほど多く報告され ていない、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 と 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 ら⁽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 考慮していない点に問題がある。一方, Rodrigues ら⁽⁴⁾ は、マクロ構造とミ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 造に異なるミ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、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ら⁽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 目的としてミクロとマクロ構造両方のトポロジーを同

^{*} 原稿受付 2013 年 10 月 1 日, 改訂 2013 年 11 月 21 日, 発行 2013 年 12 月 13 日. ©2013 年 日本計算工学会.

Manuscript received, October 01, 2013; final revision, November 21, 2013; published, December 13, 2013. Copyright ©2013 by the Japan Society for Computational Engineering and Science.

時に最適化する手法を提案しており、そこでは「ミク 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ミ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,ミ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.Niuら⁽⁵⁾の問題設定とは異なりマクロ構造のトポロジーを変化させない(最適化しない)理由は,例えば合成ゴムで作られたタイヤの設計のように,そのマクロ構造のトポロジーは様々な条件から固定されてしまい,ミクロ領域における材料設計のみで構造特性をコントロールしなければならないような現実的な設計環境を想定したためである.

ところで、上記のようなミクロ-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)~(10)}.こ れらは、ミ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ミクロ-マクロを 相互にやり取りしながら同時に解くもので「ミクロー 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ら⁽⁵⁾の最適化手法を はじめ、「ミクロー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に、Nakshatrala ら⁽¹¹⁾の研究報告がある。Nakshatrala ら⁽¹¹⁾は、超弾性 Neo-Hookean モデルを用いた場合のマルチスケールト ポロジー最適化問題を定式化しているが、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^{(12)~(15)}を取り入れることで計算量を減 らし、さらに並列計算を導入することによって計算を 可能にしている。しかし、その最適化計算例をみると、 計算効率を向上させるために上記の処置をとったにも 関わらず依然として計算量は多く、結果としてミクロ およびマクロ構造ともに非常に粗い要素メッシュを用 いざるを得なかった経緯が伺える。また、経路非依存型 の使用材料モデルのみを扱っており、そもそも数値計 算量が小さくてすむ材料モデルであるがこの手法を塑 性材料のような経路依存性を示す材料モデルへ適用す ることは計算コストの観点から事実上不可能であると いえる.

このような背景から、加藤ら⁽¹⁶⁾は、「分離型マルチ スケール解析法⁽¹⁸⁾」と呼ばれ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、寺田ら⁽¹⁸⁾およ びTeradaら⁽¹⁹⁾,Watanabeら⁽²⁰⁾によって紹介されたも ので、ミクロー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、主に材料非線形性や幾何学 的非線形性を有する変数境界値問題等、複雑で数値計 算量も多い問題に対し、「数値材料実験」と称する近似 的アプローチを導入することでその数値計算量を極力 小さくすることを意図したものある.また、この手法 はミクロおよびマクロ境界値問題を個別に解くことか ら、理論的にも明快な近似的手法であり、様々な材料 モデルにも同じ枠組みで適用出来る点において汎用性 に優れる.

そこで、本研究では文献⁽¹⁶⁾に続いて分離型マルチ スケール解析手法の適用を前提としたマルチスケール トポロジー最適化手法の開発を目的とする.ただし、 本研究は分離型マルチスケール解析手法をトポロジー 最適化に導入するための基礎的段階であるため、文献 ⁽¹⁶⁾と同様に線形弾性体を用いた構造問題を仮定し、マ クロ構造の剛性を最大(コンプライアンスを最小)に する最適化問題を扱う.

本研究で新たに実施することは,(i) 文献⁽¹⁶⁾ で提案 された二次元マルチスケールトポロジー最適化法を三 次元問題へ拡張し,本手法の一般化を図ること,(ii) 随 伴法を基本とした「解析的感度解析法」の提案を行う ことである.後者については,文献⁽¹⁶⁾ で提案されて いる「準解析的感度解析法」を用いた場合,有限要素 数の増加に伴い計算コストが著しく増加し,三次元問 題へそのまま適用することは困難であることを事前の 調査で把握したため,その改善を図るために提案する もので本論文の主要部分である.これについては本文 で詳細に記述する.

本論文では,まず三次元構造問題を対象とした分離 型マルチスケール解析法の概要を述べ,理解を容易に するために適宜二次元問題の図を用いながら本手法を 説明する.次に本研究で使用した材料モデルと最適化 問題の定式化について記述する.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,最適性規 準法⁽²¹⁾(optimality criteria method:以下,OC法と略す) を適用した.その後,本研究で提案する,随伴法を基 本とした解析的感度解析法について述べ,その導出過 程について説明する.最後に,いくつかの数値解析例 を用いて本手法の三次元構造問題への適用性を検証す る.

2. 均質化に基づく分離型マルチスケー ル解析手法

分離型マルチスケール解析手法^{(18)~(20)} 2.1 概要 は、ミクロ-マクロ二変数境界値問題を同時にカップリ ングしながら解く一般的な手法と異なり、ミクロ-マク ロニ変数境界値問題を個々の境界値問題に分離して解 く手法である.まず、ミクロ境界値問題については、均 質化法を基本として周期的なミクロ構造(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、ここで得られたミクロ解 析結果を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. このようにユニッ トセルに対する数値解析を通してマクロ材料挙動を得 る一連の操作は「数値材料試験」と称されている.本 研究では線形弾性体を想定しているため、ミクロ解析 で得られるミクロ応力 σ からマクロ応力Σを計算し, それをマクロ材料剛性 C^H に変換する. そして, 得られ たマクロ材料剛性を直接用いてマクロ境界値問題を解 く手順となる.

なお、従来の線形のマルチスケール解析では、ユニットセルに与える所与のマクロひずみEとユニットセル内の擾乱変位に線形の関係があると仮定し、それを特性変位(一般に χ と置かれる)と呼ばれる変数を導入することでマクロ材料剛性 \mathbb{C}^{H} を求めるが、本手法では特性変位を必要とせず、あくまでユニットセルに課す数値材料試験結果からマクロ剛性を求める点が理論的に異なる。以下では、線形弾性問題の分離型マルチスケール解析法について概説し、詳細については文献($^{18}(20)$)を参考にされたい。

2.2 ミクロ境界値問題 力学的平衡状態にある周期的なミクロ構造を有する非均質弾性体に対して,力学的に等価な均質体を定義したものをマクロ構造と呼ぶ.ここでいう力学的に等価とは,マクロ構造内の任意の点xにおけるマクロ応力Σが非均質性を特徴づける周期的なミクロ構造(ユニットセル)に依存し,それによって定義される.すなわち,次式のようにユニットセル内に分布するミクロ応力σの体積平均で求められることを意味する.

$$\Sigma = \frac{1}{|Y|} \int_{Y} \sigma dy = \langle \sigma \rangle$$
(1)

ここで,Yは周期的なミクロ構造領域を意味し,yは ミクロ構造内の任意の点を示す位置ベクトルでミクロ スケール変数と呼ばれる。

同様にマクロひずみEとミクロひずみ ε も次のような関係にある.

$$\boldsymbol{E} = \frac{1}{|\boldsymbol{Y}|} \int_{\boldsymbol{Y}} \boldsymbol{\varepsilon} \mathrm{d} \boldsymbol{y} = \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle \tag{2}$$

ここで, ミクロひずみ εは, ユニットセル内のミクロ な変位場 w(x,y)より, 次式のように定義され,

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \nabla_{\boldsymbol{y}}^{\text{sym}} \boldsymbol{w} \tag{3}$$



Fig. 1 Traction force vector t of a unit cell and macrostress vector \tilde{t} in 2D

また, ミクロ変位場wは次式のようにマクロひずみに 比例して線形分布する項Ey(線形変位場)と非均質性 に起因して生ずる線形分布からのずれを表す擾乱項u^{*} に分解できるものとする.

