

格子運動論スキームを用いた レベルセット法に基づくトポロジー最適化

LEVEL SET-BASED TOPOLOGY OPTIMIZATION USING LATTICE KINETIC SCHEME

矢地 謙太郎¹⁾, 山田 崇恭²⁾, 吉野 正人³⁾, 松本 敏郎⁴⁾, 泉井 一浩⁵⁾, 西脇 眞二⁶⁾

Kentaro YAJI, Takayuki YAMADA, Masato YOSHINO, Toshiro MATSUMOTO, Kazuhiro IZUI and Shinji NISHIWAKI

- | | | | |
|------------------|-------------|---------------|---|
| 1) 京都大学大学院工学研究科 | (〒 615-8540 | 京都市西京区京都大学桂, | E-mail: yaji.kentarou.74v@st.kyoto-u.ac.jp) |
| 2) 京都大学大学院工学研究科 | (〒 615-8540 | 京都市西京区京都大学桂, | E-mail: takayuki@me.kyoto-u.ac.jp) |
| 3) 信州大学工学部 | (〒 380-8553 | 長野市若里 4-17-1, | E-mail: masato@shinshu-u.ac.jp) |
| 4) 名古屋大学大学院工学研究科 | (〒 464-8603 | 名古屋市千種区不老町, | E-mail: t.matsumoto@nuem.nagoya-u.ac.jp) |
| 5) 京都大学大学院工学研究科 | (〒 615-8540 | 京都市西京区京都大学桂, | E-mail: izui@me.kyoto-u.ac.jp) |
| 6) 京都大学大学院工学研究科 | (〒 615-8540 | 京都市西京区京都大学桂, | E-mail: shinji@prec.kyoto-u.ac.jp) |

This paper presents a topology optimization method using the lattice kinetic scheme for fluid dynamics problems. In the presented method, the optimization problem and its adjoint equation are formulated based on the Boltzmann equation, and the design sensitivities are precisely obtained without the use of matrix operations. Based on these formulations, we construct a level set-based topology optimization method incorporating a fictitious interface energy for the design of a fluid channel that minimizes the pressure drop. Furthermore, a three-dimensional numerical example is provided to confirm the validity of the presented method.

Key Words: Lattice Kinetic Scheme, Lattice Boltzmann Method, Topology Optimization, Level Set Method, Sensitivity Analysis

1. 緒言

トポロジー最適化⁽¹⁾は、構造の形状変更のみならず、穴が創出するような形態変更をも許容する、最も設計自由度の高い構造最適化手法である。この方法の基本的な考え方は、構造最適化問題を指定した領域内における材料分布問題への置き換えにあり、これまでに構造力学問題を始めとして、熱伝達⁽²⁾、電磁波特性⁽³⁾など様々な物理問題を対象とした最適化問題に適用されている。

近年では流体問題を対象とした最適化問題への適用も報告されており、Borrvall と Petersson⁽⁴⁾によって、流体問題を対象としたトポロジー最適化の方法論が最初に構築された。その後、彼らの方法論に基づく研究が幾つか報告されており、流路の設計⁽⁵⁾⁽⁶⁾、翼の設計⁽⁷⁾、更には熱と流体の連成を考慮した熱交換器の設計⁽⁸⁾等へ適用され成功を収めている。

流体問題を対象としたトポロジー最適化では、一般に有限要素法 (Finite Element Method: 以下, FEM) を用いて流れ場の数値計算が行われているが、格子ボルツマン法 (Lattice

Boltzmann Method: 以下, LBM)⁽⁹⁾を用いた新たなトポロジー最適化手法が近年注目を集めている。LBM は気体分子運動論におけるボルツマン方程式に基づく数値計算手法であり、仮想的な粒子の速度分布関数によって流速や圧力などの巨視的な状態量を算出する。この方法はナビエ・ストークス方程式を離散化して流れ場を計算する FEM や差分法とは異なる数値計算手法であり、圧力場の算出にポアソン方程式を解く必要性がない。また、アルゴリズムが単純な完全陽解法として記述されるため、LBM は並列計算への導入が容易である特徴を持つ。更に、LBM は質量及び運動量の保存性に優れており、これまでに、多孔質内流れ⁽¹⁰⁾などの複雑な境界を有する流れ場や、二相流⁽¹¹⁾などの界面が複雑に変化する流れ場に適用されている。Pingen ら⁽¹²⁾は、LBM を用いたトポロジー最適化手法を最初に提案しており、FEM を用いた先行研究⁽⁴⁾と同様の結果を得ている。しかしながら、彼らの方法論は離散系の支配方程式によって最適化問題を定式化しているため、設計感度を厳密に導出することができない問題を持つ。また、設計感度の導出に、大規模な非対称疎行列を扱う必要性があり、大規模な流れ場を対象とした

