土木学会論文集 A2(応用力学), Vol. 68, No. 2 (応用力学論文集 Vol. 15), I_279-I_287, 2012.

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

Topology optimization of microstructure for composites considering macroscopic structural response

加藤 準治* ・寺田 賢二郎** ・京谷 孝史***
Junji KATO, Kenjiro TERADA and Takashi KYOYA

*正会員 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）
**正会員 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）
***正会員 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）

The present study proposes topology optimization of a microstructure for composites considering the macroscopic structural response applying a decoupling multiscale analysis based on a homogenization approach. 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 a semi–analytical sensitivity approach is introduced. It was verified from a series of numerical examples that the proposed method has great possibility for microscopic advanced material designs.

Key Words : *topology optimization, decoupling multiscale analysis, microstructures, homogenization*

1. はじめに

複合材料の力学的挙動は，材料のミクロ領域における幾何学的特性，例えば材料配置や形状，寸法に強く依存し，材料の破壊に至るような非線形領域においてはこの依存性は顕著になることが知られている．例えば，金属材料においては材料強度の改善や靭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探究が行われ，また，複合ゴムに至ってはエネルギー吸収性能や耐摩耗性を改善するミクロ組成の研究開発が行われる等，材料の非線形挙動とミクロ構造の間には常に密接な関係があることが伺える．つまり，これらの複合材料に共通することは，混入する材料の種類の選択はもとより，ミクロ構造の幾何学的特性を最適化することができれば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ことが可能になることである．

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ための手法を提案する．

トポロジー最適化は，これまで主にマクロ構造のトポロジーを対象として研究開発が行われてきた．一方，ミクロ構造のトポロジー最適化に関する研究について述べると，例えば，Simgund[2]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 $\mathbb{C}^{\mathrm{H}}$ 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[3]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や Larsen ら[7]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，ミクロの境界値問題のみで構成される支配法式を解き，マクロ構造の挙動については考慮していない．一方，Rodrigues ら[8]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 1 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，実際の製作可能性の観点から言えば非現実的な問題設定と考えられる．

そこで本研究では，製作可能な範囲として，「マクロ構造のトポロジーは初期の状態から変化させず，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（1 つ）を決定する」という問題設定を行う．マクロ構造のトポロジーを変化させない理由は，例えば複合ゴム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ほぼ固定されてしまう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手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[9)10)11)12)13)]．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ミクロ–マクロの 2 変数境界値問題を相互にやり取りしながら同時に解くもので，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殆どない．

このような背景から寺田ら[14)]は，ミクロ–マクロ 2 変数境界値問題を分離して解く，「分離型マルチスケール解析法」と呼ばれる新しい手法を提案している．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 2 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．

本研究では，この分離型マルチスケール解析手法の有効性と汎用性を鑑み，これを用いたミクロ構造のトポロジー最適化を提案する．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，ここでは単純に線形弾性体を用いた 2 次元平面問題を想定し，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．

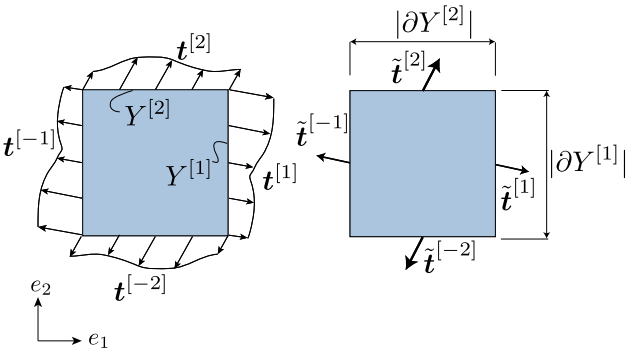
以下では，最初に分離型マルチスケール解析法の概要を述べ，次に本研究で使用した材料モデルと最適化問題の定式化について記述する．最適化アルゴリズムについては，数値解析上有効である勾配法を基本として，最適性規準法[15]（optimality criteria method: 以下，OC 法と略す）を用いた．ここでは，その感度の導出法として，随伴法を基本とした準解析法（semi-analytial method）を採用し，その定式化について説明する．最後に，いくつかの数値解析例を用いて本研究で提案する最適化手法の妥当性を検証する．

2. 均質化に基づく分離型マルチスケール解析手法

2.1 概要

分離型マルチスケール解析手法[14]は，ミクロ–マクロ 2 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 2 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 $\boldsymbol{\sigma}$ からマクロ応力 $\boldsymbol{\Sigma}$ を計算し，それをマクロ材料剛性 $\mathbb{C}^{\mathrm{H}}$ 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こととなる．

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 $\boldsymbol{E}$ 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 $\boldsymbol{\chi}$ 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 $\mathbb{C}^{\mathrm{H}}$ を求めるが，本手法では特性変位は存在せず，またその所与のひずみと擾乱変位との間に課された余計な仮定も不要で，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[14]を参考にされたい．



図–1 ユニットセルおよびミクロとマクロの表面力ベクトル

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．ここで力学的に等価とは，マクロ構造内の任意の点 $\boldsymbol{x}$ におけるマクロ応力 $\boldsymbol{\Sigma}$ 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 $\boldsymbol{\sigma}$ の体積平均で求められることに対応する．

$$\boldsymbol{\Sigma} = \frac{1}{|Y|}\int_{Y} \boldsymbol{\sigma}\mathrm{d}y = \langle\boldsymbol{\sigma}\rangle \tag{1}$$

