曲率の影響を取り除いた結晶性材料の最適設計

1. はじめに

多結晶性材料の最適結晶配置をマルチフェーズフィールド 法(以下, MPF法に略す)によるトポロジー最適化を用い て算出する手法が先行研究⁽¹⁾で提案されているが,フェー ズフィールド法特有の曲率の効果が障壁となり,最適結晶 配置を安定的に算出できない問題が生じている.

本研究では,材料体積一定の制約条件下で熱伝導性能最 大化問題を例に,従来の方法から曲率の効果を取り除いた 新しい手法を提案し,その効果を数値計算例を用いて検証 する.

2. MPF 法によるトポロジー最適化

本モデルで扱う熱伝導量最大化は、マクロ構造は変化さ せず、ミクロ構造のトポロジーのみを設計対象として最適 化を行う.マクロの温度ベクトル*T*と熱量ベクトル*W*によ る内積の平均熱コンプライアンスを目的関数 *f*_{th} とし、構造 全体の材料体積量を一定に保つという等式制約条件下で最 小化を図る.

$$\min \qquad f_{\rm th} = \boldsymbol{T} \cdot \boldsymbol{W} \tag{1}$$

subject to
$$h(\boldsymbol{\phi}) = \int_{Y} \rho(\phi_i) \, \mathrm{dy} - V_0 = 0$$
 (2)

$$HT = W \tag{3}$$

$$0 \le \phi_i \le 1$$
 $(i = 1, ..., N)$ (4)

ここで,Nはミクロ構造(ユニットセル)内の結晶粒の総 数, ϕ_i は結晶粒 i の存在を示すフェーズフィールド変数で ある.フェーズフィールド法は,境界の移動を新たに導入 した変数 ϕ_i 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,変 数 ϕ_i 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」に基づき導出される.さら に,本問題で扱う目的関数の式(1)を組み込んだ場合は,以 下となる.

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -\frac{2}{n} \sum_{j=1}^n M_{ij} \bigg[\sum_{k=1}^n \bigg\{ (W_{ik} - W_{ij}) \phi_k + \frac{1}{2} (a_{ik}^2 - a_{ij}^2) \nabla^2 \phi_k \bigg\} - \bigg(\frac{\partial f_{\text{th}}}{\partial \phi_i} - \frac{\partial f_{\text{th}}}{\partial \phi_j} \bigg) \bigg]$$
(5)

ここで, $\partial f_{
m th}/\partial \phi_i$ は目的関数 $f_{
m th}$ の設計変数 ϕ_i に対する勾配である.

| ○東北大学工学部 | 学生 | Ė員 | 小山 | 礼 |
|--------------|----|----|------|----|
| 東北大学大学院工学研究科 | 正 | 員 | 加藤 | 隼治 |
| 東北大学大学院工学研究科 | 正 | 員 | 京谷 著 | 對史 |

3. 新たに提案する時間発展方程式

(1) 曲率による影響

フェーズフィールド法によるトポロジー最適化は,式(5) 中に拡散項 $\nabla^2 \phi_k$ を含むことから,曲率 1/r による影響が自 然に含まれる⁽²⁾.これは, $\nabla^2 \phi_k$ をデカルト座標(x, y)表示 から界面上の極座標(r, θ)表示にすると理解しやすい.

$$\nabla^2 \phi_k = \frac{\partial^2 \phi_k}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi_k}{\partial y^2} = \frac{\partial^2 \phi_k}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \phi_k}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \phi_k}{\partial \theta^2} \tag{6}$$

曲率は,材料の微細構造においては重要である.しかしな がら,フェーズフィールド法によるトポロジー最適化では, 実際の目的関数のみだけでなく界面エネルギーをも最小化 しようとする目的が追加されてしまう.そのため,曲率によ る影響は元の時間発展方程式(5)から取り除く必要がある.

いま,フェーズフィールド法において,結晶粒は円形表 現で考慮しており円周方向(θ 方向)への ϕ_k の変化はない ため,式(6)中の右辺第3項は無視できる.また,式(6)中 の右辺第2項は, $|\nabla \phi_k|$, $\nabla \phi_k$ を用いて

$$\frac{1}{r}\frac{\partial\phi_k}{\partial r} = |\nabla\phi_k| \nabla \cdot \left(\frac{\nabla\phi_k}{|\nabla\phi_k|}\right) \tag{7}$$

) と表せる ⁽³⁾.

