

# 計算数理工学論文集

第23巻

2023年11月

Transactions of the Japan Society for  
Computational Methods in Engineering

Volume 23, November 2023

JASCOME

日本計算数理工学会

2023年11月24日発行

計算数理工学論文集 第23巻  
編集委員会 (2023年11月)

委員長	松本敏郎 (名古屋大学大学院 工学研究科)
委員	阿部和久 (新潟大学 工学部)
〃	天谷賢治 (東京工業大学 工学院 システム制御系)
〃	荒井政大 (名古屋大学大学院 工学研究科)
〃	飯盛浩司 (慶應義塾大学 理工学部)
〃	磯祐介 (京都大学大学院 情報学研究科)
〃	井上裕嗣 (東京工業大学 工学院 機械系)
〃	植田毅 (東京慈恵会医科大学 医学部)
〃	遠藤龍司 (職業能力開発総合大学校)
〃	奥村大 (名古屋大学大学院 工学研究科)
〃	神谷恵輔 (愛知工業大学 工学部)
〃	岸本喜久雄 (東京工業大学)
〃	北栄輔 (名古屋大学大学院 情報学研究科)
〃	紅露一寛 (新潟大学大学院 自然科学研究科)
〃	斉藤隆泰 (群馬大学大学院 理工学府)
〃	杉野隆三郎 (阿南工業高等専門学校)
〃	瀬田剛 (富山大学 学術研究部工学系)
〃	高橋徹 (名古屋大学大学院 工学研究科)
〃	登坂宣好 (Material speaks iT-lab.)
〃	新納和樹 (京都大学大学院 情報学研究科)
〃	西村直志 (京都大学)
〃	長谷川弘治 (室蘭工業大学大学院 工学研究科)
〃	廣瀬壮一 (東京工業大学 環境・社会理工学院)
〃	藤原宏志 (京都大学大学院 情報学研究科)
〃	堀宗朗 (海洋研究開発機構 付加価値情報創生部門)
〃	丸山泰蔵 (愛媛大学 理工学研究科)
〃	山本昌宏 (東京大学大学院 数理科学研究科)
〃	吉川仁 (京都大学大学院 情報学研究科)
〃	吉田秀典 (香川大学 工学部)
〃	吉野正人 (信州大学 学術研究院 工学系)

本論文集は、計算数理工学シンポジウム 2023 (JASCOME Symposium 2023) で論文講演を行うために投稿された論文原稿 (5~12 ページ) を、論文集編集委員会委員を中心とする複数の校閲者により査読して掲載可と判定されたものを収録したものである。

日本計算数理工学会

〒464-8603 名古屋市千種区不老町  
名古屋大学大学院工学研究科 機械システム工学専攻 計算力学研究グループ 内  
日本計算数理工学会・事務局  
TEL: 052-789-2780  
FAX: 052-789-3123

(学会ホームページ) <http://www.matsumoto.nuem.nagoya-u.ac.jp/jascome/>

## 計算数理工学論文集 第 23 卷

### 目 次

論文番号	論文題目	著者	頁
01-231124	設計変数に依存する熱輻射境界条件を伴う熱伝導問題に対する成形用金型のトポロジー最適化 .....	小野寺 周也, 岡 大将, 山田 崇恭	1
02-231124	A mode reduction method used for calculating the frequency response and topological derivatives .....	Hao REN, Yi CUI, Toru TAKAHASHI, Toshiro MATSUMOTO	13
03-231124	境界積分方程式で記述される形状最適化問題における形状感度の Hilbert 正則化 .....	松島 慶, 山田 崇恭	21
04-231124	連成型仮想的物理モデルに基づく仮想的な異方性拡散方程式を用いた型成形における幾何学的制約付き最適設計 .....	田島 幹大, 山田 崇恭	29
05-231124	マイクロポーラ弾性体の考え方に基づいたスライダ-クランク機構のトポロジー最適化 .....	小夜 結利花, 山田 崇恭	39
06-231124	初期たわみと軸力変動が非線形 Winkler 基礎上はりの座屈特性に及ぼす影響 .....	阿部 和久, 浜崎 颯汰	49
07-231124	Density based sensitivity analysis of rarefied gas flows using the discrete velocity method .....	官 凱文, 山田 崇恭	59
08-231124	物質パラメータ比が比較的大きな transmission 問題における 2 次元 Helmholtz 方程式の高速直接解法に適する積分方程式の考察 .....	松本 安弘	71