ここで，Y は周期的なミクロ構造領域を意味し，$\boldsymbol{y}$ 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 $\boldsymbol{E}$ とミクロひずみ $\boldsymbol{\varepsilon}$ も次のような関係にある．

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

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

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

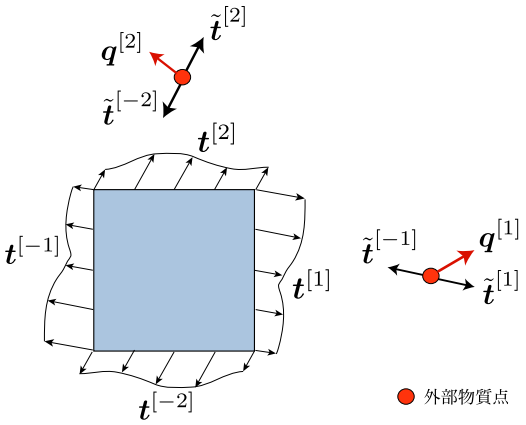
また，ミクロ変位場 $\boldsymbol{w}$ は次式のようにマクロひずみに比例して線形分布する項 $\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{y}$（線形変位場）と非均質性に起因して生ずる線形分布からのずれを表す項 $\boldsymbol{u}^*$ に分解できるものとする．

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

ただし，この擾乱変位 $\boldsymbol{u}^*$ 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．

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

ここで，**図–1** に示すようにユニットセルが直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 $\partial Y^{[k]}$ は $Y^{[k]}$ 線（すなわち正規直交基底ベクトル e_k が法線ベクトルとなる境界線）に平行な部分的な境界領域であ



図–2 相対変位ベクトルを自由度に持たせた外部物質点とマクロの表面力ベクトルの概念図

る．この擾乱変位の周期性より，実変位についても次式のような拘束条件が得られ，言い換えれば，次式は対なる周期境界辺間の相対変位に関する拘束条件式である．

$$\boldsymbol{w}^{[k]} - \boldsymbol{w}^{[-k]} = \boldsymbol{L}^{[k]}\boldsymbol{E} \tag{6}$$

ここで，簡単のため $\boldsymbol{w}^{[k]} := \boldsymbol{w}|_{\partial Y^{[k]}}$ とおいた．また，$\boldsymbol{L}^{[k]}$ 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線上の物質点を結合するための境界辺ベクトルと言われるもので，以下のように定義される．

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

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 $\boldsymbol{n}$ を有する境界線上のミクロ表面応力ベクトル $\boldsymbol{t}^{[\boldsymbol{n}]} = \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ はユニットセルの対となる境界線において反対称性が課せられる．

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

ここで，簡単のため $\boldsymbol{t}^{[\pm k]} := \boldsymbol{t}^{[\pm e_k]}$ とおいた．この周期境界上のミクロ表面応力ベクトル $\boldsymbol{t}$ 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力ベクトル $\tilde{\boldsymbol{t}}$ とすることができる（**図–1** 参照）．

$$\begin{aligned}\tilde{\boldsymbol{t}}^{[k]} &= \boldsymbol{\Sigma}\cdot e_k \\ &= \frac{1}{|\partial Y^{[k]}|}\int_{\partial Y^{[k]}} \boldsymbol{\sigma}\cdot e_k \mathrm{d}y = \frac{1}{|\partial Y^{[k]}|}\int_{\partial Y^{[k]}} \boldsymbol{t}^{[k]}\mathrm{d}y\end{aligned} \tag{9}$$

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．

(ミクロ境界値問題)

$$\left.\begin{aligned}&\nabla_y\cdot\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{0}\\ &\boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}:\boldsymbol{\varepsilon}\\ &\boldsymbol{\varepsilon} = \nabla_y^{\mathrm{sym}}\boldsymbol{w}\\ &\boldsymbol{\Sigma} = \langle\boldsymbol{\sigma}\rangle\end{aligned}\right\} \quad \text{in} \quad Y \tag{10}$$

$$\left.\begin{aligned}&\tilde{\boldsymbol{t}}^{[k]} = \frac{1}{|\partial Y^{[k]}|}\int_{\partial Y^{[k]}} \boldsymbol{t}^{[k]}\mathrm{d}y\\ &\boldsymbol{w}^{[k]} - \boldsymbol{w}^{[-k]} = \boldsymbol{L}^{[k]}\boldsymbol{E}\end{aligned}\right\} \quad \text{on} \quad \partial Y^{[k]} \tag{11}$$

ここで，$\mathbb{C}$ はミクロ構造内の線形弾性域における材料剛性である．

2.3 外部物質点を用いたミクロ問題の境界条件

ここでは，寺田ら[14]に従い，前述のミクロ境界値問題の境界条件に対し，外部物質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を以下のように書き表す．

$$\boldsymbol{w}^{[k]} - \boldsymbol{w}^{[-k]} = \boldsymbol{q}^{[k]} \tag{12}$$

with

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

$\boldsymbol{q}^{[k]}$ は，対となる周期境界辺における相対変位ベクトルを意味する．また，2 次元問題であるため，ここでは所与のマクロひずみを $\boldsymbol{E} = \{E_{11}, E_{22}, E_{12}\}$ と置けば，$\boldsymbol{L}^{[k]}$ は以下のように書くことができる．

$$\boldsymbol{L}^{[1]} = \begin{bmatrix} l^{[1]} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & l^{[1]} \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{L}^{[2]} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & l^{[2]} \\ 0 & l^{[2]} & 0 \end{bmatrix} \tag{14}$$