$$\boldsymbol{w} = \boldsymbol{E}\boldsymbol{y} + \boldsymbol{u}^* \tag{4}$$

ただし、この擾乱変位 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課す.

$$\boldsymbol{u}^{*}|_{\partial Y^{[k]}} = \boldsymbol{u}^{*}|_{\partial Y^{[-k]}}, \text{ for } k = 1, 2, 3 \text{ on } \partial Y^{[k]}$$
 (5)

ここで、*∂Y*^[k] は二次元問題では Fig.1, 三次元問題では Fig.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 *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 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.

$$w^{[k]} - w^{[-k]} = EL^{[k]}$$
(6)

ここで,簡単のため $w^{[k]} := w_{[ay[k]}$ とおいた.また, $L^{[k]}$ は,矩形ユニットセルの 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.

$$\boldsymbol{L}^{[k]} := \boldsymbol{y}|_{\partial Y^{[k]}} - \boldsymbol{y}|_{\partial Y^{[k-1]}}$$
(7)

また、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 n を有する境界面上のミクロ表面応 カベクトル $t^{[n]} = \sigma n$ 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.

$$t^{[k]} + t^{[-k]} = 0 \tag{8}$$

ここでも簡単のため t^[±k] := t^[±k] とおいた.この周期境 界上のミクロ表面応力ベクトル t をユニットセル境界 で積分し,平均化すると次式のようなマクロの表面応



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

カベクトル ĩ とすることができる(ここでは,図が煩 雑となるため三次元問題の図は省略し,二次元問題を 表す Fig.1 を参照されたい).

$$\tilde{\boldsymbol{t}}^{[k]} = \boldsymbol{\Sigma} \cdot \boldsymbol{e}_{k}$$

$$= \frac{1}{|\partial Y^{[k]}|} \int_{\partial Y^{[k]}} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{e}_{k} dy = \frac{1}{|\partial Y^{[k]}|} \int_{\partial Y^{[k]}} \boldsymbol{t}^{[k]} dy \qquad (9)$$

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のようになる.

$$\begin{array}{c}
\nabla_{y} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{0} \\
\boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon} \\
\boldsymbol{\varepsilon} = \nabla_{y}^{\text{sym}} \boldsymbol{w} \\
\boldsymbol{\Sigma} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle
\end{array}$$
in Y (10)

$$\tilde{\boldsymbol{t}}^{[k]} = \frac{1}{|\partial Y^{[k]}|} \int_{\partial Y^{[k]}} \boldsymbol{t}^{[k]} dy$$
 on $\partial Y^{[k]}$ (11)
$$\boldsymbol{w}^{[k]} - \boldsymbol{w}^{[-k]} = \boldsymbol{E} \boldsymbol{L}^{[k]}$$

ここで、 C はミクロ構造内に分布する材料の線形弾性 係数である.

2.3 外部節点を用いたミクロ問題の境界条件 こ こでは、Terada ら⁽¹⁹⁾ および Watanabe ら⁽²⁰⁾ に従い、前

述のミクロ境界値問題の境界条件に対し,外部節点と いう概念を取り入れて定式化したものを紹介する.ま ず,ユニットセルの周期境界における相対変位に関す る拘束条件式(6)を以下のように書き表す.

$$w^{[k]} - w^{[-k]} = q^{[k]}$$
(12)

ここで,

$$= \boldsymbol{E}\boldsymbol{L}^{[k]} \tag{13}$$

は、対となる周期境界面における相対変位ベクトルを 意味する.また、三次元問題を対象とし直方体のミク ロ構造の各辺が座標軸に平行な場合、境界辺ベクトル *L*^[k]は以下のように表せる。

 $\boldsymbol{q}^{[k]}$

$$\boldsymbol{L}^{[1]} = \begin{cases} l^{[1]} \\ 0 \\ 0 \end{cases}, \quad \boldsymbol{L}^{[2]} = \begin{cases} 0 \\ l^{[2]} \\ 0 \end{cases}, \quad \boldsymbol{L}^{[3]} = \begin{cases} 0 \\ 0 \\ l^{[3]} \end{cases}$$
(14)

ここで, $l^{[1]} \sim l^{[3]}$ はぞれぞれ $e_1 \sim e_3$ 軸に平行な矩形ユニットセル境界辺の長さを指し,それぞれFig.2の中の $Y^{[1]} \sim Y^{[3]}$ に相当する.

文献^{(18)~(20)}では, Fig.2 に示すようにユニットセル 周期境界面 $\partial Y^{[k]}$ ごとに任意の物質点をユニットセル領 域外の各境界面法線方向に一つずつ設け,その各物質 点にそれぞれ $e_1 \sim e_3$ 軸に平行に三自由度を与える,外 部節点なるものを定義し,更にその外部節点の節点自 由度に,相対変位ベクトル $q^{[k]}$ の成分を割り当てた.つ まり,式(12)は対なる周期境界面上の二点の実変位ベ クトルから計算される相対変位量を制御する拘束条件 式である.したがって,数値材料試験においてユニッ トセルにマクロひずみEの任意の成分を与えるために は,式(13)からわかるように結果としてこの外部節点 の相対変位成分 $q_i^{[k]}$ を制御すればよいことになる.

いま,式(12)の変位成分 $q_i^{[k]}$ を既知として与えた場合,それは相対変位 $w_i^{[k]} - w_i^{[-k]}$ を与えたことに他ならず,境界 $\partial Y^{[k]}$ 上のミクロ表面応力ベクトル $t_i^{[k]}$ はその境界全域で未知数となる。また,それによる境界 $\partial Y^{[k]}$ 上での平均値であるマクロ表面応力ベクトル $\tilde{t}_i^{[k]}$ も未知数となる。

しかしながら,既知の相対変位成分 $q_i^{[k]}$ に対応する 外部節点の反力を $R_i^{[k]}$ と表せば,それはミクロ応力ベ クトル $t_i^{[k]}$ をその境界で面積分したもの,すなわち

$$\boldsymbol{R}^{[k]} = \int\limits_{\partial Y^{[k]}} \boldsymbol{t}^{[k]} \mathrm{d} \boldsymbol{y}$$
(15)

に他ならない.したがって,式(9)の関係より,外部節 点の反力式(15)をユニットセル境界面積 $|\partial Y^{[k]}|$ で除し たものが未知のマクロ応力成分 Σ_{ik} となることから次 式が成立する.

$$\Sigma_{ik} = \tilde{t}_i^{[k]} = \frac{R_i^{[k]}}{|\partial Y^{[k]}|} \tag{16}$$

ここで, Fig.3 に示すようにユニットセルに6方向のマ クロひずみ *E*⁽¹¹⁾,*E*⁽²²⁾,..., *E*⁽³¹⁾ を個別に与えて, それぞれ に数値材料試験を実施すれば、マクロ材料剛性 ℂ^Hを 以下のように求めることができる.

$$\mathbb{C}_{pqrs}^{\mathrm{H}} = \Sigma_{pq}^{(rs)} \tag{17}$$

式 (16), (17) を実際の数値計算を意図してそれぞれ行 列形式で書くと以下のとおりとなる.

$$\begin{cases} \Sigma_{11} \\ \Sigma_{22} \\ \Sigma_{33} \\ \Sigma_{12} \\ \Sigma_{23} \\ \Sigma_{23} \\ \Sigma_{13} \\ \Sigma_{13} \\ \Sigma_{13} \end{cases} = \begin{cases} \tilde{t}_{1}^{[1]} \\ \tilde{t}_{2}^{[2]} \\ \tilde{t}_{3}^{[3]} \\ \tilde{t}_{2}^{[1]} = \tilde{t}_{1}^{[2]} \\ \tilde{t}_{3}^{[2]} = \tilde{t}_{2}^{[3]} \\ \tilde{t}_{3}^{[3]} = \tilde{t}_{3}^{[1]} \end{cases}$$
(18)



この数値材料試験で得られたマクロ材料剛性 C^Hを 用いれば、マクロ境界値問題を解くことが可能となる. これは,新たに導入した外部節点という架空の節点の 自由度に、対なる周期境界面の相対変位量を与え、そ の外部節点の節点自由度を含めたミクロ境界値問題を 解くと、その節点自由度(相対変位)に対して反力に 値するものR(応答値)を周期境界面積で除したもの が陰的にはマクロの表面力ベクトルĩであり、それを 直接用いることでマクロ解析に必要なマクロの材料応 答を得ることができることを意味している. すなわち, (材料を選ばずとも) ミクロ境界値問題さえ解くこと ができ,適切なマクロ構成則を導入できれば,数値材 料試験で得られた応答値からマクロの材料物性値を導 出することは可能である.このことは、非線形特性を 有する材料であっても同様の枠組みでマクロの材料物 性値を推定・同定することが可能であることを意味し ている.