09-231124	A generalized exact volume constraint method for the topology optimization based on the nonlinear reaction-diffusion equation ..... Yi CUI, Sungmin YOON, Shaojie GUI, Toru TAKAHASHI, Toshiro MATSUMOTO	81
11-231124	境界要素法と摂動法を用いた開領域の固有周波数の加振問題への応用 ..... 丸山 泰蔵, 杉田 直広	93
13-231124	弾性体の界面剥離による平面波の散乱解析に対するメッシュフリー型解析手法の開発 ..... 古川 陽	99
15-231124	複数車両を参照する数理モデルによる交差点を左折する車両隊列シミュレーション ..... 坂本 浩規, 玉城 龍洋, 北 栄輔	109
16-231124	A fast skeletonisation of 2D objects using a generalised double-layer potential and the $\mathcal{H}$ -matrix method ..... Hiroshi ISAKARI	115
17-231124	ノンレシプロカルゲルの円筒押し込み大変形解析 ..... 野々垣 翔真, 松原 成志朗, 永島 壮, 奥村 大	123
18-231124	トポロジー導関数を用いた3次元スカラー波動散乱場のクラック決定解析 ..... 吉川 仁, 林 正磨	129
19-231124	均質化解析によるノンレシプロカルゲルの引張・圧縮非対称性評価 ..... 布施 卓馬, 松原 成志朗, 永島 壮, 奥村 大	137
20-231124	クリースの発達過程に対する影響因子の調査 ..... 石田 竜也, 永島 壮, 松原 成志朗, 奥村 大	143
21-231124	1次元熱方程式に対する有限要素法における Hilbert 変換と基底関数の拡張を用いた安定化について ..... 新納 和樹, 竹内 祐介	149

# 設計変数に依存する熱輻射境界条件を伴う 熱伝導問題に対する成形用金型のトポロジー最適化

## TOPOLOGY OPTIMIZATION OF FORMING MOLDS FOR THERMAL CONDUCTIVITY PROBLEMS WITH THERMAL RADIATION BOUNDARY CONDITIONS DEPENDING ON DESIGN VARIABLES

小野寺 周也<sup>1)</sup>, 岡 大将<sup>2)</sup>, 山田 崇恭<sup>3)</sup>

Shuya ONODERA, Tomoyuki OKA and Takayuki YAMADA

- 1) 東京大学大学院工学系研究科 (〒 113-8656 東京都文京区弥生 2-11-16, E-mail: shuya-onodera@g.ecc.u-tokyo.ac.jp)  
2) 東京大学大学院工学系研究科 (〒 113-8656 東京都文京区弥生 2-11-16, E-mail: tomoyuki-oka@g.ecc.u-tokyo.ac.jp)  
3) 東京大学大学院工学系研究科 (〒 113-8656 東京都文京区弥生 2-11-16, E-mail: t.yamada@mech.t.u-tokyo.ac.jp)

This paper presents a method for topology optimization that incorporates thermal radiation boundary conditions dependent on design variables. The design of mechanical structures involving thermal radiation is briefly described, along with the associated problems. We consider thermal radiation boundary conditions on partial boundaries of material domains that vary with design variables. During the optimization process, Partial Differential Equations (PDEs) expressing geometric features with high thermal radiation is introduced, and solutions are employed to numerically extract the boundaries. Therefore, a mathematical model is formulated to approximate the view factor, which relates the contribution of macro geometry to thermal radiation. Furthermore, a method for solving the governing equations is developed, leveraging the proposed method. Although we deal with nonlinear problems due to thermal radiation boundary conditions, the design sensitivity concerning the direction of descent of the objective functional can be determined by identifying the adjoint equations as in linear problems. In this study, the Finite Element Method (FEM) is used to solve PDEs of the heat transfer problem, and the level set functions are updated. Numerical examples in two and three dimensions are presented to verify the effectiveness and practicality of the proposed method.

**Key Words**: Partial differential equation, Optimized design, Topology optimization, Level set method, Thermal radiation problem

### 1. 緒言

工業炉や宇宙機などの熱輻射による熱伝達の影響が大きい環境で使用される機械構造物の機械的性能は温度による影響を大きく受ける。そのため、設計者は部品表面や内部における温度分布が適切になるように機械構造物を設計する必要がある。機械構造物の設計過程は、構想設計、基本設計、詳細設計の3つに分けられる。まず、構想設計では仕様を満たす構造案が比較検討され、製品ライフサイクルコストの大部分

が決定される。次に、基本設計では構想設計で検討した構造に対して、組立図の作成や詳細な解析が行われる。そして、詳細設計では構造物の製作するための部品図が作られる。現在は製品の少量多品種化が進み、設計者は構想設計を短時間で行う必要性が高まっている。しかしながら、要求される設計基準が緻密になるほど、短時間で素性の良い構想設計案を見出すことが難しい。このような設計課題を解決するために、熱輻射を適切に考慮可能な数値モデルや数値解析手法の研究が多数報告されている。例えば、燃焼プロセス内での輻射熱伝達の数値モデルに関する研究<sup>(1)</sup>や、溶融ガラス表