方法論への拡張は、行列計算に要する計算コストの観点から困難といえる。これに対し著者ら⁽¹³⁾は、連続系のボルツマン方程式によって最適化問題を定式化することで、厳密に設計感度を扱うLBMを用いたトポロジー最適化手法を提案している。この方法では、随伴方程式がボルツマン方程式と同様の式構造をしているため、随伴方程式のアルゴリズムも単純な完全陽解法として記述される。したがって、行列計算を行うことなく随伴方程式の解法、及び設計感度の導出が可能である。

他方、LBMは、モデル化した粒子速度の各方向に対して速度分布関数が存在することから、通常の流体解析手法に比べてメモリーを多く要することが短所といえる。Inamuro⁽¹⁴⁾はこの問題に対し、巨視的な状態量のみを用いて格子ボルツマン方程式を時間発展させる格子運動論スキーム (Lattice Kinetic Scheme: 以下、LKS) を提案している。この方法は速度分布関数の計算を必要としないため、通常のLBMと比べて大幅なメモリー容量の削減を可能とし、更にはLBMよりも数値安定性が良く、高レイノルズ数の計算に適している。

そこで本研究では、高レイノルズ数流れや二相流などの、複雑かつ大規模な流れ場を対象とした構造最適化問題に展開可能な、LKSを用いたトポロジー最適化の基礎的な方法論を構築する。また、複雑な問題設定をした場合には、通常のとポロジー最適化を適用した場合グレースケールなどの数値不安定性を生じてしまう問題点を持つので、本研究ではYamadaら⁽¹⁵⁾が提案するレベルセット法に基づく境界表現法を導入し、方法論の構築を行う。2章ではLKSの基本的な考え方を述べる。3章ではレベルセット法に基づくトポロジー最適化手法の概要を述べ、LKSを用いた内部流れにおける圧力損失最小化問題を定式化する。4章では、前章の定式化に基づいた数値実装法について述べる。最後に数値解析例を示し、本研究の妥当性を検討する。

2. 格子運動論スキーム

本研究では、等温場における単相の非圧縮粘性流体について考える。なお、以後使用する物理量はすべて、代表長さ L 、粒子の代表速さ c 、時間スケール $t_0 = L/U$ (U : 流れの代表速さ)、代表密度 ρ_0 、及び参照温度 T_0 を用いて無次元化したものとする。

Inamuro⁽¹⁴⁾によりLBMの拡張版として提案されたLKSは、高レイノルズ数領域での数値安定性の確保や、計算機メモリーの削減など、通常のLBMにおける幾つかの課題を克服した新しい数値計算手法として近年注目を集めている。LBM及びLKSの基本的な考え方は、次式のボルツマン方程式を空間 $\mathbf{x} \in \Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ (d : 空間次元) 及び時間 $t \in I[t^0, t^1] \subseteq \mathbb{R}_{\geq 0}$ に関して離散化することに帰着する。

$$\text{Sh} \frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f = Q(f) \quad \text{in } I \times \Omega \times \Xi \quad (1)$$

ここで、 $\text{Sh} = L/(t_0 c)$ はストローハル数を表す。式(1)は速度 $\boldsymbol{\xi} \in \Xi (= \mathbb{R}^d)$ で運動する仮想粒子の速度分布関数 $f = f(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\xi})$ に関する支配方程式であり、右辺の Q は仮想粒子

の衝突の効果を表す衝突演算子である。一般に、右辺の衝突項を厳密に計算することは難しいため、その近似モデルが幾つか提案されている。ここでは、その近似モデルとしてよく用いられる次のBGK衝突演算子を扱う。

$$Q(f) = -\frac{1}{\omega}(f - f^{\text{eq}}) \quad (2)$$

ここで、 f^{eq} は局所平衡分布関数、 ω は緩和時間であり、粒子が衝突してから次の衝突までに要する平均時間を表す。

LBMでは、空間 Ω を等間隔格子 $\Delta x \in \mathbb{R}_{>0}$ で分割した離散空間 Ω_h 、及び $\Delta t = \text{Sh} \Delta x$ を用いた時間幅 $I_h := \{t \in I : t = t_0 + k \Delta t, k \in \mathbb{N}\}$ のもとで、式(1)を次式のように離散化し、速度分布関数 $f_i(\mathbf{x}, t) = f(\mathbf{x}, t, \mathbf{c}_i)$ の時間発展を追跡する。

$$\tilde{f}_i(\mathbf{x}, t) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\omega} \{f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)\} \quad (3)$$

$$\tilde{f}_i(\mathbf{x}, t) = f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta x, t + \Delta t) \quad \text{in } I_h \times \Omega_h \times \Xi_h \quad (4)$$