3.設計変数の定義およびミクロ材料モ デル

3.1 設計変数の定義 本節では、最適化のための 設計変数を定義した後、複合材料のミクロ材料モデル について記述する.本研究で扱う材料は、Fig.4(左上)に 示すとおり、ミクロ領域において異なる固体二種で構



Fig. 3 Original and deformed homogenized bodies of unit cells and its relation between macro-strain *E*

成された二層複合材料で,空隙を含まない理想的な線 形弾性体とする.本研究では有限要素法を用いてミク ロ境界値問題を解くことを前提とし,ここではユニッ トセル内の各有限要素における構成材料体積比

$$s_i = \frac{r_i}{r_0} \tag{21}$$

を設計変数として定義した.ここで、 s_i は設計変数を 意味し、一般的なトポロジー最適化の場合と同様に $0 \le s_i \le 1$ の間で連続的に変化する関数として定義す る.添え字 $i(=1,...,n_{ele})$ は、i番目の有限要素を意味し、 また、 n_{ele} はユニットセル内の要素の数である.二次元 問題であれば、 $r_0 \ge r_i$ はそれぞれ Fig.4(左下)に示す、ユ ニットセル内の任意要素の高さおよび phase-2 材料の高 さというように図化できる.三次元問題の場合は、そ の図化は困難であるが等方性材料の材料体積比を表す ものであることに変わりはない.これにより、各要素 は $s_i = 0$ の場合、phase-1 がその要素を占め、逆に $s_i = 1$ のときは、phase-2 がそれを占用する.また、0 < s < 1の場合は二つの層の混合物であると考える.

3.2 ミクロ材料モデル 本研究で用いるミクロ材



Fig. 4 Concept of two-phase material optimization

料モデルは,等方性の線形材料を仮定した多層材料モ デル^{(22)~(23)}を用いた.多層材料モデルは,単一の多 孔質材料に広く用いられる SIMP 法⁽²⁴⁾ (Solid Isotropic Microstructure with Penalization of intermediate densities)の 概念を複合材料に拡張したものである.

線形弾性モデルの場合,文献^{(22)~(23)}に準じて,以 下のような等価弾性係数として定義する.

$$\mathbb{C} = (1 - s^{\eta})\mathbb{C}_1 + s^{\eta}\mathbb{C}_2 \tag{22}$$

ここで、Cは線形弾性域における材料剛性であり、式 (10)のそれと同一のものである.この式から明らかな ように材料剛性係数Cは設計変数sに陽的に依存する ものであることがわかる.また、 C_1 および C_2 はそれ ぞれ phase-1 および phase-2 固有の材料弾性剛性で既知 であり、最適化途中も変化しない.なお、 η は式(22)で 示される内挿関数のべき乗数であり、物理的な意味は 持たない.

ところで、このような材料モデルを用いて得られる トポロジーは等方性の材料応答に限定した条件下での 最適化結果であって、真に最適なトポロジーを得るに は不十分なモデルといえる.これを改善するためには、 個々のミクロ材料においてさらに小さなスケールのユ ニットセルを設け、均質化法によってその異方性の材料 応答を加味するなどの方法も考えられるが、これは3 スケールのマルチスケール解析となるため問題がさら に複雑化してしまう.そのため、本研究ではミクロ構 造の各々の材料については簡単のため等方性を仮定し ている.ただし、これによって得られるマクロ材料剛 性 C^H は異方性を示すことに留意されたい.

4. 最適化問題の設定

最適化問題の目的関数を f(s),制約条件を与える等 式制約関数を h(s) と表す. s は,設計変数 s_i を列に並 べたもの,すなわち設計変数ベクトルを意味する.本 研究における目的関数はマクロ構造の剛性であり,こ の最大化問題はコンプライアンス最小化問題と等価で あるとして以下のような定式化を行った.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 制約条件を与えた.本最適化問題では,二種類の材料



Fig. 5 Flowchart of optimization procedure for the proposed method

しか存在しないものと設定しているため, phase-1の体 積も同時にユニットセル全体で変化しないことを意味 し,更には構造全体で一つのユニットセルを共有する ため,マクロ構造全体でも個々の材料の体積は変化し ないことは自明である.以下に加藤ら⁽¹⁶⁾に倣い,行 列形式で表記した最適化問題を記す.

$$\min f(\mathbf{s}) = \mathbf{F}^{\mathrm{T}} \mathbf{d}$$
(23)

$$h(\mathbf{s}) = \int_{Y} s_i \,\mathrm{d}Y - \hat{V} = 0 \tag{24}$$

$$s_{\rm L} \le s_i \le s_{\rm U}$$
 $i = 1, ..., n_{\rm s}$ (25)

ここで、Fおよびdはそれぞれマクロ構造全体系の 外力ベクトルと節点変位ベクトルである.また、 s_L お よび s_U は設計変数の下限と上限値、 n_s は設計変数の 数でここではユニットセル内の有限要素の数 n_{ele} と一 致する. \hat{V} についてはユニットセル内における所与の phase-2 材料の総体積である.

本研究では勾配法による最適化アルゴリズムを用い るため、二変数境界値問題を解いた後に目的関数と制 約関数の設計変数 s_i に関する感度 ∂f/∂s_i, ∂h/∂s_i を求 める必要がある.ここで得られた感度を最適化アルゴ リズム (OC 法) へ組み込み、その時点での最適解を求 め,その解が収束するまで繰り返し計算を行う.なお, OC法の詳細については文献⁽²¹⁾を参照されたい.また, 参考までに Fig.5 に本手法の解析手順を示しておく.

5. 感度の導出

5.1 目的関数の感度 目的関数の設計変数 *s_i* に対 する感度については文献⁽¹⁶⁾ に従い,以下の随伴法に よる感度の導出式を用いた.まずは,目的関数 *f* を離 散化されたつり合い方程式 *Kd* = *F*(*K*はマクロ構造の 全体剛性マトリックス)を制約条件とする等価な目的 関数 *f* に置き換える.

$$\bar{f}(s) = \boldsymbol{d}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{K}\boldsymbol{d} - \tilde{\boldsymbol{d}}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{K}\boldsymbol{d} - \boldsymbol{F})$$
(26)

ここで, *ã* は随伴ベクトルである.次に上式を設計変数*s*_iで微分して整理すると次式のようになる.

$$\frac{\partial \bar{f}}{\partial s_i} = \left(\underbrace{\boldsymbol{d}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{K}}_{\boldsymbol{F}^{\mathrm{T}}} - \tilde{\boldsymbol{d}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{K}\right) \frac{\partial \boldsymbol{d}}{\partial s_i} - \tilde{\boldsymbol{d}}^{\mathrm{T}} \frac{\partial \boldsymbol{K}}{\partial s_i} \boldsymbol{d}$$
(27)