面からの熱輻射を表現する数値モデルに関する研究<sup>(2)</sup>がある。さらに、熱輻射を考慮した数値解析に基づくガラス徐冷炉の熱設計法<sup>(3)</sup>が提案されているが、熱輻射条件の数値解析アルゴリズムの計算コストが高く、複数の設計案を短時間で解析して比較検討することが難しい。Furkanら<sup>(4)</sup>は、計算コストが高い熱輻射条件の評価において、形態係数の近似解析法を提案している。しかしながら、いずれの方法においても、熱輻射条件を考慮しながら所望の熱伝導特性を持つ形状設計法の提案には至っていない。

他方、設計者の経験や力学的考察による試行錯誤に頼らずに、数学と力学的根拠に立脚して自動的に形状設計案を創出する方法論があり、構造最適化と呼ばれている。構造最適化は設計課題に対して要求される物理特性を最大化、あるいは最小化する形状を自動的に設計する方法論であり、設計自由度の観点から、寸法最適化、形状最適化、トポロジー最適化の3つに大別される。中でも、トポロジー最適化は最も設計自由度の高い構造最適化法として注目を集めている。そこで、構想設計にトポロジー最適化を導入することで短時間で素性の良い設計案を創出できる可能性が高いと考えられる。構造問題への展開方法の報告<sup>(5)</sup>を起点として、電磁波問題<sup>(6,7)</sup>、音響問題<sup>(8,9)</sup>など数多くの設計問題への展開が報告されている。

熱伝導問題においては、トポロジー最適化の研究の初期から報告例が多く、主に熱コンプライアンス最小化問題への適用例が多い。Allaireら<sup>(10)</sup>やHaslingerら<sup>(11)</sup>は2材料の分布問題に対して緩和問題における適切性とその数値解析手法について述べている。そして、Gersborgら<sup>(12)</sup>は有限体積法を用いた方法論を提案している。近年の報告例としては、材料定数に温度依存性を持つ熱伝導問題<sup>(13)</sup>、複数材料の熱拡散最大化<sup>(14)</sup>が挙げられる。これらの報告例の多くは、均質化設計法や密度法に基づく方法論である。そのため、これらの方法論では、構造と空孔の中間状態を表現するグレースケールを含む構造を許容し、構造と空孔の境界を定義できない課題を持つ。その結果、構造と空孔の境界上において、陽に境界条件を与える必要がある熱輻射条件を含む設計問題に直接適用することが困難である。

このような課題を本能的に解決する手段として、レベルセット法<sup>(15)</sup>に基づく形状最適化<sup>(16)</sup>もしくはトポロジー最適化<sup>(17,18)</sup>等を適用する方法が提案されている。レベルセット法に基づく方法では、レベルセット関数と呼ばれるスカラー関数の等位面により境界形状を表現するため、明瞭な境界形状を定義できる特徴を有する。そのため、陽に境界条件に与える必要がある熱伝導境界条件を含む設計問題への適用が可能<sup>(19,20)</sup>になる。しかしながら、先行研究においては、いずれも設計変数に依存するが、一様な係数を持つ境界条件を前提とする設計法の提案である。そのため、係数が設計変数に影響を受けるような熱輻射条件を含む設計問題への展開ができない。

そこで、本研究では、構想設計に適用可能な、熱輻射条件

を含む熱伝導問題に対するトポロジー最適化法を構築し、熱輻射による熱伝達を考慮可能な最適設計法を提案する。一般に、トポロジー最適化は、熱輻射条件のように構造の幾何学的特徴を考慮することが困難である。本研究では、幾何学的特徴を考慮したトポロジー最適化法<sup>(21)</sup>の考え方をを用いる。この考え方は、熱伝導方程式や弾性方程式による力学的特徴の評価と同様に、仮想的な偏微分方程式を用いて幾何学的特徴を評価する方法である。これまでに、積層造形の幾何学的要件を考慮した設計法<sup>(22)</sup>、型成形における型抜き方向を考慮した設計法<sup>(23)</sup>、部材の局所厚み制約を満たす研究<sup>(24)</sup>が挙げられる。計算コストが低い仮想的な偏微分方程式に基づいて境界条件を決定し、熱輻射境界条件を伴う熱伝導問題を解くことができれば、トポロジー最適化を構想設計段階において適用できる可能性が高まると考えられる。

以下、本論文の構成について述べる。2章では、熱輻射を伴う機械構造物の熱設計問題の定式化について述べる。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について概略を述べる。4章では、体積制約を考慮した温度分布最小化問題を定式化する。5章では、熱輻射境界の近似解法を提案する。6章では、トポロジー最適化アルゴリズムと具体的な数値実装法について提案する。7章では、数値解析例により、本研究で提案する方法論の妥当性と有効性の検証を行う。