ここで、 Ξ_h は $q \in \mathbb{N}$ 個の方向を持つ粒子速度 \mathbf{c}_i ($i = 1, 2, \dots, q$) で張られる速度空間を表し、前式は格子ボルツマン方程式と呼ばれる。 q は幾つかの提案されている格子気体モデルによって決定されるが、本研究では、図1に示す3次元15速度(3D15V)モデルを用いる。この速度モデルの粒子速度は次式で与えられる。

$$[\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2, \mathbf{c}_3, \mathbf{c}_4, \mathbf{c}_5, \mathbf{c}_6, \mathbf{c}_7, \mathbf{c}_8, \mathbf{c}_9, \mathbf{c}_{10}, \mathbf{c}_{11}, \mathbf{c}_{12}, \mathbf{c}_{13}, \mathbf{c}_{14}, \mathbf{c}_{15}] \\ = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \quad (5)$$

LBMの方法論を拡張したLKSでは、式(3)、(4)において、 $\omega = 1$ 、及び $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x$ と置き換えた次式について考える。

$$f_i(\mathbf{x}, t + \Delta t) = f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t) \quad (6)$$

ここで、巨視的な状態量である密度 ρ および流速 \mathbf{u} は次式で与えられる。

$$\rho(\mathbf{x}, t + \Delta t) = \sum_{i=1}^q f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t) \quad (7)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t + \Delta t) = \frac{1}{\rho(\mathbf{x}, t + \Delta t)} \sum_{i=1}^q \mathbf{c}_i f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t) \quad (8)$$

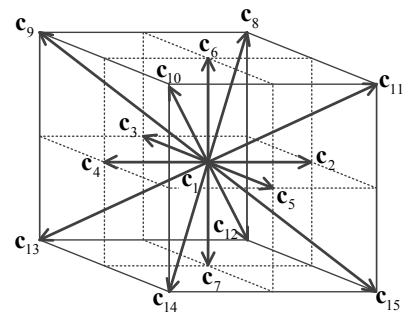


Fig. 1 3D15V model

また、圧力 p は通常の LBM と同様に次式で与えられる。

$$p = \frac{\rho}{3} \quad (9)$$

なお、局所平衡分布関数 f_i^{eq} は次のように定義される。

$$f_i^{\text{eq}} = w_i \rho \left\{ 1 + 3c_{i\beta} u_\beta + \frac{9}{2} c_{i\beta} c_{i\gamma} u_\beta u_\gamma - \frac{3}{2} u_\beta u_\beta \right. \\ \left. + A \Delta x \left(\frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\gamma} \right) c_{i\beta} c_{i\gamma} \right\} \quad (10)$$

ここで、 w_i は、 $w_1 = 2/9$ 、 $w_2 = \dots = w_7 = 1/9$ 、 $w_8 = \dots = w_{15} = 1/72$ である。下付き添字 $\beta, \gamma = x, y, z$ は、デカルト座標を表し総和規約に従うものとする。また、 $A = O(1)$ はパラメータであり、これにより動粘性係数は次式で与えられる。

$$\nu = \left(\frac{1}{6} - \frac{2}{9} A \right) \Delta x \quad (11)$$

式 (10) からわかるように、 f_i^{eq} は c_i と巨視的な状態量 ρ 及び \mathbf{u} のみによって決まる。したがって、式 (7), (8) を用いれば、速度分布関数 f_i を計算することなく ρ 及び \mathbf{u} を求めることができる。

3. 最適化問題の定式化

3.1. レベルセット法を用いた境界表現

固定された設計領域 D (以下、固定設計領域) において、流体が占める空間 $\Omega \subseteq D$ (以下、流体領域) と、その流体によって占められていない空間 $D \setminus \Omega$ (以下、物体領域)、及びそれらの境界 $\partial\Omega$ の表現方法について考える。レベルセット法では、図 2 に示すように、スカラー関数であるレベルセット関数 ϕ の零等位面によって、流体と物体間の境界 $\partial\Omega$ を表現する。すなわち、次式に示すように、流体領域において正、物体領域において負、それらの境界では零となるレベルセット関数を用いて境界を表現する。

$$\begin{cases} 0 < \phi(\mathbf{x}) \leq 1 & \text{if } \mathbf{x} \in \Omega \setminus \partial\Omega \\ \phi(\mathbf{x}) = 0 & \text{if } \mathbf{x} \in \partial\Omega \\ -1 \leq \phi(\mathbf{x}) < 0 & \text{if } \mathbf{x} \in D \setminus \Omega \end{cases} \quad (12)$$

