結晶方位を考慮した材料微視構造のトポロジー最適化

○東北大学工学部　学生員　○工藤 寛史
東北大学大学院工学研究科　正　員　加藤 準治
東北大学大学院工学研究科　正　員　京谷 孝史

1. はじめに

金属やセラミックス等の結晶性材料は，原子や分子の並ぶ向き（結晶方位）によって剛性が異なり，それによって材料の巨視的な弾性係数は大きく変化する．そこで，本研究では材料の巨視的な応答に影響する結晶配置に加えて，結晶方位も考慮した材料微視構造の最適化問題を取り上げる．ここでは，マルチフェーズフィールド法 [2)]（以下，MPF 法と略す）と均質化法に基づく分離型マルチスケール解析法を組み合わせた新しい材料設計法を提案する．

2. 剛性最大化問題

本研究で対象とする剛性最大化問題は，2 次元問題を対象として目的関数を f_{E}，設計変数を ϕ，等式制約条件を h として次式のように定式化される．

$$\text{minimize} \qquad f_{\mathrm{E}} = \boldsymbol{F}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{d} = \int_{\Omega} \boldsymbol{E}^{\mathrm{T}} \mathbb{C}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{E} \, \mathrm{d}\Omega \tag{1}$$

$$\text{subject to} \qquad h(\boldsymbol{\phi}) = \int_{Y} \rho(\phi_i) \, \mathrm{d}y - V_0 = 0 \tag{2}$$

$$\boldsymbol{K} \boldsymbol{d} = \boldsymbol{F} \tag{3}$$

$$0 \leq \phi_i \leq 1 \quad (i = 1, ..., N) \tag{4}$$

ここで，$\boldsymbol{d}$ はマクロ構造の変位ベクトル，$\boldsymbol{K}$ はマクロ構造の剛性マトリックス，$\boldsymbol{E}$ はマクロ構造のひずみベクトル，$\mathbb{C}^{\mathrm{H}}$ はマクロ構造の均質化弾性係数行列，ϕ_i はフェーズフィールド変数（以下，PF 変数と略す）である．PF 変数 ϕ_i は，ミクロ構造ユニットセルにある N 個の結晶粒のうち i 番目の粒の存在確率を表す．また，$\boldsymbol{F}$ は荷重ベクトルであり，PF 変数に依存していない．

3. 分離型マルチスケール解析法

本研究では，ミクロとマクロの境界値問題を別々に解く分離型マルチスケール解析法 [1)] を用いる．この手法は，周期境界条件をもつユニットセルに対して均質化法に基づく数値的な材料試験を行い，その応答からマクロ材料の物性値を測るというものである．この手法により，ミクロとマクロの 2 変数境界値問題を同時に解く方法よりも，計算コストを大幅に低減することが出来る．

4. MPF 法

多結晶材料構造の表現方法として，MPF 法 [2)] を用いる．結晶粒の時間発展方程式は，Allen-Cahn 式により次式のように導出した．

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -\frac{2}{n} \sum_{j=1}^{n} M_{ij}^{\phi} \left[\sum_{k=1}^{n} \left\{ \left(W_{ik} - W_{ij} \right) \phi_k + \frac{1}{2} \left(a_{ik}^2 - a_{ij}^2 \right) \nabla^2 \phi_k \right\} - \left\{ \frac{\partial f_{\mathrm{E}}}{\partial \phi_i} - \frac{\partial f_{\mathrm{E}}}{\partial \phi_j} \right\} \right] \tag{5}$$

ここで，M_{ij}^{ϕ} はフェーズフィールドモビリティ，W はエネルギー障壁，a は勾配係数，$\partial f_{\mathrm{E}}/\partial \phi_i$ は目的関数 f_{E} の設計変数 ϕ_i に対する勾配である．

5. 直交異方性の弾性係数

直交異方性材料のミクロ弾性係数行列 $\boldsymbol{C}$ は，簡便的に次式を用いた．

$$\boldsymbol{C} = \frac{1}{1-\nu^2} \begin{bmatrix} E_1 & \nu\sqrt{E_1 E_2} & 0 \\ \nu\sqrt{E_1 E_2} & E_2 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-\nu}{2}\sqrt{E_1 E_2} \end{bmatrix} \tag{6}$$