なお,随伴ベクトル \hat{a} は任意であるため,設計変数 s_i には依存しない.またこの式で,陽的に求めることができない項は変位に関する微分項 $\partial d/\partial s_i$ である.ここで,右辺第一項の括弧内がゼロとなるように随伴ベクトル $\hat{a} \in \hat{a} = d$ とおけばその陰的微分項が消失し,式(27)を改めて整理すると式(28)のような陽的な式に帰着する.さらにこの被積分関数を明示的に表すと,式(29)のようになる.

$$\frac{\partial \bar{f}}{\partial s_i} \left(= \frac{\partial f}{\partial s_i} \right) = -d^{\mathrm{T}} \frac{\partial K}{\partial s_i} d \qquad (28)$$

$$= -\int_{\Omega} \boldsymbol{E} : \frac{\partial \mathbb{C}^{\mathsf{H}}}{\partial s_{i}} : \boldsymbol{E} \mathrm{d}\Omega \quad (29)$$

ここで、Eはマクロ境界値問題を解くことで得られる マクロひずみであり、数値材料試験で与えるマクロひ ずみ $E^{(pq)}$ とは区別していることに注意されたい.した がって、目的関数の感度は、マクロ材料剛性の微分項 $\partial \mathbb{C}^{H}/\partial s_{i}$ さえ計算できれば容易に求めることができる. 次項ではそのマクロ材料剛性の感度の導出方法につい て詳述する.

5.2 マクロ材料剛性の解析的感度の導出本項で はマクロ材料剛性の設計変数に対する感度 $\partial \mathbb{C}^{H}/\partial s_{i}$ の 導出方法について詳述する.既往の研究⁽¹⁶⁾では,感 度 $\partial \mathbb{C}^{H}/\partial s_{i} \approx e$ 解析的に求めることはやや難解であるた め, $\Delta \mathbb{C}^{H}/\Delta s_{i} \approx \partial \mathbb{C}^{H}/\partial s_{i}$ というように部分的に差分近似 を用いて数値的に妥当な感度を求める準解析的手法が 提案されている.しかし,この準解析的手法は対象と する最適化問題によっては数値計算量が膨大となるこ とが難点である.本研究では三次元問題を対象とする ことからユニットセルの有限要素の数ならびに数値材 料試験において変形を与える方向が6方向(二次元問 題では3方向)に増加するため,差分近似による方法 では計算コストが大幅に増大し実用性に欠くことを事 前の調査で確認している.そこで,本研究ではマクロ 材料剛性の感度 $\partial \mathbb{C}^{H} / \partial s_i$ を解析的に導出する方法の確 立を目指す.

まず最初に,式(17)を式(1)に基づき以下のように 展開する.

$$\mathbb{C}_{pqrs}^{H} = \Sigma_{pq}^{(rs)} = \frac{1}{|Y|} \int_{Y} \sigma_{pq} \left(\boldsymbol{\varepsilon}^{(rs)} \right) dy$$

$$= \frac{1}{|Y|} \int_{Y} \sigma \left(\boldsymbol{\varepsilon}^{(rs)} \right) : \boldsymbol{E}^{(pq)} dy$$

$$= \frac{1}{|Y|} \int_{Y} \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^{(rs)} : \left(\boldsymbol{\varepsilon}^{(pq)} - \boldsymbol{\varepsilon}^{*(pq)} \right) dy$$

$$= \frac{1}{|Y|} \int_{Y} \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^{(pq)} : \boldsymbol{\varepsilon}^{(rs)} dy \qquad (30)$$

ここで、 $\boldsymbol{\varepsilon}^*$ は擾乱ひずみで $\boldsymbol{\varepsilon}^* = \nabla_{\boldsymbol{y}}^{sym} \boldsymbol{u}^*$ で表せる.

上式一行目の被積分項は rs 成分の方向に変形を受け た状態下におけるミクロ応力テンソルσの pq 成分で あることを意味し、二行目の変換ではそのミクロ応力 テンソルの pq成分 σ_{pq} は、ミクロ応力テンソル σ と既 知のマクロひずみテンソル E^(pq) (Fig.3 参照) との内積 を計算すると結果的に等価となる自明の関係を利用し たものである.三行目の変換では、まずミクロ応力テ ンソルσを構成式で、またマクロひずみテンソルをひ ずみの関係式 $\boldsymbol{\varepsilon}^{(pq)} = \boldsymbol{E}^{(pq)} + \boldsymbol{\varepsilon}^{*(pq)}$ でそれぞれ置き換えた ものである.最終行は、ミクロ平衡方程式(10)の弱形 式である式 (37) を用いて *ε** の項を消去したものであ る.具体的には,式(37)の仮想擾乱ひずみδε*は周期 境界条件を満たす任意のひずみをとることができるた め、式 (37) において $\delta \varepsilon^* \equiv \varepsilon^*$ と置き換えても式の一般 性を失わない. そのため, 式(37)は次のように表すこ とができ、さらにわかりやすくするために第一等式で はミクロ応力テンソルを構成式で置き換え, 第二等式 では順番を並び替えて表示した.

$$\int_{Y} \boldsymbol{\varepsilon}^{*} : \boldsymbol{\sigma} \, \mathrm{d}y = \int_{Y} \boldsymbol{\varepsilon}^{*} : \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon} \, \mathrm{d}y = \int_{Y} \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon} : \boldsymbol{\varepsilon}^{*} \, \mathrm{d}y = 0 \quad (31)$$

上式を(30)の三行目に代入すると、 *ɛ*^{*(pq)}の項が消え, 式(30)の最終行が導かれることがわかる. なお,式(31) では簡単のためひずみテンソルのインデックスを省略 しているがこれについて満足することは明らかである.

次に式(30)の設計変数 s_iに関する微分をとると次式 が得られる.

$$\frac{\partial \mathbb{C}_{pqrs}^{\mathbb{H}}}{\partial s_{i}} = \frac{1}{|Y|} \int_{Y} \frac{\partial \mathbb{C}}{\partial s_{i}} : \boldsymbol{\varepsilon}^{(pq)} : \boldsymbol{\varepsilon}^{(rs)} \, \mathrm{d}y$$
$$+ \frac{1}{|Y|} \int_{Y} \mathbb{C} : \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^{(pq)}}{\partial s_{i}} : \boldsymbol{\varepsilon}^{(rs)} \, \mathrm{d}y$$
$$+ \frac{1}{|Y|} \int_{Y} \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^{(pq)} : \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^{(rs)}}{\partial s_{i}} \, \mathrm{d}y$$

$$= \frac{1}{|Y|} \int_{Y} \frac{\partial \mathbb{C}}{\partial s_{i}} : \boldsymbol{\varepsilon}^{(pq)} : \boldsymbol{\varepsilon}^{(rs)} \, \mathrm{d}y$$
$$+ \frac{1}{|Y|} \int_{Y} \mathbb{C} : \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^{*(pq)}}{\partial s_{i}} : \boldsymbol{\varepsilon}^{(rs)} \, \mathrm{d}y$$
$$+ \frac{1}{|Y|} \int_{Y} \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^{(pq)} : \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^{*(rs)}}{\partial s_{i}} \, \mathrm{d}y \qquad (32)$$

上式では所与のマクロひずみテンソル Eは設計変数 s_i に依存しないことを利用した.ここで,擾乱ひずみ ε^* を設計変数で微分した項 $\partial \varepsilon^* / \partial s_i$ については周期境界 条件を満たすことから,式(30)の誘導で行った操作と 同様に,今度は式(37)の仮想ひずみ $\delta \varepsilon^*$ を $\partial \varepsilon^* / \partial s_i$ で置 き換え,それを式(32)に代入すると式(32)の第二,第 三項が消え,その結果以下の式に帰着する.

$$\frac{\partial \mathbb{C}_{pqrs}^{H}}{\partial s_{i}} = \frac{1}{|Y|} \int_{Y} \frac{\partial \mathbb{C}}{\partial s_{i}} : \boldsymbol{\varepsilon}^{(pq)} : \boldsymbol{\varepsilon}^{(rs)} \, \mathrm{d}y$$
(33)