ここでレベルセット関数に上限値と下限値を規定しているが、これは後述の目的汎関数に付加する仮想的な界面エネルギーをレベルセット関数によって表現するために必要となる⁽¹⁵⁾。なお、零等位面以外のレベルセット関数には任意性があるため、このような制約を設けても問題は生じないことを注記しておく。

続いて、前記のレベルセット関数 ϕ を用いて、式 (1) のボルツマン方程式を固定設計領域 D に拡張する方法について考える。ここで重要となるのが物体領域の表現方法であるが、本研究では次式の拡張された局所平衡分布関数 \hat{f}^{eq} を用いる。

$$\hat{f}^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u}, \chi_\phi) = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{d/2}} \left\{ \exp\left(-\frac{|\xi_\beta - \chi_\phi u_\beta|^2}{2RT}\right) \right. \\ \left. + A \Delta x \left(\frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\gamma} \right) \xi_\beta \xi_\gamma \right\} \quad (13)$$

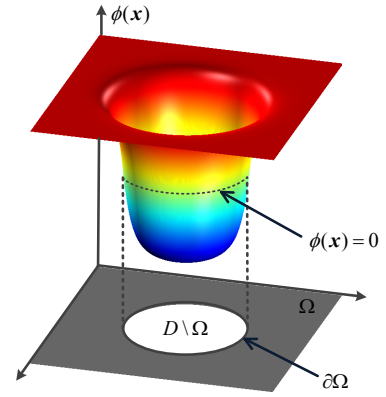


Fig. 2 Fixed design domain D and level set function ϕ

ここで、 R は気体定数、 T は温度を表し、式 (13) は連続系のボルツマン方程式における局所平衡分布関数である。また、 χ_ϕ は、レベルセット関数に依存した特性関数であり、次のように定義する。

$$\chi_\phi = \begin{cases} 1 & \text{if } \phi(\mathbf{x}) \geq 0 \\ 0 & \text{if } \phi(\mathbf{x}) < 0 \end{cases} \quad (14)$$

この特性関数を用いることで、 $\phi < 0$ を満たす領域では式 (13) の $\chi_\phi u_\beta$ の項が零となり、 $\int_{\Xi} \xi \hat{f}^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u}, 0) dv = 0$ が成立する。これは、気体分子運動論における流速の定義より、物体領域において流速が零であることを意味する。したがって、 \hat{f}^{eq} を用いることにより、式 (1) のボルツマン方程式が定義される空間を $I \times D \times \Xi$ に拡張して考えることができる。

3.2. 最適化問題

ここでは、LKS を用いたトポロジー最適化の基礎的な方法論を構築するために、内部流れにおける圧力損失最小化問題について考える。なお、設計感度を厳密に導出するために、著者ら⁽¹³⁾の先行研究に基づき連続系のボルツマン方程式によって最適化問題を定式化する。したがって、次に示すような目的汎関数 J の制約条件付き最小化問題を考える。

$$\inf_{\phi} J = \int_{\Gamma_{\text{in}}} p(t_1) d\Gamma - \int_{\Gamma_{\text{out}}} p(t_1) d\Gamma \quad (15)$$

$$\text{s.t. } G = \int_I \int_D \int_{\Xi} g \left\{ \text{Sh} \frac{\partial f}{\partial t} + \xi \cdot \nabla f \right. \\ \left. + \frac{1}{\omega} (f - \hat{f}^{\text{eq}}) \right\} dv d\Omega dt = 0 \quad (16)$$

$$V = \int_D \chi_\phi d\Omega - V_{\text{max}} \leq 0 \quad (17)$$

ここで、 J は $t = t_1$ の定常状態における流入口 Γ_{in} と流出口 Γ_{out} の圧力差を表す目的汎関数である。式 (16) はボルツマン方程式の弱形式であり、 $g = g(\mathbf{x}, t, \xi)$ はその試験関数とする。また、 V は体積制約に対する制約汎関数であり、 V_{max} は流体領域の面積もしくは体積の許容される最大値である。すなわち、本研究では時刻 t_0 から十分に時間が経過した定常状態のみに着目し、その時刻 t_1 での体積制約を考慮した圧力損失最小化問題を考える。