$l^{[1]}$，$l^{[2]}$ はぞれぞれ e_1，e_2 軸に平行な矩形ユニットセル境界辺の長さを指す．

寺田ら[14]は，**図–2** に示すようにユニットセル周期境界辺 $\partial Y^{[k]}$ (k=1, 2) ごとに任意の物質点をユニットセル領域外の各境界辺法線方向に一つずつ設け，その各物質点にそれぞれ e_1，e_2 軸に平行に 2 自由度を与える，外部物質点なるものを定義し，更にその外部物質点の節点自由度に，相対変位ベクトル $\boldsymbol{q}^{[k]}$ の成分を割り当てた．つまり，式 (12) は対なる周期境界線上の 2 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．

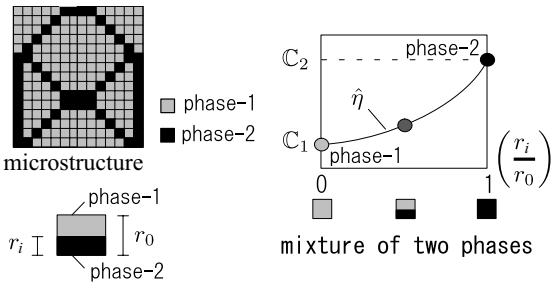
したがって，数値材料試験においてユニットセルにマクロひずみ $\boldsymbol{E}$ の任意の成分を与えるためには，式 (13) からわかるように結果としてこの外部物質点の相対変位成分 $q_i^{[k]}$ を制御すればよいことになる．

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 $\partial Y^{[k]}$ 上での境界線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 $q_i^{[k]}$ に対応する外部物質点の反力を $\boldsymbol{R}_i^{[k]}$ と表せば，それはミクロ応力ベクトル $t_i^{[k]}$ をその境界で線積分したもの，すなわち

$$\boldsymbol{R}_i^{[k]} = \int_{\partial Y^{[k]}} \boldsymbol{t}^{[k]}\mathrm{d}y \tag{15}$$

に他ならない．したがって，式 (9) の関係より，外部物質点の反力式 (15) をユニットセル境界線の長さ $|\partial Y^{[k]}|$



図–3 2 層材料最適化の概念

で除したものが未知のマクロ応力成分 $\boldsymbol{\Sigma}_{ik}$ となることが分かる．つまり，

$$\boldsymbol{\Sigma}_{ik} = \tilde{\boldsymbol{t}}_i^{[k]} = \frac{\boldsymbol{R}_i^{[k]}}{|\partial Y^{[k]}|} \tag{16}$$

であり，これをベクトル表記で書くと以下のとおりとなる．

$$\begin{Bmatrix} \Sigma_{11} \\ \Sigma_{22} \\ \Sigma_{12} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \tilde{t}_1^{[1]} \\ \tilde{t}_2^{[2]} \\ \tilde{t}_2^{[1]} = \tilde{t}_1^{[2]} \end{Bmatrix} \tag{17}$$

ここで，ユニットセルに個別に 3 方向 $(11, 22, 12)$ の引張り数値材料試験を実施すれば，マクロ材料剛性 $\mathbb{C}^{\mathrm{H}}$ を以下のように求めることができる．

$$\mathbb{C}^{\mathrm{H}} = \begin{bmatrix} \mathbb{C}^{\mathrm{H}}_{11} & \mathbb{C}^{\mathrm{H}}_{12} & \mathbb{C}^{\mathrm{H}}_{13} \\ \mathbb{C}^{\mathrm{H}}_{12} & \mathbb{C}^{\mathrm{H}}_{22} & \mathbb{C}^{\mathrm{H}}_{23} \\ \mathbb{C}^{\mathrm{H}}_{13} & \mathbb{C}^{\mathrm{H}}_{23} & \mathbb{C}^{\mathrm{H}}_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma^{(11)}_{11} & \Sigma^{(22)}_{11} & \Sigma^{(12)}_{11} \\ \Sigma^{(11)}_{22} & \Sigma^{(22)}_{22} & \Sigma^{(12)}_{22} \\ \Sigma^{(11)}_{12} & \Sigma^{(22)}_{12} & \Sigma^{(12)}_{12} \end{bmatrix} \tag{18}$$

したがって，この数値材料試験で得られたマクロ材料剛性 $\mathbb{C}^{\mathrm{H}}$ を用いて，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物質点という架空の節点の自由度に，対なる周期境界辺の相対変位量を与え，その外部物質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（応答値）が陰的にはマクロの表面力ベクトル $\tilde{\boldsymbol{t}}$ 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物性値を得ることができることを意味している．このような観点で言うと，(材料を選ばずとも）ミクロ境界値問題さえ解くことが出来れば，そこ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り，つまり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，図–3(左上) に示すとおり，ミクロ領域において異なる固体 2 種で構成された 2 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を設計変数として定義した．

$$s_i = \frac{r_i}{r_0} \tag{19}$$

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した．添え字 $i\,(= 1, .., n_{\mathrm{ele}})$ 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．r_0 と r_i はそれぞれ図–3(左下) に示すとおり，ユニットセル内の任意要素の高さおよび phase-2 材料の高さである．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 2 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[16)17)] 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[18)] (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[16)17)]に準じて，以下のような等価弾性係数として定義する．

$$\mathbb{C} \;=\; (1 - s^{\eta})\,\mathbb{C}_1 + s^{\eta}\mathbb{C}_2 \tag{20}$$