この式が本研究で提案するマクロ材料剛性テンソルの 解析的感度である.最後に,プログラムへの実装を考 慮して上式を行列表記で書き下す.ここでは,式(22) および式(40)の関係を用いて以下のように書くことで きる.

$$\frac{\partial \mathbb{C}_{\alpha\beta}^{\mathrm{H}}}{\partial s_{i}} = \frac{1}{|Y|} \int_{Y} \hat{w}_{\alpha}^{\mathrm{e}^{\mathrm{T}}} \boldsymbol{B}^{\mathrm{T}} \frac{\partial \mathbb{C}}{\partial s_{i}} \boldsymbol{B} \hat{w}_{\beta}^{\mathrm{e}} \,\mathrm{d}y \qquad (34)$$

with
$$\frac{\partial \mathbb{C}}{\partial s_i} = \eta s_i^{\eta - 1} (\mathbb{C}_2 - \mathbb{C}_1)$$
 (35)

ここで、ŵ はユニットセルの要素節点変位ベクトルを 指し、数値材料試験を行った結果得られるものである (付録参照).なお、ŵ の下添字 $\alpha,\beta(\alpha,\beta=1,...,6)$ はそ れぞれを方向成分(11),(22),(33),(12),(23),(31)に該当 する.よって、 $\partial \mathbb{C}^{H}_{\alpha\beta}/\partial s_i$ の各成分の値を算出するために は、数値材料試験を行う過程で、所与の6方向のひず みを個別に与え、その結果計算される要素節点変位ベ クトル $\hat{w}_1, \hat{w}_2, ..., \hat{w}_6$ (もしくは縮約された節点変位ベク トルを順に掛け合わせることで容易に計算できること になる.

5.3 マクロ材料剛性の解析的感度の精度検証本 項では,前項で提案したマクロ材料剛性の設計変数に 対する解析的感度 ∂C^H/∂s_iの精度検証を行う.検証にあ たっては,既往の研究⁽¹⁶⁾で用いられた有限差分近似 による感度導出法と比較する.

検証に用いるユニットセルの形状は立方体で,一辺の長さを正規化して単位長さとした.また,用いた有限要素は8節点六面体要素で要素数は64 (4×4×4)とした.二種類の構成材料の材料定数を**表1**に与える.また,式(22)で示したべき乗数 η は η =5を採用した.最適化前の初期状態ではいずれの有限要素にもphase-1とphase-2がそれぞれ50% ずつ含まれるものとしたため,設計変数の初期値はすべての要素で s_i =0.5 であ

Table 1 Material data

	Young's moduls (N/mm ²)	Poisson's ratio
phase-1	10	0.3
phase-2	10000	0.3

る.以上の条件下で計算された感度の精度検証結果として全36成分を表2に記した.両者の感度の誤差については,次式を用いて計算した.

$$\operatorname{Errors}(\%) = \frac{|\partial \mathbb{C}^{\mathrm{H}} / \partial s_{i} - \Delta \mathbb{C}^{\mathrm{H}} / \Delta s_{i}|}{|\Delta \mathbb{C}^{\mathrm{H}} / \Delta s_{i}|} \times 100$$
(36)

なお,有限差分近似の差分量は, $\Delta s_i = 1.0 \times 10^{-7}$ として 設定した.ここで,**表2**において,有限差分近似と解 析的感度の誤差をみると概ね0.1%程度であり,提案し た解析的感度の導出法の確からしさが確認できた.な お,誤差を計算していない成分については,行列の中 で理論的にゼロとなるべき成分である.これらは,数 値解析上避けられない数値エラーとして生じたもので あるが,いずれも極めてゼロに近い感度となっており, 妥当な計算結果であるといえる.

また、本検証例ではどの要素にも同じ設計変数値を 与えているため、材料はユニットセル内において一様 に分布している.そのため、そのマクロ材料剛性 C^Hは 等方性の条件を満たす必要がある.しかし、詳しくみ ると、有限差分近似については、例えば(1,1),(2,2),(3, 3)成分の値に僅かではあるが差異が生じており、等方 性の材料剛性を厳密に表現できているとはいえない. この差異は、有限差分近似に伴う避けることのできな い数値誤差である.一方、解析的感度について言えば、 例えば(1,1),(2,2),(3,3)成分や(4,4),(5,5),(6,6)成分の 値が完全に一致しており、等方性の条件を完璧に満た しているといえる.なお、本論文では省略したが、要 素ごとに異なる設計変数を与えた場合についても感度 の検証を実施しており、その場合も同様の結果が得ら れている.

以上より,提案した解析的感度は正しく導出されて おり,またその精度の高さも確認できたといえる.な お,特筆すべきことは解析的感度を導入したことによ る計算コストの大幅な削減である.有限差分近似では, ひとつの設計変数 s_i に対する感度 $\Delta \mathbb{C}^H / \Delta s_i$ を計算する のに,6回(6方向成分)の数値材料試験を実施するこ とになり,これを全設計変数の数(=ユニットセル内の 有限要素数),つまり n_{ele} 回分行うので,合計で有限要 素数×6回もの数値材料試験を実施する必要がある.一 方,提案した解析的感度法では,(感度解析を開始する 前の)マクロ材料剛性 \mathbb{C}^H を求める際に実施する6回の 数値材料試験において,それぞれの節点変位ベクトル \hat{v} を保存しておけば感度解析用として新たに数値材料 試験を行う必要はなく,これが感度解析にかかる計算 コストの大幅な削減を可能にしたといえる.

Table 2Accuracy of sensitivities of the proposed analytical approach

	Finite difference approach	Analytical approach (proposed)	Errors(%)
(α,β)	$\Delta \mathbb{C}^{\mathrm{H}} / \Delta s_i$	$\partial \mathbb{C}^{\mathrm{H}} / \partial s_i$	
(1,1)	65.73017723	65.6644381	0.100013612
(2,1)	28.17007096	28.14190204	0.099995902
(3,1)	28.17007068	28.14190204	0.099994894
(4,1)	-1.33E-07	-6.63E-16	-
(5,1)	-9.77E-08	1.50E-16	-
(6,1)	4.44E-08	6.03E-16	-
(1,2)	28.17007068	28.14190204	0.099994894
(2,2)	65.73017609	65.6644381	0.100011885
(3,2)	28.17007068	28.14190204	0.099994894
(4,2)	-9.77E-08	-7.50E-16	-
(5,2)	-1.69E-07	1.67E-16	-
(6,2)	-8.88E-09	3.26E-16	-
(1,3)	28.17007039	28.14190204	0.099993886
(2,3)	28.17007011	28.14190204	0.099992878
(3,3)	65.73017438	65.6644381	0.100009293
(4,3)	-2.22E-08	-2.47E-16	-
(5,3)	-1.33E-08	2.81E-16	-
(6,3)	-1.15E-07	5.33E-16	-
(1,4)	-8.44E-08	-6.63E-16	-
(2,4)	5.33E-07	-7.50E-16	-
(3,4)	5.28E-09	-2.47E-16	-
(4,4)	18.78005001	18.76126803	0.100010265
(5,4)	-1.49E-07	8.14E-17	-
(6,4)	-1.21E-08	1.13E-16	-
(1,5)	1.24E-07	1.50E-16	-
(2,5)	-4.24E-07	1.67E-16	-
(3,5)	1.42E-07	2.81E-16	-
(4,5)	-1.78E-08	8.14E-17	-
(5,5)	18.78005001	18.76126803	0.100010265
(6,5)	-8.22E-08	-1.91E-16	-
(1,6)	1.47E-07	6.03E-16	-
(2,6)	-3.37E-08	3.26E-16	-
(3,6)	1.27E-06	5.33E-16	-
(4,6)	-7.11E-08	1.13E-16	-
(5,6)	-1.38E-08	-1.91E-16	-
(6,6)	18.78004972	18.76126803	0.100008753

6. 最適化計算例による本手法の妥当性 の検証

6.1 解析条件

本節では、三次元のミクロ構造トポロジー最適化手 法による計算例を紹介し、その結果から本手法が「マ クロ構造の力学的挙動」を適切に評価した最適なミク ロ構造トポロジーが得られるかを検証する.本計算例 ではそのモデルの違いから計算例を二つに大別して紹 介する.一つ目は、マクロ構造を8節点六面体一要素 で構成した場合の計算例である.ここでは、マクロ構 造に複雑な構造モデルを採用すると得られた最適化結 果の評価が困難となるため、敢えて八節点六面体一要 素で構成された単純なマクロ構造モデルを採用し、そ の評価をしやすくした.二つ目は、より現実的な例と してマクロ構造の要素数を増やした場合の最適化計算 例である.ここでは、一端が完全固定された直方体構 造に三種類の異なる荷重を作用させた場合に得られた 結果について考察する.