しかしながら、特性関数 χ_ϕ は可積分性のみを保証されたルベグ空間 $L^\infty(D)$ で与えられる関数であるため、解の収束性が保証されず、上記最適化問題は不適切問題となる。そこで、最適化問題の正則化の手続きを行うために、次の拡張目的汎関数 J_R の最小化問題として上記最適化問題を置き換える。

$$J_R = J + \int_D \frac{1}{2} \tau |\nabla \phi|^2 d\Omega \quad (18)$$

ここで右辺第二項はフェーズフィールド法における界面エネルギーを表し、 $\tau \in \mathbb{R}_{>0}$ はその大きさを与えるパラメータである。なお、正則化項はレベルセット関数の勾配の二乗和に比例し、境界及びその近傍でのみ非零の値を持つ。したがって、 τ の値を適切に設定することにより、最適構造の外形形状に対して陰的な周長制約を与えることが可能であり、この項を最小化することによって、過度に複雑な構造が除かれた最適構造を創成することができる。

続いて、上記最適化問題をラグランジェ未定乗数法を用いて、次の無制約問題に置き換える。

$$\inf_{\phi} \bar{J}_R = J_R + G + \lambda V \quad (19)$$

ここで、 \bar{J}_R はラグランジアン、 $\lambda \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ はラグランジェ未定乗数を表す。これより、上記の最適化問題に対する KKT (Karush-Kuhn-Tucker) 条件を導けば、次式となる。

$$\delta_\phi \bar{J}_R = 0, \quad G = 0, \quad \lambda V = 0, \quad \lambda \geq 0, \quad V \leq 0 \quad (20)$$

ここで、演算子 δ_ϕ は、 ϕ に関する変分を表す。前記の KKT 条件を満たすレベルセット関数が最適解の候補となるが、これらを満たすレベルセット関数を直接求めるのは困難である。そこで本研究では、レベルセット関数を時間発展させることで最適構造を創成する Yamada らの方法⁽¹⁵⁾を用いる。この方法では、仮想的な時間 ς および比例係数 $K \in \mathbb{R}_{>0}$ を導入し、次式によりレベルセット関数に関する時間発展方程式を定義する。

$$\frac{\partial \phi}{\partial \varsigma} = -K \delta_\phi \bar{J}_R = -K (\delta_\phi \bar{J} - \tau \nabla^2 \phi) \quad (21)$$

ここで、 $\bar{J} = J + G + \lambda V$ であり、式 (21) ではレベルセット関数の駆動力は、ラグランジアンの勾配に比例するものと仮定している。レベルセット法に基づく構造最適化手法では、通常はハミルトン・ヤコビ方程式によってレベルセット関数の更新を行い、距離関数としての性質を持つレベルセット関数を用いることで数値計算における解の精度を確保している。他方、本研究では式 (21) に示す反応拡散方程式に従いレベルセット関数を更新するため、距離関数としてのレベルセット関数を扱う必要性はないことを注記しておく。

3.3. 感度解析

ここでは、時間発展方程式 (21) を解くために必要となるラグランジアンの勾配の導出方法について述べる。

$$\delta \bar{J} = \delta_f J[f] + \delta_f G[f, g, \phi] + \delta_\phi G[f, g, \phi] + \lambda \delta_\phi V[\phi] \quad (22)$$

ここで、 $\delta_g G[f, g, \phi]$ に関しては、平衡方程式 $G = 0$ より任意の g に対して零となるため考慮する必要性はない。式 (22)

において、 f に対する勾配の項を直接算出するには膨大な計算コストを通常要するため、本研究では随伴変数法を用いて設計感度を導出する。すなわち、任意性のある g に対して次の随伴方程式を定義する。

$$\delta_f J[f] + \delta_f G[f, g, \phi] = 0 \quad (23)$$

Pingen ら⁽¹²⁾ の先行研究では、ボルツマン方程式を離散近似した式 (3) によって最適化問題を定式化しているため、設計感度を厳密に導出することができない。また、設計感度の導出に大規模な非対称行列を扱う必要性があり、複雑かつ大規模な流れ場を対象として最適化を行うことは、行列計算に要する計算コストの観点から困難といえる。これに対し著者ら⁽¹³⁾ は、設計感度を厳密に扱うためにボルツマン方程式によって最適化問題を定式化する方法を提案しており、この方法では設計感度の導出に行列計算を必要としない。そこで本研究では、この感度解析手法を LKS を用いた方法論へ拡張する。