ここで，$\mathbb{C}$ 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 $\mathbb{C}$ は設計変数 $\boldsymbol{s}$ に陽的に依存するものであることがわかる．また，$\mathbb{C}_1$ および $\mathbb{C}_2$ 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．また，η は物理的な意味を保証しないべき乗数である．

4. 最適化問題の設定

最適化問題は，一般に目的関数 $f(\boldsymbol{s})$，制約条件を与える等式制約関数 $\boldsymbol{h}(\boldsymbol{s})$ と不等式制約関数 $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{s})$ で定義される．$\boldsymbol{s}$ 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．

以下に本研究で取り扱う最適化問題の定式化を行う．目的関数はマクロ構造の剛性最大化であり，これをコンプライアンス最小化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，2 種類の材料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．これより，以下にマトリックス形式で表記した最適化問題を記す．

$$\min\ f(\boldsymbol{s}) = \boldsymbol{F}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{d} \tag{21}$$

$$h(\boldsymbol{s}) = \int_{Y} s_i \,\mathrm{d}Y - \hat{V} = 0 \tag{22}$$

$$s_{\mathrm{L}} \le s_i \le s_{\mathrm{U}} \qquad i = 1, ..., n_{\mathrm{s}} \tag{23}$$

ここで，$\boldsymbol{F}$ および $\boldsymbol{d}$ 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，2 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 $\partial f/\partial s_i$，$\partial h/\partial s_i$ 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．次節では本研究で用いた目的関数と制約関数の感度導出法について説明する．なお，OC 法の詳細については文献[15]を参照されたい．

5. 感度解析

(1) 目的関数 f の感度

本節では，目的関数 f の設計変数 s_i に関する感度を求める方法を示す．具体的には以降に示す随伴法（正確には準解析的随伴法）によってその感度を導出する．

まずは，目的関数 f を離散化されたつり合い方程式 $\boldsymbol{K}\boldsymbol{d} = \boldsymbol{F}$（$\boldsymbol{K}$ 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 $\bar{f}$ に置き換える．

$$\bar{f}(\boldsymbol{s}) = \boldsymbol{d}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{K}\boldsymbol{d} - \tilde{\boldsymbol{d}}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{K}\boldsymbol{d} - \boldsymbol{F}) \tag{24}$$

ここで，$\tilde{\boldsymbol{d}}$ 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．

$$\frac{\partial \bar{f}}{\partial s_i} = \left(\underbrace{\boldsymbol{d}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{K}}_{\boldsymbol{F}^{\mathrm{T}}} - \tilde{\boldsymbol{d}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{K} \right) \frac{\partial \boldsymbol{d}}{\partial s_i} - \tilde{\boldsymbol{d}}^{\mathrm{T}} \frac{\partial \boldsymbol{K}}{\partial s_i}\boldsymbol{d} \tag{25}$$

ここで，随伴ベクトル $\tilde{\boldsymbol{d}}$ は任意であるため，設計変数 s_i には依存しないことに注意する．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 $\partial \boldsymbol{d}/\partial s_i$ である．ここで，右辺第 1 項の括弧内がゼロとなるように随伴ベクトル $\tilde{\boldsymbol{d}}$ を $\tilde{\boldsymbol{d}} = \boldsymbol{d}$ とおけばその陰的微分項が消失し，式 (25) を改めて整理すると次式第 1 行のような陽的に簡単に求まる式に帰着する．また，さらに第 2 行のような有限要素レベルの表記方法に戻してみると，マクロ材料剛性マトリックスの微分項 $\partial \mathbb{C}^{\mathrm{H}}/\partial s_i$ さえ計算すれば容易に目的関数の感度を得ることができるようになる．

$$\frac{\partial \bar{f}}{\partial s_i}\left(= \frac{\partial f}{\partial s_i} \right) = -\boldsymbol{d}^{\mathrm{T}} \frac{\partial \boldsymbol{K}}{\partial s_i}\boldsymbol{d} \tag{26}$$

$$= -\int_{\Omega} \boldsymbol{E}^{\mathrm{T}} \frac{\partial \mathbb{C}^{\mathrm{H}}}{\partial s_i}\boldsymbol{E}\,\mathrm{d}\Omega \tag{27}$$

本研究では，前述の数値材料試験を別途行い，その差分近似を行うことで $\partial \mathbb{C}^{\mathrm{H}}/\partial s_i$ を得るようにした．

$$\frac{\partial \mathbb{C}^{\mathrm{H}}}{\partial s_i} = \frac{\Delta \mathbb{C}^{\mathrm{H}}}{\Delta s_i} \tag{28}$$

