

フェーズフィールド法によるマイクロ構造トポロジー最適化の基礎的研究

○東北大学大学院工学研究科	学生会員	加茂 純宜
東北大学災害科学国際研究所	正会員	加藤 準治
東北大学災害科学国際研究所	正会員	高瀬 慎介
東北大学災害科学国際研究所	正会員	寺田 賢二郎
東北大学工学研究科	正会員	京谷 孝史

1. はじめに

複合材料の力学的挙動は、材料のマイクロ領域における幾何学的特性、例えば材料配置や形状、寸法に強く依存することが知られており、マイ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ための研究が盛んに進められている。そこで、既往の研究で加藤ら¹⁾は、マイクロ構造の材料配置（トポロジー）を最適化することでマクロ構造の剛性を最大にするための手法を有限要素法をベースに開発している。しかし、有限要素法では実際の材料の複雑なマイクロ組織を表現することは困難であるため、それに代わる新たな方法の導入が求められている。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、マイ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、マイ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マイクロ構造トポロジー最適化を定式化する。

2. フェーズフィールド法を用いた最適化手法の構築

フェーズフィールド法は、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、熱力学第二法則「系の自発的変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」に基づく Allen-cahn 式により導出される。以下では、時間発展方程式の導出を行う。

ユニットセルは2種類の材料で構成されるものとし、それらを phase-1 で $\phi = 0$ 、phase-2 で $\phi = 1$ と定める。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。この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、それぞれ下記のように表される。

$$F_m = \int_V f dV, \quad F_p = k|V - V_0| \quad (2)$$

式(2)において、 f は自由エネルギー密度であり次式で表される。

$$f = f_{\text{doub}} + f_{\text{grad}} - f_{\text{elast}} \quad (3)$$

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、以下の式で表される。

$$f_{\text{doub}} = Wq(\phi) = W\phi^2(1 - \phi)^2 \quad (4)$$

$$f_{\text{grad}} = \frac{a^2}{2} |\nabla \phi|^2 \quad (5)$$

$$f_{\text{elast}} = \frac{1}{2} C_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} \rho(\phi) \quad (6)$$

ここで、 a は勾配係数、 W はエネルギー障壁、 $\rho(\phi)$ はエネルギー密度分布関数と呼ばれ、 $\rho(\phi) = \phi^3(10 - 15\phi + 6\phi^2)$ が広く用いられている。 C は弾性係数、 ϵ はひずみである。式(2)の V は 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係数である。構築した自由エネルギー関数 F をもとに、時間発展方程式を導出する。式(1)の汎関数微分を以下の Allen-Cahn 式に代入する。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M_\phi \frac{\delta F}{\delta \phi} \quad (7)$$

ここで、 M_ϕ はフェーズフィールドモビリティである。両辺を無次元化し、ダブルウェルポテンシャル W 、勾配係数 a を界面エネルギー γ 、界面幅 δ といった物性値と関係づけて整理すると次式を得る。

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

式(8)において理論的根拠から $b \approx 2.2$ として計算する。 β は界面エネルギーと弾性ひずみエネルギー、体積一定条件のペナルティ係数 k の比によって定まり、文献²⁾に従い更新する。

$$\beta = \begin{cases} \frac{e(\phi)}{e_{\text{ave}}} \beta_1 + 4\phi(1 - \phi)\alpha\beta_2 & \cdots e(\phi) \leq e_{\text{ave}} \\ \beta_1 + 4\phi(1 - \phi)\alpha\beta_2 & \cdots e(\phi) > e_{\text{ave}} \end{cases} \quad (9)$$

ここで $e(\phi)$ は、

$$e(\phi) = \frac{1}{2} C_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} \phi(1 - \phi) \quad (10)$$

であり、 e_{ave} は界面領域内の格子点が持つ歪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(8)

において $\alpha = 0$, $\alpha = 1$ 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、

$$\alpha = \frac{V_1^n - V_0}{V_1^n - V_2^n} \quad (11)$$

によって決定する。 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. 最適化計算例

3.1 解析モデル

本研究で提案する最適化の計算例を紹介する。マイクロ構造は、正規化して単位長さをもつ正方形とし、これに周期境界条件を与えた上で、(i) x 方向に一樣な引張変形、(ii) y 方向に一樣な引張変形、(iii) xy 方向に一樣なせん断変形を与えるものとする。平面ひずみ要素でモデル化し、材料は多孔質材料とする。使用材料はすべて線形モデルで、phase-2(赤)を固体材料とし、ヤング率を $E = 100(\text{GPa})$ 、ポアソン比を 0.3 とする。また、phase-1(青)を空隙とし、数値安定性を考慮してヤング率を $E \approx 0$ とした。使用した有限要素は4節点四辺形要素で、要素数は10000 (100×100) である。また、界面幅 δ は要素長の4倍に設定した。最適化前の初期状態は、図-1に示す3つの構造を考える。このとき、領域全体で固体材料が50%含まれるものとした。この構造に含まれる材料の総体積は最適化計算中に変化しないものとする。

