### 曲率の影響を取り除いた結晶性材料の最適設計

○東北大学工学部 学生員 小山 礼 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

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<sup>(1)</sup> 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。

$$\min f_{th} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{W} (1)$$

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

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

$$0 \le \phi_i \le 1 \quad (i = 1, ..., N)$$
 (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、 $\phi_i$  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 $\phi_i$  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 $\phi_i$  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。

$$\frac{\partial \phi_{i}}{\partial t} = -\frac{2}{n} \sum_{j=1}^{n} M_{ij} \left[ \sum_{k=1}^{n} \left\{ (W_{ik} - W_{ij}) \phi_{k} + \frac{1}{2} (a_{ik}^{2} - a_{ij}^{2}) \nabla^{2} \phi_{k} \right\} - \left( \frac{\partial f_{th}}{\partial \phi_{i}} - \frac{\partial f_{th}}{\partial \phi_{j}} \right) \right]$$
(5)

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

# 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  $(r,\theta)$  表示にすると理解しやすい.

$$\nabla^2 \phi_k = \frac{\partial^2 \phi_k}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi_k}{\partial y^2} = \frac{\partial^2 \phi_k}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \phi_k}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \phi_k}{\partial \theta^2}$$
(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( $\theta$  方向)への $\phi_k$  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 <sup>(3)</sup>.

## (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  $\alpha$  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、 $\alpha$  は  $0 \le \alpha \le 1$  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.

$$\frac{\partial \phi_{i}}{\partial t} = -\frac{2}{n} \sum_{j=1}^{n} M_{ij} \left[ \sum_{k=1}^{n} \left\{ (W_{ik} - W_{ij}) \phi_{k} + \frac{1}{2} (a_{ik}^{2} - a_{ij}^{2}) Cv' \right\} - \left( \frac{\partial f_{th}}{\partial \phi_{i}} - \frac{\partial f_{th}}{\partial \phi_{i}} \right) \right]$$
(9)

となる.

### 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  $\hat{O} = 2.5 \times 10^4 [\text{W/m}^2]$ を与え、右端で温度拘束  $\hat{T} = 0^{\circ}$ C を与える.

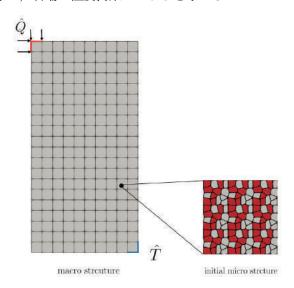


図-1 マクロ構造(左),最適化前のミクロ構造(右)

なお、ミクロ構造はユニットセルを 3×3 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.

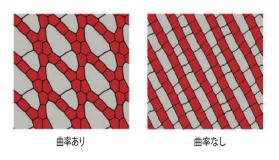


図-2 最適化後のミクロ構造:(左)従来の手法,(右)提案手法

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.

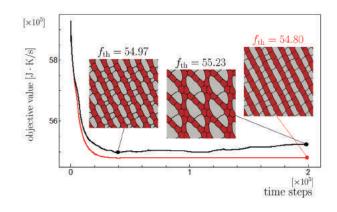


図-3 目的関数値の変化:(黒)従来の手法,(赤)提案手法

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 $0.4\times10^5$  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

- 、八川、 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、川中昇徳、フェーズフィールド法一数値シミュレー 1)
- ンョンによる材料組織設計一,2012.
- T. Takaki, J. Kato,: Phase-field topology optimization model that removes the curvature effects, *Struct. Multidisc. Opt.*, 2017.