(2) 等式制約条件の感度

本研究における等式制約条件式 (22) は，変位 $\boldsymbol{d}$ に依存しないため，その感度は次式で示すとおり，陽的に簡単に求めることができるものとなる．

$$\frac{\partial h}{\partial s_i} = \int_{Y} \mathrm{d}Y \tag{29}$$

6. 最適化計算例による本手法の妥当性の検証

6.1 検証事項と共通の問題点

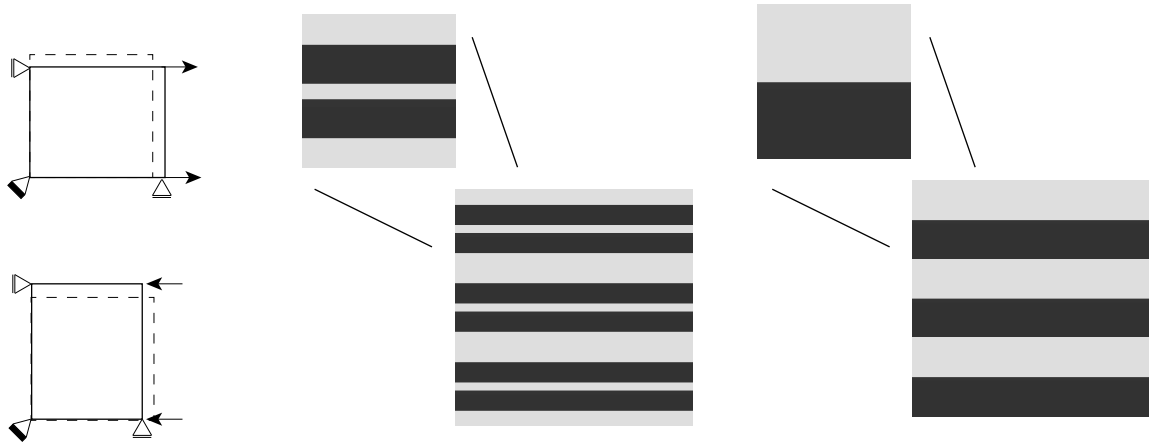
ここでは，最適化計算例を用いて本研究で提案する分離型マルチスケール解析手法によるミクロ構造トポロジー最適化手法の妥当性について検証する．この検証において明らかにすべき点は，本手法が「マクロ構造の力学的挙動」を正しく評価したミクロ構造トポロジーを算出できるか否かである．この場合，マクロ構造に複雑な構造モデルを採用すると得られた最適化結果の評価が困難となるため，前半の検証例では 4 節点四辺形の 1 要素で構成された単純なマクロ構造モデルに基本的な変形を与えることでその評価をしやすくした．

また，後半の最適化計算例ではマクロ構造の要素数を増やすとともに，幾何学的に相反する性質をもたせたマクロ構造を用いて比較検証を行った．

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（non-uniqueness）」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．そのため，同じトポロジー最適化問題であっても，例えば異なる計算機を用いれば異なる最適化トポロジーが得られ，しかもそれらは両方ともに最適解である．ユニットセルにおいて異なるトポロジーが得られるのは，数値解析上の僅かな誤差，例えば計算機固有のものや計算プログラムに内在する僅かな誤差によるものであるが，この現象自体は数値的に正しい現象である[4]．

しかし，一意に最適解が求まらないような状態が起こる原因は，ユニットセルに「一様な変形」が生じることにある．そのような変形が生じるのは，ユニットセルの境界条件が周期性を有し，かつそのユニットセル内のすべての有限要素に同じ材料物性値が与えらえた場合に発生する．この状態は，最適化計算を始める前の初期構造にしばしばみられる．このとき，目的関数の感度 $\partial f/\partial s_i$（ベクトル）を計算すると，そのすべての成分が同値となり，どの要素も目的関数への寄与率が等価であると評価されることから理論上それ以降の最適計算は行われない．

ただし，前述のとおり，回避できない数値上の僅かな誤差があるため，$\partial f/\partial s_i$ の成分間の僅かな差異を辿って最適計算は連続的に実行できる．この場合，著者らの経験では，(a) 初期状態と殆ど変らない状態で推移す



図–4 (a) 引張および圧縮を受けるマクロ構造の変形概念図，(b), (c) 最適化されたミクロ構造トポロジー（ユニットセルとそのパッチ）; (b) はフィルター半径 $r_{\min}$ を 0.05 から 0.0 に小さくしたケース，(c) $r_{\min}$ を 0.25 から 0.0 まで小さくしたケース

表–1 材料データ

	ヤング係数 (N/mm^2)	ポアソン比
phase–1	10	0.3
phase–2	10000	0.3

るか，(b) 上記の差異によって無秩序に乱されたトポロジーが勾配法特有の（設計変数の）初期値依存性に従ってそのまま乱された無意味なトポロジーが得られるか，もしくは (c) チェッカーボード模様[5)6)]のトポロジーに停留することを確認している．