ここで，ν はポアソン比，E_1，E_2 はそれぞれ y_1 および y_2 方向のヤング率である．

6. 結晶方位

各結晶粒に結晶方位 θ_i を与える．結晶方位は各粒子で独立した変数であると考えると，結晶方位の時間発展方程式は，Allen-Cahn 式より次式のように表現される．

$$\frac{\partial \theta_i}{\partial t} = -M_{ij}^{\theta} \frac{\partial f_{\mathrm{E}}}{\partial \theta_i} \tag{7}$$

$$0 \leq \theta_i \leq \pi \quad (i = 1, ..., N) \tag{8}$$

ここで，M_{ij}^{θ} は結晶方位のモビリティである．結晶方位を考慮したミクロ弾性係数行列 $\bar{\boldsymbol{C}}$ は，次式のようになる．

$$\bar{\boldsymbol{C}} = \boldsymbol{R}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{C} \boldsymbol{R} \tag{9}$$

$$\boldsymbol{R}(\theta_i) = \begin{bmatrix} \cos^2\theta_i & \sin^2\theta_i & \sin\theta_i\cos\theta_i \\ \sin^2\theta_i & \cos^2\theta_i & -\sin\theta_i\cos\theta_i \\ -2\sin\theta_i\cos\theta_i & 2\sin\theta_i\cos\theta_i & \cos^2\theta_i - \sin^2\theta_i \end{bmatrix} \tag{10}$$

ここで，$\boldsymbol{R}(\theta_i)$ は弾性係数行列に対する回転行列 [3)] である．

Key Words: トポロジー最適化，マルチフェーズフィールド法，金属結晶構造
〒 980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-06, TEL 022-795-7489

7.　感度の導出

PF 変数 ϕ_i に対する目的関数 f_E の感度の導出には，以下のような随伴法を用いる．

$$\bar{f}_E = \boldsymbol{F}^T \boldsymbol{d} - \boldsymbol{\mu}^T (\boldsymbol{K}\boldsymbol{d} - \boldsymbol{F}) \tag{11}$$

ここで，$\boldsymbol{\mu}$ は任意の随伴ベクトルと呼ばれるもので，PF 変数 ϕ_i に依存しない．上式のうち，括弧内の式はつり合い式であるため零であり，$\bar{f}_E$ は元の目的関数 f_E と等価である．ここで随伴ベクトルを $\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{d}$ となるように選べば，$\bar{f}_E$ の ϕ_i に関する感度は以下のような陽的な微分項で表すことができる．

$$\begin{aligned}\frac{\partial \bar{f}_E}{\partial \phi_i} &= \left(\boldsymbol{F}^T - \boldsymbol{\mu}^T\boldsymbol{K}\right)\frac{\partial \boldsymbol{d}}{\partial \phi_i} - \boldsymbol{\mu}^T \frac{\partial \boldsymbol{K}}{\partial \phi_i}\boldsymbol{d} \\ &= -\boldsymbol{d}^T \frac{\partial \boldsymbol{K}}{\partial \phi_i}\boldsymbol{d} \\ &= -\int_\Omega \boldsymbol{E}^T \frac{\partial \mathbb{C}^H}{\partial \phi_i}\boldsymbol{E}\, d\Omega^e \\ &= -\int_\Omega \boldsymbol{d}_e^T \boldsymbol{B}^T \frac{\partial \mathbb{C}^H}{\partial \phi_i}\boldsymbol{B}\,\boldsymbol{d}_e\, d\Omega^e \end{aligned} \tag{12}$$

ここで，$\boldsymbol{d}_e$ はマクロの要素節点変位ベクトル，$\boldsymbol{B}$ は B マトリックスである．上式の最終行の均質化弾性係数行列 $\mathbb{C}^H$ のフェーズフィールド変数 ϕ_i に対する感度 $\partial\mathbb{C}^H/\partial\phi_i$ は，Kato et al.[1] の手法を参考に解析的に導出すると，最終的に以下の式で表せる．

$$\frac{\partial \mathbb{C}^H_{\alpha\beta}}{\partial \phi_i} = \frac{1}{|Y|}\int_Y \frac{\partial \bar{C}}{\partial \phi_i}\varepsilon^{(\beta)} \cdot \varepsilon^{(\alpha)}\, dy \tag{13}$$