Fig. 6 Case–I: conceptual diagrams of uniform shear deformation in the direction of x_1x_2 of macro-structure (upper) and the optimized topology of micro-structure shown by unit cell and its patch (lower)

計算に用いたユニットセルの形状は立方体とし、一 辺の長さは正規化して単位長さとした。有限要素は8 節点六面体要素で,1000(10×10×10)要素でユニット セルを構成している.また、ミクロ構造における材料 は二種類(二層複合材料)とし、空隙は存在しないも のと仮定した. phase-2(黒)の材料剛性は phase-1(白) のそれよりも大きいものとして設定し、その材料定数 を表1に記す.式(22)で示したべき乗数ηについては, 最適化計算の収束速度を早めるためにやや大きい値の $\eta = 5$ を採用した.なお、「空隙とひとつの固体材料か らなる多孔質材料」の線形弾性モデルに限って言えば, 三次元モデルでポアソン比1/3のときη≥3を採用す れば簡便的ではあるものの物理的に許容できることが 文献⁽²⁷⁾で示されており、一般にはη=3が広く用いら れている.しかし、「空隙のない複数の固体からなる複 合材料」に関しては, 異種材料間の界面における複雑 な挙動を考慮する必要があり, 著者らの知見では上記 のような簡便法で材料の物理的な意味を保証しうるべ き乗数を決定することは不可能であると考える。その

Fig. 8 History of load-displacement diagram (case-I)

ため、本研究では文献⁽²⁷⁾によるべき乗数の設定方法 を参考としつつも、最適化計算の収束速度を早めるこ とに重点を置くこととした。もちろん、初期値依存性 の問題があるため、これによって最適解が若干異なる が、 η =3および4を用いた場合と比較しても結果にほ とんど影響がないことを事前に確認している.

最適化前の初期状態では、ユニットセル全体に phase-1 と phase-2 がそれぞれ 50% ずつ含まれるものとした. ただし、要素毎に与える設計変数の初期値に限っては、 $s_i = 0.5$ を平均値としつつ、僅かな偏差(±0.001)をランダムに発生させて要素毎の初期値に差異を与えた. これは、全要素に同じ値の設計変数を与えるとユニットセルは完全な一様変形となり、どの設計変数に対しても同じ感度が得られる(感度の差が生じない)状態に陥り、結果的に最適化計算が実行できなくなる状態を回避するためである.

なお,前述のとおりユニットセルに含まれる材料の 総体積は最適化計算中も変化しないように設定してい る.以下の計算例では,いずれも同じユニットセルを 用いて最適化を行った.

また、本研究では最適化計算後のトポロジーがいわ ゆるチェッカーボード材料配置へ停留することを避け るためにメッシュ非依存型フィルタリング法^(25,26)を採

Fig. 9 Case–II: conceptual diagrams of uniform shear deformation in the direction of x_1x_2 and x_1x_3 of macrostructure (upper) and the optimized topology of microstructure shown by unit cell and its patch (lower)

用した.なお,この検証にあたってはいずれの最適化例 も「一意に最適解が求まらない問題」であることに注 意されたい.ここで,「一意に最適解が求まらない」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⁽¹⁷⁾.

また、このトポロジー最適化手法については設計変 数に対する初期値依存性があるため、異なる偏差量を 与えた場合には当然ながら異なるトポロジーが得られ る.しかし、著者らの経験では、偏差量が±0.001程度 の小さなものであれば大抵はフィルターによって同様の トポロジーへ帰着することを確認している.一方、あ る程度大きい偏差量を用いた場合は異なるトポロジー が得られることもあるが、上述のとおりそもそも一意 に最適解が求まらない問題であるため、得られた結果 も最適解のひとつであるといえる.

6.2 1要素の単純なマクロ構造の場合

ここでは、一辺100mmの八節点六面体一要素でモデ ル化したマクロ構造に単純せん断変形を与えた場合の 最適化計算例を示し、本手法の妥当性を検証する.マ

Fig. 10 History of objective value (case-II)

Fig. 11 History of load-displacement diagram (case-II)

クロ構造は, x₁x₂方向に単純せん断変形を与えた場合 (case-I:Fig.6上)と x₁x₂方向と x₁x₃方向の斜め方向に単 純せん断変形を与えた場合(case-II:Fig.9上)の二つを用 意した.

Fig.6(上)のモデルを用いて解析を行った結果, Fig.6 (下)のような二つの材料がy3方向に分離したミクロ 構造のトポロジーが得られた.得られたトポロジーは, せん断応力のみならず,y1方向の拘束によって生じる y1方向(水平)軸力に対しても同時に抵抗するような トポロジーであり,力学的に理にかなうミクロ構造が 得られたことを示すものである.また,加藤ら⁽¹⁷⁾が同 様の単純せん断変形問題を二次元で実施しているが, そこでは phase-2の材料がせん断変形に抵抗するよう に斜め45°に配置された最適化トポロジーが得られて いる.これらを吟味すると,いくつかの変形モードに 対して同時に抵抗するような合理的なトポロジーは, 三次元問題とすることではじめて得られる最適化構造 であるといえる.

また、この最適化計算による目的関数値の変化と荷 重-変位曲線の変化をそれぞれ Fig.7,8 に示した.これ らより、本最適化計算によって目的関数値(コンプラ イアンス)が初期構造から約94%減少し、剛性が著し く増加していることが確認できた.

Fig. 12 Macro-structure models

次にFig.9(上)のマクロ構造モデルを用いた場合に 得られた最適化トポロジーをFig.9(下)に示す.得ら れた結果をみると,Fig.6で得られたトポロジーを斜め 45°方向に傾けたトポロジーとなっており,本モデルの せん断変形の方向に合致する期待通りのものが得られ たといえる.また,Fig.10の目的関数値の変化および Fig.11に示す荷重-変位曲線の変化から,目的関数値が 著しく減少し,剛性が高まっている様子がわかる.

以上の計算例より、本手法は単純なマクロ構造の挙 動に対して力学上合理的なトポロジーを決定できるも のであることが確認できた.