本研究では，この問題を回避する方法のひとつとして現在最も有効であるとされている次式のメッシュ非依存型フィルタリング法[1)4)]を採用することとした．

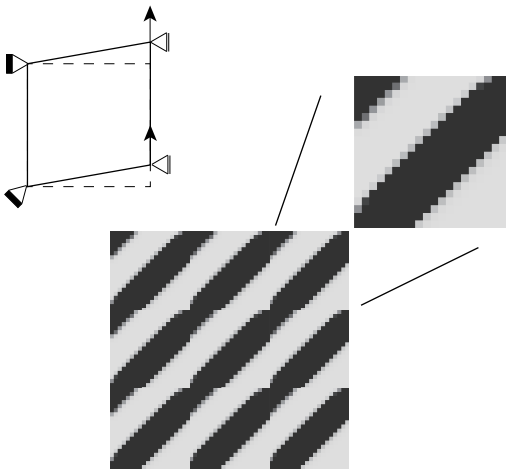
$$\frac{\partial \tilde{f}}{\partial s_i} = \frac{1}{s_i \sum_{j=1}^{N} \hat{H}_j} \sum_{j=1}^{N} \hat{H}_j s_j \frac{\partial f}{\partial s_j}$$

$$\text{with} \qquad \hat{H}_j = r_{\min} - \mathrm{dist}(i, j) \tag{30}$$

ここに，dist(i, j) は i–j 間の有限要素中心距離を，$r_{\min}$ はフィルター半径と言われ，フィルタリングを行う要素の範囲を決めるものである．フィルター半径 $r_{\min}$ が無限大のとき感度 $\partial \bar{f}/\partial s_j$ はすべての要素で等しくなり，逆にゼロに近づくにつれ，実際の感度 $\partial f/\partial s_j$ に近づく．本計算例では，比較的大きいフィルター半径 $r_{\min}$ を用いることで局所的に停留するトポロジーを回避し，徐々にそれを小さくするように適宜チューニングすることで，最終的に得られるトポロジーの 2 つの層を出来る限り明確に区別できるように試みた．

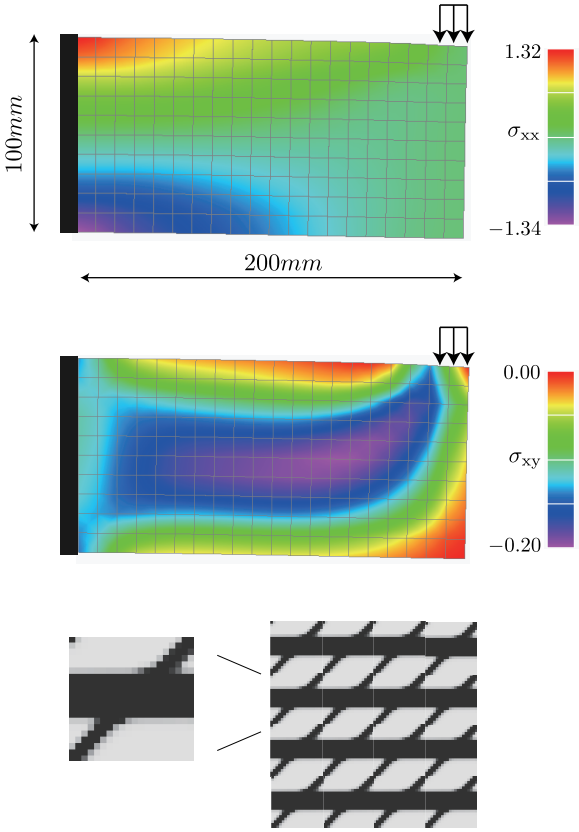
6.2 4 節点四辺形要素を用いた単純構造の場合

当該計算例は，前述のとおりマクロ構造を 4 節点四辺形要素ひとつで単純にモデル化し，それに一様な変形を与えた場合に合理的なミクロ構造トポロジーが得られるかを検証したものである．マクロ構造は，1 辺 100mm の正方形とし，それを平面ひずみ要素でモデル化した．ミクロ構造内の使用材料については，前述のとおり 2 種類（2 層複合材料）とし，空隙は存在しないものと仮定した．ここで，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ている．使用材料はすべて線形モデルとし，その材料定数を**表–1** に記す．また，式 (20) で示したべき乗数 η についてはどの場合においても $\eta = 5$ を採用した．



図–5 単純せん断を受けるマクロ構造の変形概念図と最適化された最適化されたミクロ構造トポロジー（ユニットセルとそのパッチ）

ユニットセルの形状は，正方形とし一辺の長さは正規化して単位長さとした．使用した有限要素は 8 節点四辺形要素で，要素数は 400（20 × 20）である．最適化前の初期状態ではいずれの有限要素に phase–1 と phase–2 がそれぞれ 50% ずつ含まれるものとした．そのため，



図–6 マクロ構造が片持ち梁の場合のミクロ構造トポロジー最適化結果：変形図および水平応力図 σ_{xx}（上），最適化されたミクロ構造（下）

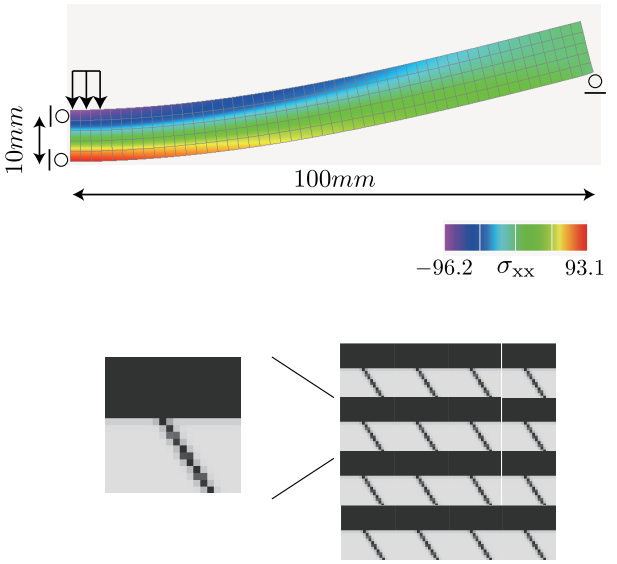
設計変数の初期値はすべての要素で $s_i = 0.5$ である．この構造に含まれる材料の総体積は最適化計算中も変化しないものとする．ちなみに，本論文で使用するすべてのユニットセルにおいて，これと同じものを使用した．