ここで，ε はミクロひずみである．同様に結晶方位 θ_i に対するマクロ材料剛性の感度は以下のように導出される．

$$\frac{\partial \bar{f}_E}{\partial \theta_i} = -\int_\Omega \boldsymbol{d}_e^T \boldsymbol{B}^T \frac{\partial \mathbb{C}^H}{\partial \theta_i}\boldsymbol{B}\,\boldsymbol{d}_e\, d\Omega^e \tag{14}$$

$$\frac{\partial \mathbb{C}^H_{\alpha\beta}}{\partial \theta_i} = \frac{1}{|Y|}\int_Y \frac{\partial \bar{C}}{\partial \theta_i}\varepsilon^{(\beta)} \cdot \varepsilon^{(\alpha)}\, dy \tag{15}$$

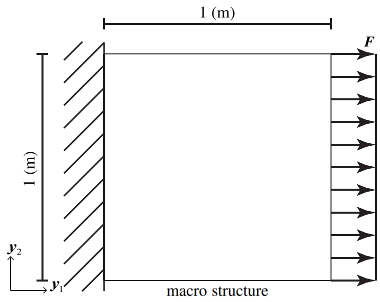
8.　最適化計算例

ここでは，本手法を用いた最適化計算例について述べる．ミクロの材料構成は二相材料結晶構造とし，使用材料の物性値は**表–1** の値を用いた．

表–1　使用材料

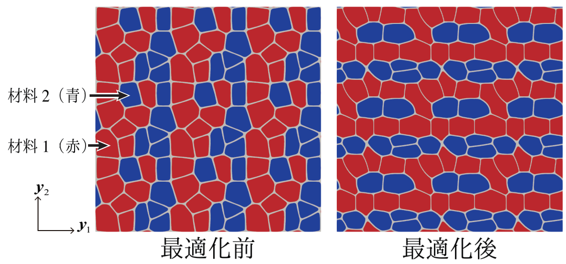
材料	方向	ヤング率 (GPa)	ポアソン比	初期角度 (rad)
材料 1（赤）	y_1'	500	0.3	0.7π
	y_2'	100	0.3	1.2π
材料 2（青）	y_1'	50	0.3	0.8π
	y_2'	10	0.3	1.3π

計算に使用するマクロ構造および境界条件は，**図–1** の通りとし，等分布荷重 $\boldsymbol{F} = 10\,(\mathrm{kN/m})$ を作用させた．にその様子を示した．なお，本研究ではミクロ，マクロ構造共に 4 節点四辺形要素を使用している．

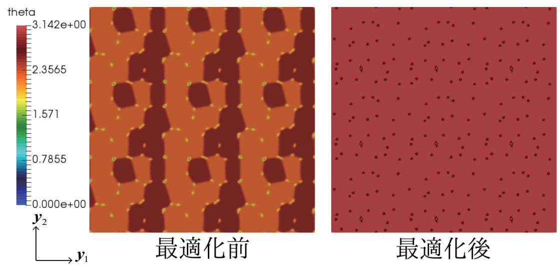


図–1　境界条件

図–2 および**図–3** の結果は，最適化前後の粒配置と角度の変化を表すミクロ構造で示している．粒の配置や角度が，水平方向の作用力に抵抗するようなトポロジーが得られていることがわかる．



図–2　粒配置



図–3　粒角度

9.　結論

本研究では，材料の結晶方位を考慮し，MPF 法 [2] および分離型マルチスケール解析を用いたトポロジー最適化を行った．最適化計算例において合理的な結晶構造を得ることが出来た．

参考文献

1) J. Kato, D. Yachi, K. Terada, T. Kyoya : Topology optimization of micro-structure for composites applying a decoupling multi-scale analysis. *Struct Multidisc Optim*, 2014
2) B. Nestler, F. Wendler, M. Selzer : Phase-field model for multiphase systems with preserved volume fractions, *Phys Rev E*, 2008.
3) E. Oñate : Structural Analysis with the Finite Element Method. Linear Statics Volume 1: Basis and Solids, *Springer*, 2009.
4) 加藤準治，加茂純宜，高瀬慎介，森口周二，車谷麻緒，寺田賢二郎，京谷孝史: 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，土木学会論文集 A2(応用力学), Vol.70, No.2 (応用力学論文集 Vol.17), I.173-I.183, 2014.