(2) 曲率項を除去した時間発展方程式

これより,曲率項による影響を取り除いた時間発展方程 式を導出する.式(5)中の $\nabla^2 \phi_k$ から式(7)を引き,界面を 乱れなく表示するために定数 α を掛け合わせた新たな拡散 項は,

$$Cv' = \frac{1}{\left(\frac{\partial\phi_k}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial\phi_k}{\partial y}\right)^2} \left\{ \left(\frac{\partial\phi_k}{\partial x}\right)^2 \left(\frac{\partial^2\phi_k}{\partial x^2}\right) + \left(\frac{\partial\phi_k}{\partial y}\right)^2 \left(\frac{\partial^2\phi_k}{\partial y^2}\right) + 2\alpha \left(\frac{\partial\phi_k}{\partial x}\right) \left(\frac{\partial\phi_k}{\partial y}\right) \left(\frac{\partial^2\phi_k}{\partial x\partial y}\right) \right\}$$
(8)

と表現できる.なお, α は0 $\leq \alpha \leq 1$ をとり,本研究では最 終的に $\alpha = 0$ を用いた.その結果,式(8)を用いると,新た な時間発展方程式は以下となる.

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -\frac{2}{n} \sum_{j=1}^n M_{ij} \left[\sum_{k=1}^n \left\{ (W_{ik} - W_{ij}) \phi_k + \frac{1}{2} (a_{ik}^2 - a_{ij}^2) C v' \right\} - \left(\frac{\partial f_{\text{th}}}{\partial \phi_i} - \frac{\partial f_{\text{th}}}{\partial \phi_j} \right) \right]$$
(9)

となる.

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

4. 最適化計算例

(1) 解析モデル

本研究で扱う最適化の解析モデルを説明する. ミクロ構造 は、アルミニウム(赤)と共晶アルミシリコン(灰)を想定 した2種類の材料からなる.材料定数はそれぞれ230 [W/(m・ K)], 50 [W/(m·K)] であり、この材料が領域全体に 50 % ずつ 含まれる.また、結晶粒はユニットセルあたりにそれぞれ7 個ずつの合計14個存在する.マクロ構造に与える境界条件は 図-1に示した通りで、左端から熱流束 $\hat{O} = 2.5 \times 10^4 [W/m^2]$ を与え、右端で温度拘束 $\hat{T} = 0^{\circ}C$ を与える.



図-1 マクロ構造(左),最適化前のミクロ構造(右)

なお、ミクロ構造はユニットセルを 3x3 で張り合わせた 9パッチで表している.また、マクロ構造の要素数は200 (20×10), ミクロ構造は 10,000 (100×100) 要素で, どちらも 有限要素は4節点四辺形要素を使用している.

(2) 解析結果

従来の時間発展方程式を用いたモデルと提案した新しい 時間発展方程式を用いたものでそれぞれ解析を行った結果, 図-2のようなミクロ構造のトポロジーが得られた.図-1と 同様に9パッチで表示している.



図-2 最適化後のミクロ構造:(左)従来の手法,(右)提案手法

曲率の影響を含む従来の手法のもの(左)は、界面周長 を短くしようとする力が作用し,隣り合う粒同士で結合し,

全体的にも丸み帯びている.一方,曲率の影響を取り除い た当該手法のもの(右)は、全体的に丸み帯びずに直線的 な構造で、熱流束を与える場所と温度拘束点を直接結ぶよ うな帯状になることがわかった.



図-3 目的関数値の変化:(黒)従来の手法,(赤)提案手法

目的関数値は、図-3からわかるように、提案手法による ものの方が従来の手法のものよりも低い値で収束している. これより、当該手法が従来の手法から曲率に寄与する項を 取り除くことで、界面エネルギーを考慮せずに目的関数の 平均熱コンプライアンスに関するエネルギーのみを効率的 に最適化できる⁽³⁾ことがわかった.従来の手法のものは, 目的関数値は 0.4×10⁵ time steps 以降である程度落ち着くが, 一定値には収束していない. また, ミクロ構造のトポロジー もタイムステップ数により安定しない.一方,提案手法の ものは初期の段階から目的関数値を収束させ、ミクロ構造 のトポロジーも早期から安定した.

5. 結論

本研究は,先行研究のマルチフェーズフィールド法を用 いたトポロジー最適化⁽¹⁾から曲率の影響を取り除いた.そ の結果、目的関数の収束値を安定させ、効率的に最適化で きることがわかった.

参考文献

- 小川峻,一番ケ瀬俊季,加藤準治,高木知弘:結晶性材料の 熱伝導性能最大化を目指したマルチフェーズフィールドトポ ロジー最適化,日本計算工学会論文集,2017, under review. 高木知弘,山中昇徳,フェーズフィールド法ー数値シミュレー 1)
- 2) ンョンによる材料組織設計ー, 2012.
- T. Takaki, J. Kato, Phase-field topology optimization model that removes the curvature effects, *Struct. Multidisc. Opt.*, 2017. 3)