以下にここで得られた最適化結果について説明する．まず，**図–4**(a) は，マクロ構造に与えた変形概念図を示している．ここでは，軸引張，あるいは圧縮として 10% のひずみを与えた．**図–4**(b) は，最適化計算回数が 100 回まではフィルター半径 $r_{\min}$ を縦横に隣接しあう 2 要素間中心距離とし，それ以降はゼロとして場合の最適化結果である．

一方，**図–4**(c) は，フィルター半径を 5 つの要素間距離と大きく取り，最適化計算回数が増えるにつれ，徐々にそれを小さくするように設定した場合の結果であり，前者よりも厚い phase–2 の層が得られたことを示している．これは「非一意性」の問題であり，フィルタリング半径の設定によって異なるトポロジーが得られることが確認された．また，両方の結果を見る限り，どちらも引張・圧縮軸方向の剛性を高める最適な構造であると言える．

次に**図–5** は，マクロ構造に単純せん断変形を与えた場合の最適計算結果である．得られたトポロジーを見ると水平軸から 45° 傾いた材料配置となっており，期待どおりの結果が得られることが分かった．

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．



図–7 桁高が小さい梁をマクロ構造とする場合のミクロ構造トポロジー最適化結果：水平応力図 σ_{xx}（上）と最適化されたミクロ構造（下）

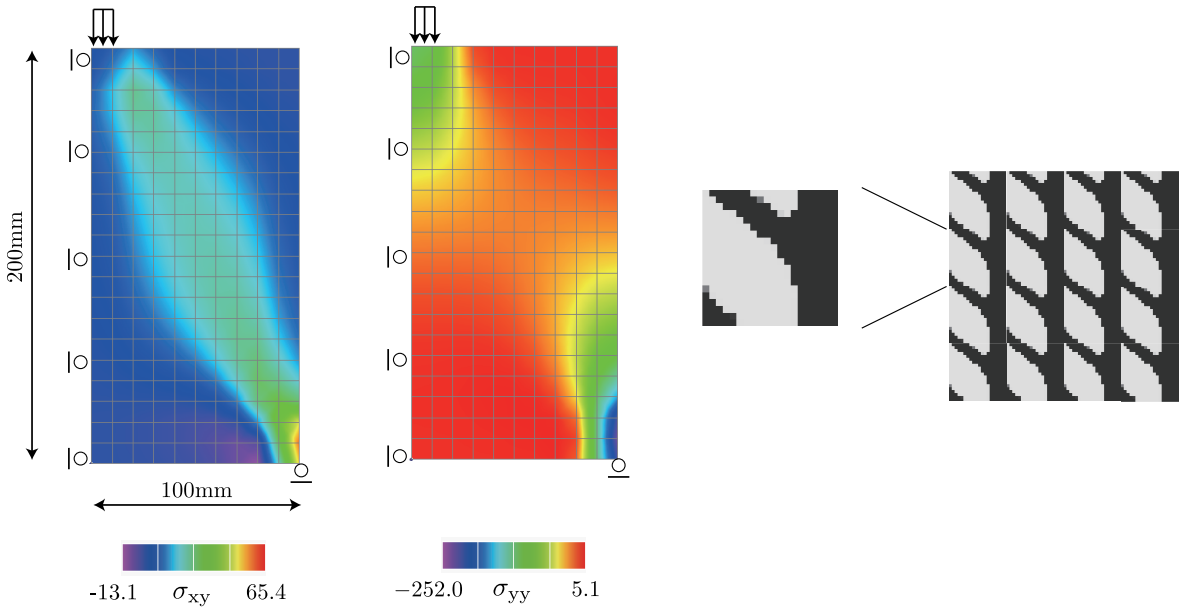
6.3 様々なマクロ構造を用いた場合

前項の検証結果を鑑み，本項では曲げ変形を含むいくつかの代表的なマクロ構造の挙動に対して，本手法の妥当性を検証する．以下の例ではマクロ構造には 8 節点四辺形要素を用い，平面ひずみ状態を想定している．

まず，**図–6** は，梁長 200mm，梁高 100mm の片持ち梁に 1.0kN/m の等分布荷重を作用させた場合の最適化結果で，**図–6** 上段は，その変形図と水平応力 σ_{xx}(MPa) の分布，同図中段はせん断応力 σ_{xy}(MPa) の分布を示している．これによると，曲げ変形によって梁付け根の上下端部における水平軸応力が卓越し，また，その最大水平応力値と比べて小さいものの，せん断応力がマクロ構造のほぼ全域に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，主として水平軸応力に対する補強として phase–2 の厚い層が水平方向に配置され，またせん断応力に対しても斜め方向に配置されているトポロジーが得られた．上記を考慮に入れると得られた最適化構造は力学的に理にかなったものであると思われる．

