

Phase-field 法を用いたマルチスケルトポロジー最適化

○東北大学工学部建築・社会環境工学科 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、寸法に強く依存することが知られており、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、ミ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ミ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 phase-field 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、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する。

2. Phase-field 法

Phase-field 法は、界面や表面、粒界といった境界の移動を領域全体の相の状態を表す phase-field 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することができる手法である。時間発展方程式は、phase-field 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」に基づく Allen-cahn 式により導出される。

3. 最適化モデルの構築

3.1 Phase-field 変数 ϕ の定義

ここでは、phase-field 変数 ϕ を定義する。ユニットセルは2種類の異なる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。phase-1 と phase-2 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。

3.2 自由エネルギーの構築

Phase-field 変数 ϕ を用いて自由エネルギー関数 F を構築する。

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

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。

$$F_m = \int_V f dV \quad (2)$$

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

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。

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

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、以下の式で表される。

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

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

$$f_{\text{elast}} = \frac{1}{2} C_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} \rho(\phi) \quad (7)$$

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(3)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ー係数である。

3.3 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。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = M_\phi \frac{\delta F}{\delta \phi} \quad (8)$$

ここで、 M_ϕ は phase-field 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。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\delta^2}{8b^2} \nabla^2 \phi + \phi(1 - \phi)(\phi - \frac{1}{2} + \beta) \quad (9)$$

式(9)において $b \approx 2.2$ である。 β の符号によって界面の移動方向が決まり、 β の絶対値の大きさによって界面の移動

速度が決まる． β は界面エネルギーと弾性歪みエネルギー，体積一定条件のペナルティー係数 k の比によって定まる． β は文献²⁾に従い更新する．

$$\beta = \begin{cases} \frac{e(\phi)}{e_{ave}}\beta_1 + 4\phi(1-\phi)\alpha\beta_2 & \cdots e(\phi) \leq e_{ave} \\ \beta_1 + 4\phi(1-\phi)\alpha\beta_2 & \cdots e(\phi) > e_{ave} \end{cases} \quad (10)$$

ここで $e(\phi)$ は，

$$e(\phi) = \frac{1}{2} C_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} \phi (1 - \phi) \quad (11)$$

であり， e_{ave} は界面領域内の格子点を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(9)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 として，

$$\alpha = \frac{V_1^n - V_0}{V_1^n - V_2^n} \quad (12)$$

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．

4. 最適化計算例

4.1 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．

ミクロ構造は，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，(a) x 方向に一樣な引張変形と (b) 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(黒)を個体材料とし，ヤング率を $E = 100000(\text{MPa})$ ，ポアソン比を 0.3 とする．また，phase-1(白)を空隙とし，ヤング率を数値安定性を考慮して $E \approx 0$ 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倍に設定している．最適化前の初期状態は，領域全体で個体材料が 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．

4.2 解析結果

前述のモデルを用いて解析を行った結果，図-1，図-2のようなミクロ構造のトポロジーが得られた．(a) x 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見ると， x 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どおりのトポロジーが得られることがわかった．同様に，(b) xy 方向に一樣なせん断変形を与えた場合も， xy 方向に剛性の高い材料が配置される結果となった．また，図-3からわかるようにひずみエネルギーは増加しており，変位一定の条件のもと解析を行ったことから，ミクロ構造の剛性が高くなったことが分かる．これらは，加藤ら¹⁾の結果とほぼ同様の結果であることを示している．

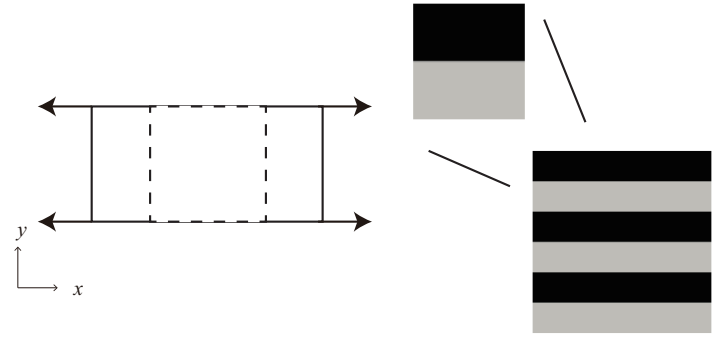


図-1 (a) x 方向に引張変形を与えた場合の最適化例

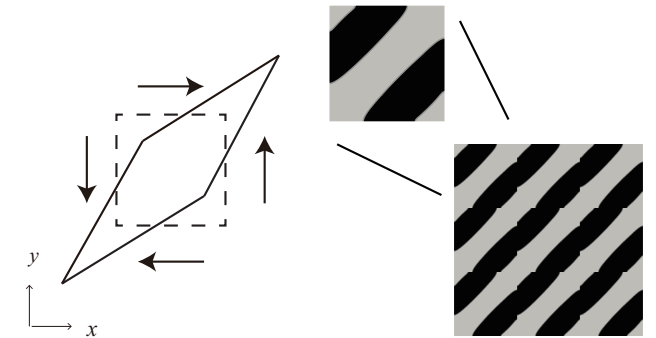


図-2 (b) xy 方向にせん断変形を与えた場合の最適化例

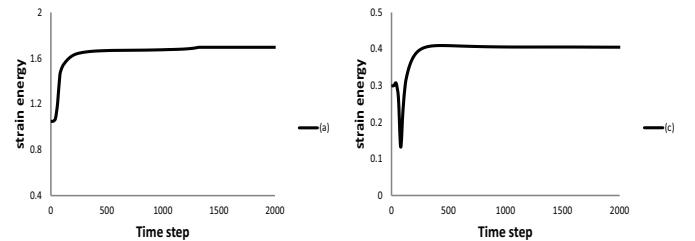


図-3 ひずみエネルギー

5. 結論

本研究では，材料開発分野で注目を浴びている phase-field 法をミクロ構造のトポロジー最適化に応用したものである．それらの定式化を行い，2つの最適化計算を実施した．その結果，一樣な軸方向の変形に関しては良好な結果が得られたが一樣なせん断変形については若干の誤差が見られた．この問題に対しては，今後詳細に解明する必要がある．

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)，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.