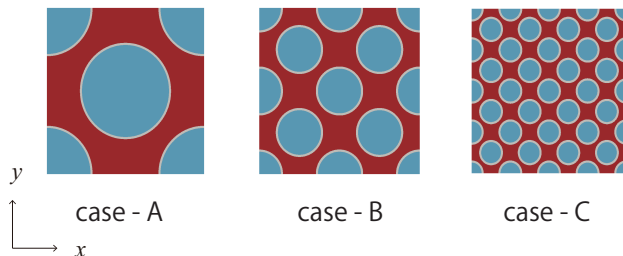


図-1 初期のマイクロ構造

3.2 解析結果

前述のモデルを用いて解析を行った結果、図-2のようなマイクロ構造のトポロジーが得られた。(i) x 方向に一樣な引張変形、(ii) y 方向に一樣な引張変形を与えた場合に得られたトポロジーをそれぞれ見ると、引張の方向に剛性の高い材料が配置されており、引張に抵抗する期待通りのトポロジーが得られることがわかった。また、(iii) xy 方向に一樣なせん断変形を与えた場合は、case-A, case-Bについては、引張と圧縮を受ける方向に固体材料が配置される最適結果となり、せん断に抵抗するトポロジーが得られたことが分かった。また、case-Cについては、引張の斜め45°方向に固体材料が配置される結果となり、せん断に抵抗する期待通りのトポロジーが得られた。また、図-3は

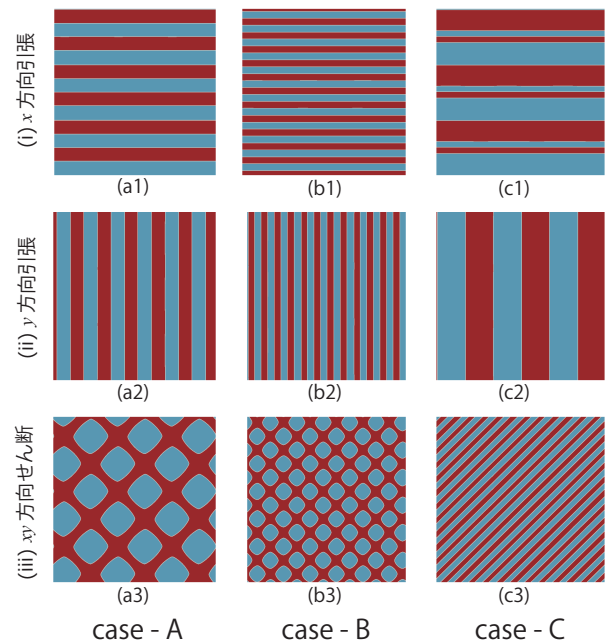


図-2 最適化計算例(マイクロ構造9パッチ)

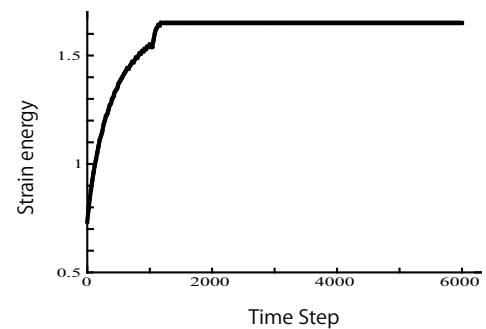


図-3 ひずみエネルギーの変化

Case-Aの初期構造に x 方向引張変形を与えたときのひずみエネルギーの変化を示している。ここでは、所与の制約点変位量に対するひずみエネルギー最大化を行う問題を設定しており、それにより、マイクロ構造の剛性最大化が達成できたことを示唆するものである。

4. 結論

本研究は、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マイクロ構造のトポロジー最適化に応用したものである。その結果、有限要素法では得られない滑らかな界面を表現できることが示された。

参考文献

- 1) 加藤準治, 寺田賢二郎, 京谷孝史: 複合材料のマクロ構造挙動を考慮したマイクロ構造トポロジー最適化, 土木学会論文集 A2 (応用力学), 68, 2, pp.279-287, 2012.
- 2) 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 巻 783 号, pp.1840-1850, 2012.