6.3 一端固定されたマクロ構造の場合 本計算例 では、Fig.12に示す一端固定されたマクロ構造に三種類 の異なる等分布荷重を与えた場合に得られる最適化ミ クロ構造を比較しながら、本手法の妥当性を検証する. マクロ構造の寸法は、構造長 200mm、構造高 100mm、 構造幅 100mm とした.荷重の分布については、case1 で は 400kN/m² の等分布荷重を上面に作用させ、case2 で は 400kN/m² の等分布荷重を上面と片側側面に作用さ せている. case3 は、case2 の側面の等分布荷重の大き さを四分の一の 100kN/m² に縮小したものである.ユ ニットセルはどのマクロ構造モデルにおいても前節と 同様の立方体モデルを用いた.

case1の最適化されたミクロ構造とマクロ構造の応力 図をそれぞれ Fig.13(上)と Fig.14 に示す.また,目的関

Fig. 13 Optimized topologies of micro-structure (unit cell and its patch)

Fig. 14 Stress distribution of macro-structure (case1)

Fig. 15 History of objective value (case1)

Fig. 16 History of load-displacement diagram (case1)

数値の変化と荷重-変位曲線の変化をそれぞれ Fig.15, Fig.16 に示す. Fig.14 から,曲げ変形によって構造付け 根の上下端部のΣ11 が卓越し、また、応力値は比較的 小さいもののΣ12 が広い範囲で作用していることがわ かる. 最適化されたミクロ構造をみると, 前節で単純 せん断変形を与えたときとほぼ同様のトポロジーが得 られたが,ここでは,曲げによる x1 方向の軸力と x1 x2 方向のせん断力の両方に抵抗できるトポロジーが得ら れた.また、目的関数値であるコンプライアンスが約 93% 減少し, 剛性が著しく増加している様子が, Fig.15, Fig.16から確認できる.しかし、この場合 Fig.9のよう な明確な板状のトポロジーとは若干異なるものが得ら れた.この理由として、このマクロ構造の変形が一様 変形のような単純な変形ではないこと,三次元構造と したことで二次元問題に比べ設計自由度が増し,得ら れる最適化トポロジーも多様になったこと, また, フィ ルター半径の設定の影響などが考えられる.フィルター 半径の設定を緻密にうまく行えば、より整然としたト ポロジーが得られるがそれはトライアルアンドエラー の作業となるためここでは、一般的なフィルター設定 で計算した結果を示してる. これについては, case2と case3 についても同様である.

次に case2 の最適化されたミクロ構造とマクロ構造

Fig. 17 Stress distribution of macro-structure (case2)

の応力図をそれぞれ Fig.13 (中) と Fig.17 に示す. なお, 最適化による目的関数値の変化と荷重–変位曲線の変 化については,次の case3 も含めて case1 のそれと同様 の変化が得られており,ここでは誌面のスペースの関 係上,それらについては省略した.この場合, case1 と 同様に Σ_{11} が卓越したことで y_1 方向に連続するトポロ ジーが得られ,また,同じ大きさの荷重を受ける二軸 作用によって y_2 方向と y_3 方向にほぼ同じ厚みを有する L字型の phase-2 層が見られる.この結果は,マクロ構 造の応力分布を反映した合理的なミクロ構造であると いえる.

最後に case3 の最適化されたミクロ構造トポロジーお よびマクロ構造の応力図をそれぞれ Fig.13(下), Fig.18 に示す.この場合, x2 方向の鉛直荷重が x3 方向の側方 荷重よりも大きいことにより,Σ₁₁応力の分布が固定 端において x3 方向幅に広がっていることがわかる。そ の結果, case3 で得られた最適化されたトポロジーと case2のそれを比べてみると、鉛直方向に板状に分布す る phase-2 層の厚み (y₃ 方向幅) が大きくなり, 水平方 向にあった板状の層の厚み(v,方向幅)が減少したほ か、vi方向に不連続な棒状の材料分布となった.した がって,この結果はマクロ構造の荷重の変化を適切に 反映したミクロ構造トポロジーであるといえる.これ らの計算例より、本最適化手法はマクロ構造の力学的 挙動を忠実に反映した上で, ミクロ構造トポロジーを 最適化できるものであることが三次元構造モデルを用 いて確認された。

Fig. 18 Stress distribution of macro-structure (case3)

7. 結論

本論文では,複合材料のマクロ構造の剛性を最大に するためのマルチスケールトポロジー最適化法を三次 元構造問題に適用し,いくつかの最適化計算例を用い てその適用可能性を検証した.この目的のために解析 的な感度の導出方法を提案することで,感度の精度を 高めるとともに計算コストを大幅に減少させることが できた.特に,分離型マルチスケール解析手法をトポ ロジー最適化に導入するという新しい枠組みでマクロ 構造の剛性最大化を意図した最適化手法を提案し,数 値計算例を用いて本手法の三次元構造問題への適用性 とその妥当性が検証された.

以下に本研究の主な成果を示す.

- 提案した手法は、マクロ構造の力学的挙動を忠実 に反映し、そのミクロ構造のトポロジーを最適 化できる手法であることがいずれの最適化計算 例でも検証された。
- 提案した解析的感度については、感度の精度が高く、また感度解析における計算コストを大幅に減少させるものであることが確認された。
- 分離型マルチスケール解析法はミクローマクロ境 界値問題を同時に解く一体型のマルチスケール 解析法に比べて,理論体系が明快で計算コスト も低く抑えることができるため,材料非線形問 題などの複雑なモデルに対して効果的な手法で

ある.よって,分離型マルチスケール解析の本来 の効果を考慮すると,本研究で提案した線形弾 性体を対象とした手法を非線形構造問題へ拡張 することが期待される.

付録:外部節点を導入したユニットセル の有限要素解析

ここでは、外部節点を導入した場合のミクロ境界値 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分割する.ミクロ境界値問題 (10)の第一式と反対称性の式(8)を考慮すると、ミクロ 構造の仮想仕事式は以下のように定式化できる.

$$\int_{Y} \delta \boldsymbol{\varepsilon}^* : \boldsymbol{\sigma} \, \mathrm{d} y = \int_{Y} \nabla_{y}^{\mathrm{sym}} \delta \boldsymbol{u}^* : \boldsymbol{\sigma} \, \mathrm{d} y = 0$$
(37)

ここで、 $\delta u^* \ge \delta \varepsilon^*$ 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 (37)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.

$$\boldsymbol{w} = \sum_{\alpha=1}^{n_{\text{node}}} N_{\alpha} \hat{\boldsymbol{w}}_{\alpha}^{\text{e}} \quad \text{or} \quad \boldsymbol{w} = \boldsymbol{N} \hat{\boldsymbol{w}}^{\text{e}}$$
(38)

$$\delta w = \sum_{\alpha=1}^{n_{\text{node}}} N_{\alpha} \delta \hat{w}_{\alpha}^{\text{e}} \quad \text{or} \quad \delta w = N \delta \hat{w}^{\text{e}}$$
(39)

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \sum_{\alpha=1}^{n_{\text{node}}} B_{\alpha} \hat{w}_{\alpha}^{\text{e}} \quad \text{or} \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{B} \hat{\boldsymbol{w}}^{\text{e}}$$
(40)

$$\delta \boldsymbol{\varepsilon} = \sum_{\alpha=1}^{n_{\text{node}}} B_{\alpha} \delta \hat{w}_{\alpha}^{\text{e}} \quad \text{or} \quad \delta \boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{B} \hat{\boldsymbol{w}}^{\text{e}}$$
(41)

ここで、*N*は形状関数、*B*はいわゆるBマトリックス、 \hat{w}^{e} はユニットセル中の一要素のミクロ節点変位ベク トルを指す.これと同様にして $\delta u^{*} \ge \delta \varepsilon^{*}$ はそれぞれ $\delta u^{*} = N(\delta \hat{d}^{*e}) \ge \delta \varepsilon^{*} = B(\delta \hat{d}^{*e})$ のように離散化できる. これらの式より、仮想仕事式(37)を離散化した式は以 下のようになる.

$$\sum_{e=1}^{n_{ele}} \left(\delta \hat{\boldsymbol{d}}^{*e} \right)^{\mathrm{T}} \int_{Y_e} \boldsymbol{B}^{\mathrm{T}} \mathbb{C} \boldsymbol{B} \mathrm{dy} \left(\hat{\boldsymbol{w}}^{e} \right) = 0$$
(42)

仮想擾乱変位 *δ â*^{*e} は任意であることから,(37)の離散 化方程式は式(42)をアセンブルすることで以下のよう に表せる.