著者らの提案する方法論に基づき、随伴方程式 (23) を次のように展開する。

$$\begin{aligned} & \delta_f J[f] + \delta_f G[f, g, \phi] \\ &= \int_{\Gamma_{\text{in}}} p[\delta f] d\Gamma - \int_{\Gamma_{\text{out}}} p[\delta f] d\Gamma \\ & \quad + \int_I \int_D \int_{\Xi} g \left\{ \text{Sh} \frac{\partial \delta f}{\partial t} + \xi \cdot \nabla \delta f \right. \\ & \quad \quad \left. + \frac{1}{\omega} (\delta f - \frac{\partial f^{\text{eq}}}{\partial f} \delta f) \right\} d\nu d\Omega dt \\ &= \int_{\Gamma_{\text{in}}} \int_{\Xi} \frac{1}{3} \delta f d\nu d\Gamma - \int_{\Gamma_{\text{out}}} \int_{\Xi} \frac{1}{3} d\nu \delta f d\Gamma \\ & \quad + \int_I \int_D \int_{\Xi} \left\{ -\text{Sh} \frac{\partial g}{\partial t} - \xi \cdot \nabla g \right. \\ & \quad \quad \left. + \frac{1}{\omega} (g - \hat{g}^{\text{eq}}) \right\} \delta f d\nu d\Omega dt \\ & \quad + \int_D \int_{\Xi} [g \delta f]_{t_0}^{t_1} d\nu d\Omega + \int_I \int_{\Gamma} \int_{\Xi} g \xi \cdot \mathbf{n} d\nu d\Gamma \quad (24) \end{aligned}$$

ここで、 Γ は固定設計領域 D の境界を表し、 \mathbf{n} はその境界から D の外部へ向く法線ベクトルである。

任意性のある g に対して、次のような随伴方程式を定義することで、式 (24) の右辺第三項を消去する。

$$-\text{Sh} \frac{\partial g}{\partial t} - \xi \cdot \nabla g = -\frac{1}{\omega} (g - \hat{g}^{\text{eq}}) \quad \text{in } I \times \Omega \times \Xi \quad (25)$$

ここで、 \hat{g}^{eq} は次式で与えられる。

$$\hat{g}^{\text{eq}} = \int_{\Xi} \frac{g(\xi_\beta)}{\rho RT} \left\{ \hat{f}^a + \frac{(\xi_\beta - \chi_\phi u_\beta)(\xi_\gamma - \chi_\phi u_\beta)}{RT} \hat{f}^{\text{eq}} \right\} d\bar{\nu} \quad (26)$$

式 (26) の $d\bar{\nu}$ は、 ξ_β によって張られる速度空間に対して積分操作を行うことを意味する。また、 \hat{f}^a は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} \hat{f}^a(\rho, \mathbf{u}, \chi_\phi) &= \frac{\rho}{(2\pi RT)^{d/2}} \left\{ \exp\left(-\frac{|\xi_\beta - \chi_\phi u_\beta|^2}{2RT}\right) \right. \\ & \quad \left. - \Delta x \left(\frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\gamma} \right) \xi_\beta \xi_\gamma \right\} \quad (27) \end{aligned}$$

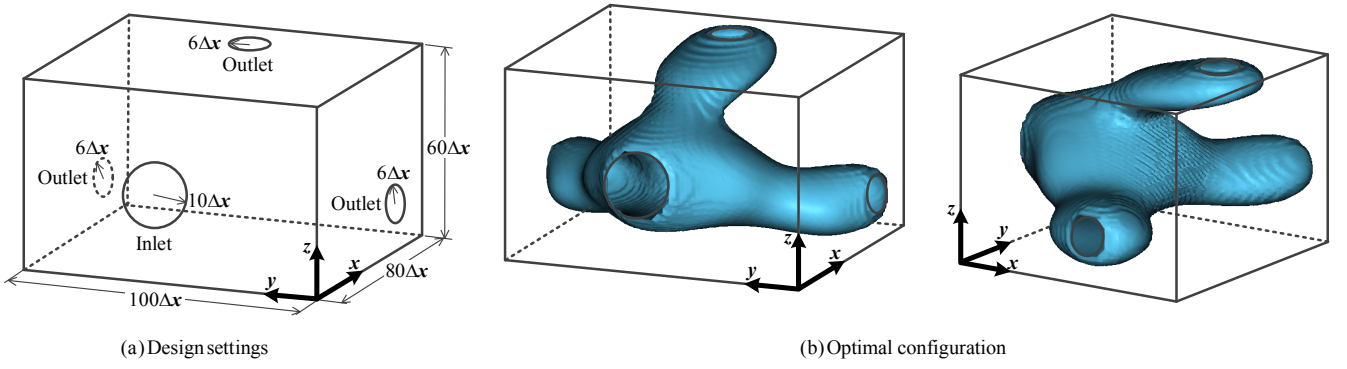


Fig. 3 Design settings and optimal configuration

なお、式 (24) の右辺における第三項以外の項は、随伴方程式の初期条件および境界条件に寄与する。これらの導出および \hat{g}^{eq} の具体的な導出方法に関しては、文献⁽¹³⁾を参照されたい。したがって、本最適化問題の設計感度であるラグランジアンの変分 $\delta_\phi \bar{J}$ は次式となる。

$$\begin{aligned} \delta_\phi \bar{J} &= \delta_\phi G[f, g, \phi] + \lambda \delta_\phi V[\phi] \\ &= \int_I \int_D \int_{\Xi} \frac{\partial f^{eq}}{\partial \phi} g \delta \phi dv d\Omega dt + \lambda \int_D \delta \phi d\Omega \\ &= \int_D \left\{ \int_I \int_{\Xi} \frac{(\boldsymbol{\xi} - \chi_\phi \mathbf{u}) \cdot \mathbf{u}}{RT} \hat{f}_i^{eq} g dv dt + \lambda \right\} \delta \phi d\Omega \quad (28) \end{aligned}$$