次に**図–7** は桁高の小さい単純梁の右半断面をモデル化したマクロ構造について最適化を実施した結果である．ここでは，梁上面に 6.0kN/m の等分布荷重を載荷している．同図上段はその変形図と水平応力図である．図からも明らかなようにマクロ構造は水平応力が卓越する構造であり，桁高の低さから大きなせん断応力は生じない（せん断応力図は省略）．その結果，最適化されたミクロ構造を見ると，phase–2 の材料の大半は水平軸方向に配置され，せん断に対しては僅かではあるが斜め方向に補強するようなトポロジーとなった．

図–8 は，**図–7** と同様の力学的条件下で桁高のみ異な



図–8 桁高が大きい梁をマクロ構造とする場合のミクロ構造トポロジー最適化結果：変形図（変形拡大率 10 倍）およびせん断応力図 σ_{xy}（上）と最適化されたミクロ構造（下）

るマクロ構造を用いた場合の最適化結果を示している．ここでは，桁高の違いによってマクロ構造の応力分布が大きく異なるため，その応力状態の違いを正しく考慮した最適ミクロ構造が得られるかを検証したものである．**図–8** 左は，せん断応力 σ_{xy}(MPa)，中央は垂直応力 σ_{yy}(MPa) の分布図である．水平応力図 σ_{xx} については，応力値の絶対値が僅かであるため省略した．せん断応力の分布をみると，荷重作用場と支点を結ぶところでせん断応力が卓越していることがわかる．また，垂直応力の分布については，荷重作用点付近と鉛直支持点で大きな圧縮応力が発生し，特にその鉛直支持点では–250 (MPa) を上回る応力集中が見られる．そのため，最適化されたミクロ構造を見ると，せん断応力に対して斜め方向に，また垂直応力に対して縦方向に補強されたトポロジーが現れ，この結果からマクロ構造の特徴を十分に考慮したミクロ構造のトポロジーが得られたと思われる．

これらの最適化計算例より，本研究で提案する手法は，線形弾性域において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のトポロジーを最適化できるものであることが確認された．

7. 結論

本研究の目的は，複合材料のミクロ構造のトポロジーを最適化することによりそのマクロ構造のパフォーマンスを最大にする手法を提案することである．ここでは，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．
- 分離型マルチスケール解析は，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，材料非線形性等の複雑なモデルを有するミクロ–マクロ連成問題においても最適化手法を導入できる可能性を与える手法である．本論文は，線形弾性体を対象としたトポロジー最適化を実装したものであるが，分離型マルチスケール解析法の本来の効果を考慮すると非線形構造問題へ拡張することが期待される．
- 当該最適化問題の感度の導出法を提案し，数値計算結果からも高精度の感度が得られることを確認した．しかし一方で，一部差分法によって勾配を求める項が存在するため，線形問題の割には感度解析に多くの時間を要した．今後は差分近似ではなく解析的なアプローチによって感度を導出できれば，より一層の感度の高精度化ならびに計算コストの縮減化に貢献できるものと考えられる．

参考文献

1) Bendsøe, M.P., Sigmund, O.: Topology optimization, theory, method and applications, *Springer-Verlag*, Berlin/Heidelberg/New York.
2) Sigmund, O.: Materials with prescribed constitutive parameters: An inverse homogenization problem, *Int. J. Solid. Struct.*, 31, 13, pp. 2313–2329, 1994
3) 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.

4) 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.
5) Diaz, A., Sigmund, O. : Checkerboard patterns in layout optimization , *Struct. Multidisc. Optim.* /, 10, 1, pp. 40–45, 1995.
6) Jog, C.S., Haber, R.B.: Stability of finite element models for distributed-parameter optimization and topology design, *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, 130, pp. 203–226, 1996.
7) Larsen, U.D., Sigmund, O., Bouwstra, S.: Design and fabrication of compliant micromechanisms and structures with negative Poisson's ratio, *J. MEMS* , 6, 2, pp. 99–106, 1997.
8) Rodrigues, H., Guedes, J.M. Bendsoe, M.P.: Hierarchical optimization of material and structure, *Struct. Multidisc. Optim.* , 24, pp. 1–10, 2002.
9) 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.*, 155, pp. 181–192, 1998.
10) Wieckowski, Z.: Dual finite element methods in homogenization for elastic-plastic fibrous composite material, *Int. J. Plast.*, 16, pp. 199–221, 2000.
11) 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. Engrg.*, 183, pp. 141–155, 2000.
12) Feyel, F., Chaboche, J.-L. FE^2 multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fibre SiC/Ti composite materials, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 183, pp. 309–330, 2000.
13) Terada, K., Kikuchi, N.: A class of general algorithms for multi-scale analyses of heterogeneous media, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 190, pp. 5427–5464, 2001.
14) 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
15) Patnaik, S.N., Guptill, J.D., Berke, L.: Merits and limitations of optimality criteria method for structural optimization, *Int. J. Num. Meth. Eng.*, 38, pp. 3087-3120, 1995.
16) Kato, J., Lipka, A., Ramm, E.: Multiphase material optimization for fiber reinforced composites with strain softening, *Struct. Multidisc. Optim.*, 39, pp. 63–81, 2009.
17) 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）, 67, 1, pp.39–53, 2011.
18) Zhou, M., Rozvany, G.I.N.: The COC algorithm, part II : Topological, geometrical and generalized shape optimization, *Comp. Meths. Appl. Mech. Eng.*, Vol. 89, pp. 309–336, 1991.