$$\boldsymbol{K}^{\mathrm{m}}\hat{\boldsymbol{w}} = \boldsymbol{0}$$
 with $\boldsymbol{K}^{\mathrm{m}} = \sum_{\mathrm{e=1}}^{n_{\mathrm{ele}}} \int_{Y_{\mathrm{e}}} \boldsymbol{B}^{\mathrm{T}} \mathbb{C} \boldsymbol{B} \mathrm{dy}$ (43)

ここで, K^m はユニットセルにおける全体剛性マトリッ クスで, ŵは全体のミクロ節点変位ベクトルを示す.現 段階では,式(43)は周期境界条件式(12),(13)を含んで おらず,前述のミクロ境界値問題を解くためには,こ れらの周期境界条件を式(43)へ挿入し,ŵの周期境界 上で一致する節点の自由度をqで置き換える必要があ

Fig. 19 Pair of constrained points and relative displacement vector

る. この目的のため, 三自由度を持つ外部節点をユニットセル領域の外部に三つ設け, 式(43)を三つの外部節点の計九つの自由度を含む離散化方程式に拡張する. ここで, この方程式を解くために次に述べる外部節点の特別な扱いを行う.まず初めに, マクロひずみ Eのすべての成分が既知データとして与えられると仮定する.式(13)を用いると, 三つの外部節点における相対変位ベクトル q^[k]の値が定まる. q^[k]のすべての成分が求まることで,式(12)から周期境界上で一致する節点の拘束式が得られ,拡張した離散方程式を解くことができる. この解法で,まず初めに以下のような変換行列 Φを導入する.

$$\tilde{w} = \Phi \hat{w} \tag{44}$$

① は $\hat{w} \in \tilde{w}$ に変換する作用素であり、 \tilde{w} は、 \hat{w} の一部 の成分を $q^{[k]}$ の成分で置き換えたミクロ節点変位ベク トルである。例えば、 $q^{[1]}$ についてのみ考えるとき、対 となる境界面 $\partial Y^{[-1]} \ge \partial Y^{[1]}$ 上で一致する節点をそれぞ れ (w_a, w_b, w_c)、(w_d, w_f, w_g)とすると、これらの点は周期 境界条件によって拘束される (Fig.19 参照).よって、以 下のように \hat{w} から \tilde{w} を得ることができる。

$$\hat{\boldsymbol{w}} = \left\{ w_1 \ w_2, ..., w_a \ w_b \ w_c, ..., w_d \ w_e \ w_f, ..., w_N \right\}$$

and

$$\tilde{\boldsymbol{w}} = \left\{ w_1 \ w_2, ..., w_a \ w_b \ w_c, ..., q_1^{[1]} \ q_2^{[1]} \ q_3^{[1]}, ..., w_N \right\}$$

with

$$w_d - w_a = q_1^{[1]}, \quad w_e - w_b = q_2^{[1]} \text{ and } \quad w_f - w_c = q_3^{[1]}$$
 (45)

ここで、Nは外部節点を除くユニットセル全ての自由度 数を指す.また、Fig.19より $q^{[k]}(k = 1, 2, 3)$ は境界 $\partial Y^{[-k]}$ と $\partial Y^{[k]}$ 上で拘束される全ての節点を制御することがわ かる.したがって、上記の例では境界 $\partial Y^{[-1]}$ と $\partial Y^{[1]}$ 上 の一節点の拘束しか考慮していないが、周期境界上の 他の節点についても同様に拘束条件を課し、 \hat{v} の自由 度を $q_i^{[k]}$ に置き換えていくことで最終的に \hat{v} が求まる.

次に,式(43)に式(44)を挿入し,両辺に左からΦを 乗ずることで以下の式を得る.

$$\tilde{K}^{\mathrm{m}}\tilde{w} = \mathbf{0} \quad \text{with} \quad \tilde{K}^{\mathrm{m}} = \mathbf{\Phi}K^{\mathrm{m}}\mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}$$
(46)

この線形方程式は \tilde{v} の中の $q^{[k]}$ の配置に依存して縮約 することができ、これを解くことで \tilde{v} の未知成分が定 まる.また、上記のミクロの有限要素解析を行うこと で、ミクロ節点変位ベクトル \tilde{v} だけでなく、ミクロひ ずみ ε やミクロ応力 σ も求まるため、 $\partial Y^{[k]}$ 上の表面力 ベクトル $t^{[k]}$ がCauchyの式 $t^{[k]} = \sigma e_k$ より得られ、式(15) から反力 $R^{[k]}$ が求まる.さらに、マクロ応力 Σ_{ik} は、式 (1)に示す数値積分を行わずとも、式(16)を用いること で反力から算出できる.したがって、マクロ材料剛性 \mathbb{C}^{H} が式(17)で示すように6方向のマクロひずみに対 するマクロ応力 Σ_{ik} を個別に計算することで得られる ことがわかる.

参考文献

- 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. and 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. and 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. and Bendsoe, M.P., "Hierarchical optimization of material and structure", *Struct. Multidisc. Optim.*, Vol. 24, No. 1, 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. and 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, No. 1-2, 1998, pp. 181–192.
- (7) Wieckowski, Z., "Dual finite element methods in homogenization for elastic-plastic fibrous composite material", *Int. J. Plast.*, Vol. 16, No. 2, 2000, pp. 199–221.
- (8) Zheng, S.F., Ding, K., Denda, M. and 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. Engrg.*, Vol. 183, 2000, pp. 141–155.
- (9) Feyel, F. and Chaboche, J.-L., "FE² multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fibre SiC/Ti composite materials", *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, Vol. 183, No. 3-4, 2000, pp. 309–330.

- (10) Terada, K. and Kikuchi, N., "A class of general algorithms for multi-scale analyses of heterogeneous media", *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, Vol. 190, No. 40-41, 2001, pp. 5427–5464.
- (11) 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.*, Vol. 261–262, 2013, pp. 167– 176.
- (12) 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.
- (13) Michaleris, P., Tortorelli, D.A., Vidal, C.A., "Tangent operators and design sensitivity formulations for transient nonlinear coupled problems with applications to elastoplasticity", *Int. J. Numer. Methods Engrg.*, Vol. 37, No. 14, 1994, pp. 2471–2499.
- (14) Okada, J., Washio, T., Hisada, T., "Study of efficient homogenization algorithms for nonlinear problems", *Comput. Mech.*, 0178-7675, Vol. 46, No. 2, 2010, pp. 247–258.
- (15) Simo, J.C., Taylor, R.L., "Consistent tangent operators for rate-independent elastoplasticity", *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 0045-7825, Vol. 48, No. 1, 1985, pp. 101–118.
- (16) Kato, J., Terada, K. and Kyoya, T., "Topology optimization of micro-structure for composites applying a decoupling multi-scale analysis", *Struct. Multidisc. Optim.*, submitted, 2013.
- (17) 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ミクロ構造トポロジー最適化", 土木学会論文集 A2(応用力学), Vol. 68, No. 2, 2012, pp. 279–287.
- (18) 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.
- (19) 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.*, DOI 10.1007/s00466-013-0872-5, 2013.
- (20) 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.
- (21) 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.

- (22) Kato, J., Lipka, A. and Ramm, E., "Multiphase material optimization for fiber reinforced composites with strain softening", *Struct. Multidisc. Optim.*, Vol. 39, 2009, pp. 63–81.
- (23)加藤準治,寺田賢二郎,京谷孝史,"繊維複合材料のひずみ軟化を考慮した多層材料最適化手法の提案",土木学会論文集A2(応用力学), Vol. 67, No. 1, 2011, pp. 39–53.
- (24) Zhou, M. and 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.
- (25) Bendsøe, M.P., Sigmund, O., "Topology optimization, theory, method and applications", *Springer-Verlag*.
- (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, 1998, pp. 68–75.
- (27) Bendsøe, M.P., Sigmund, O., "Material interpolation schemes in topology optimization", Arch. Appl. Mech., Vol. 69, 1999, pp. 635–654.