4. 数値実装法

4.1. 最適化アルゴリズム

次に、本研究における最適化アルゴリズムを示す。

1. 適当な初期構造を与えるために、レベルセット関数の初期値を設定する。
2. LKS により流れ場を定常状態になるまで計算する。
3. 目的汎関数が十分収束していれば計算を終了する。そうでない場合は随伴方程式 (25) を計算し、設計感度を用いて式 (32) の時間発展方程式に基づきレベルセット関数を更新する。なお、この時間発展方程式の数値計算には、先行研究⁽¹⁵⁾に基づき FEM を用いる。
4. 以後目的汎関数が十分に収束するまで 2 → 3 の操作を繰り返し行う。

4.2. 随伴方程式及び設計感度の離散化

ここでは、随伴方程式 (25)、および設計感度 (28) の離散化方法について述べる。

随伴方程式 (25) は、ボルツマン方程式 (1) と同様の式構造であるため、格子ボルツマン方程式と同様に次式のように離散化することができる。

$$\hat{g}_i(\mathbf{x}, t) = g_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\omega} \{g_i(\mathbf{x}, t) - \hat{g}_i^{eq}(\mathbf{x}, t)\} \quad (29)$$

$$\hat{g}_i(\mathbf{x}, t) = g_i(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t - \Delta t) \quad \text{in } I_h \times D_h \times \Xi_h \quad (30)$$

ここで、 \hat{g}_i^{eq} は式 (26) より次式で与えられる。

$$\hat{g}_i^{eq} = \sum_{j=1}^q \frac{3(\Delta x)^2 g_j}{\rho} \left\{ \hat{f}_j^a + 3(\Delta x)^2 (\mathbf{c}_i - \chi_\phi \mathbf{u}) (\mathbf{c}_j - \chi_\phi \mathbf{u}) \hat{f}_j^{eq} \right\} \quad (31)$$

ここで、 \hat{f}_i^{eq} 及び \hat{f}_i^a は式 (10) と同様の離散化式で与えられる。式 (29)–(31) により、格子ボルツマン方程式と同じく陽的に随伴変数 g_i の時間発展を追跡することができる。なお、随伴方程式では粒子の移流方向および時間発展方向が、格子ボルツマン方程式のそれらとは逆向きになることを注記しておく。

設計感度も同様に次式のように離散化可能であり、レベルセット関数の時間発展方程式 (21) は次式で与えられる。

$$\frac{\partial \phi}{\partial \varsigma} = -K \left\{ \sum_{i=1}^q 3(\Delta x)^2 \hat{f}_i^{eq} g_i \{ \mathbf{c}_i - \chi_\phi \mathbf{u} \} \cdot \mathbf{u} + \lambda - \tau \nabla^2 \phi \right\} \quad (32)$$

なお、式 (29)–(32) からわかるように、本手法では設計感度の導出に行列計算を必要としない。

5. 数値例

数値例により、本研究で提案する手法の妥当性を検討した。最適化に必要なパラメータとして、 $K = 1$ 、 $\tau = 5.0 \times 10^{-3}$ とした。そして、レベルセット関数の初期値を $\phi = 1$ に設定し、初期構造はすべて流体で満たされている状態として最適化を図った。FEM によってレベルセット関数を更新する際の有限要素は、アイソパラメトリック四辺形双一次要素を用いた。また、式 (32) を FEM に基づき離散化する際は、仮想時間 ς の更新幅を $\Delta \varsigma = 0.25$ とした。

本研究では、図 3(a) に示す三次元の流路設計問題に対して最適化を図った。体積の上限值 V_{\max} は固定設計領域 D の 20% とし、流入口の直径を代表長さとして、レイノルズ数を $Re = 20$ に設定した。設計領域は $100\Delta x \times 80\Delta x \times 60\Delta x$ で離散化した。

この問題における最適構造を図 3(b) に示す。得られた最適構造はグレースケールを含まない明瞭で角部のない滑らかな流路形状であることがわかった。また、流入口から各流出口に向けて直線的な流路形状となることがわかった。これ

は、圧力損失最小化問題においては、流路の壁面境界が可能な限り少ない流路形状が最適解として優位であるためと考えられる。これらのことから、本研究で提案する方法により、物理的に妥当な結果が得られることがわかった。

6. 結言

本研究ではレベルセット法による境界表現に基づき、LKSを用いたトポロジー最適化手法を提案した。本研究により得られた結果を以下に示す。

- (1) レベルセット法により境界表現を行いながら、流れ場の解析手法としてLKSを用いた場合について、内部流れの圧力損失最小化問題の定式化を行った。
- (2) 流れ場の平衡方程式をボルツマン方程式に基づき定式化することで、随伴方程式もボルツマン方程式に帰着して導出し、厳密に設計感度を導出する方法を構築した。
- (3) 随伴方程式を格子ボルツマン方程式と同様に離散化することで、随伴方程式を陽的に解く方法を構築した。これにより、行列計算を必要としない感度解析手法を構築した。さらに、この感度解析手法と最適化問題の定式化に基づき、最適化アルゴリズムを開発した。
- (4) 数値例により、本研究で提案する手法の妥当性を検討した。その結果、得られた結果はグレースケールを含まない明瞭な境界を有した最適構造であることがわかった。また、大規模な流れ場を対象とした三次元問題であっても物理的に妥当な最適構造を創成できることを示した。

7. 謝辞

本研究の一部は住友財団環境研究助成, JSPS 科研費 10346041, JSPS 科研費 25600158, JSPS 科研費 24760119 の支援を受けた。ここに記して謝意を表します。

参考文献

- (1) M.P. Bendsøe, N. Kikuchi: Generating Optimal Topologies in Structural Design Using a Homogenization Method, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **71**(1988), pp. 197–224.
- (2) T.E. Bruns: Topology Optimization of Convection-Dominated, Steady-State Heat Transfer Problems, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **50**(2007), pp. 2859–2873.
- (3) M. Otomori, T. Yamada, K. Izui, S. Nishiwaki, J. Andkjær: A Topology Optimization Method Based on the Level Set Method for the Design of Negative Permeability Dielectric Metamaterials, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **237-240**(2012), pp. 192–211.
- (4) T. Borrvall, J. Petersson: Topology Optimization of Fluids in Stokes Flow, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **41**(2003), pp. 77–107.
- (5) A.G. Hansen, O. Sigmund, R.B. Haber: Topology Optimization of Channel Flow Problem, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **30**(2005), pp. 181–192.
- (6) 矢地謙太郎, 山田崇恭, 久保世志, 泉井一浩, 西脇眞二: Oseen 流れにおけるレベルセット法に基づくトポロジー最適化, *計算数理工学論文集*, **12**(2012), pp. 7–12.
- (7) T. Kondoh, A. Matsumori, A. Kawamoto: Drag Minimization and Lift Maximization in Laminar Flows via Topology Optimization Employing Simple Objective Function Expressions Based on Body Force Integration, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **45**(2011), pp. 693–701.
- (8) T. Matsumori, T. Kondoh, A. Kawamoto, T. Nomura: Topology Optimization for Fluid-Thermal Interaction Problems Under Constant Input Power, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **47**(2013), pp. 571–581.
- (9) S. Chen, G.D. Doolen: Lattice Boltzmann Method for Fluid Flows, *Annual Reviews of Fluid Mechanics*, **30**(1998), pp. 329–364.
- (10) M.A.A. Spaid, F.R. Phelan: Lattice Boltzmann Methods for Modeling Microscale Flow in Fibrous Porous Media, *Physics of Fluids*, **9**(1997), pp. 2468–2474.
- (11) 吉野正人, 増田剛士: 格子ボルツマン法による水平二流体の界面成長シミュレーション, *計算数理工学論文集*, **5**(2005), pp. 79–82.
- (12) G. Pinggen, A. Evgrafov, K. Maute: Topology Optimization of Flow Domains Using the Lattice Boltzmann Method, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **34**(2007), pp. 507–524.
- (13) 矢地謙太郎, 山田崇恭, 吉野正人, 松本敏郎, 泉井一浩, 西脇眞二: 格子ボルツマン法を用いたレベルセット法に基づくトポロジー最適化, *日本機械学会論文集 C 編*, **79**(2013), pp. 2152–2163.
- (14) T. Inamuro: A Lattice Kinetic Scheme for Incompressible Viscous Flows with Heat Transfer, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A*, **360**(2002), pp. 477–484.
- (15) T. Yamada, K. Izui, S. Nishiwaki, A. Takezawa: A Topology Optimization Method Based on the Level Set Method Incorporating a Fictitious Interface Energy, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **199**(2010), pp. 2876–2891.