## 2. 熱輻射を伴う機械構造物の熱設計問題の定式化

物体間の伝熱は熱伝導、対流熱伝達、熱輻射の3つの形態がある。流体の影響が小さい高温環境下では、熱輻射による熱伝達が支配的となる。本研究では、熱輻射が支配的な環境下における機械構造物の形状設計問題について考察する。熱輻射が支配的な機械構造物の例として工業炉や宇宙炉が挙げられる。これらの機械構造物においては、温度分布や変形量の最小化、放熱最大化などの設計課題がある。上記の設計を行う場合、輻射率、形態係数、物体間の温度差を適切に考慮する必要がある。この内、輻射率は材質やマイクロ構造、形態係数はマクロ構造により決定される。また、マクロ構造は幾何学的特徴により評価することができ、適切な幾何学的特徴を持つ機械構造物を設計することが重要である。そこで、本研究では、構想設計において熱輻射影響が支配的な形状設計問題を扱うため、特に形態係数に着目した設計法について述べる。なお、設計論の構築として応用範囲の広い工業炉を対象として議論を行うが、最適化対象と周囲構造物の温度差が大きく、熱輻射影響が支配的な機械構造物の設計問題に対して、広く展開可能であることを注記する。

### 2.1. 工業炉の熱設計問題

工業炉には熱処理炉、焼成炉、成形炉などがあり、加熱対象物を断熱壁で囲む構造が一般的である。熱処理炉や焼成炉では製品となる対象物を炉内に配置し、周囲の熱源で温度を制御する。一方、成形炉では型などの加熱対象物を温度制御し、その型を通じて製品となる樹脂やガラスの温度を間接的に制御する。工業炉において問題設定や定式化の考え方は共

通しており、温度制御が重要である。

本論文では、図1に示すような成形炉の型を対象として取り扱う。成形炉は型 (Mold)、ヒーター (Heater)、断熱材 (Insulation) で構成される。ヒーターと型が接触する面は、加熱面と呼ばれる。型の上には成形対象物 (Object)、例えばガラスなどが配置される。ここで、加熱源となるヒーターと成形対象物の位置は規定されるものとする。成形対象物と型が接触する面は成形面と呼ばれ、成形面の温度分布は製品の品質に大きな影響を及ぼす。そのため、成形面の目標温度と実温度の差異を最小化することは成形炉の設計における重要な課題である。例えば、成形面内における温度勾配は、成形対象がガラスの場合、成形される製品が歪む欠点の原因になる。

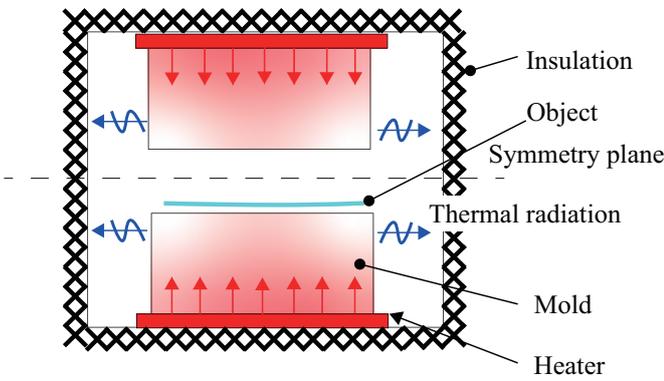


Fig. 1: Diagram of molding furnace model.

## 2.2. 支配方程式

成形炉の設計において、ヒーターや断熱材の形状は規定され、変更する余地が少ない場合が多い。そこで、本研究では調整可能な要素である型の形状設計に焦点を当てる。この場合、型内部の熱伝導問題を考える必要がある。ここで、型は熱伝導率が均質な等方性線形弾性体で構成されると仮定し、定常状態について考える。構造により占められている領域 (以下、構造領域) を  $\Omega_1 \subset \mathbb{R}^d$ 、空間次元  $d = 2, 3$  とし、加熱面  $\Gamma_t$  において温度  $T_t$  で温度規定し、側面  $\Gamma_h$  において熱輻射境界条件が適用され、周囲構造の参照温度  $T_{amb}$  が与えられるものとする。既定の形状に対して順問題を解く場合、型内部の温度場に対する支配方程式は次のようになる。

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(\kappa \nabla T) = 0 & \text{in } \Omega_1, \\ T = T_t & \text{on } \Gamma_t, \\ -\kappa \nabla T \cdot n = 0 & \text{on } \Gamma_o, \\ -\kappa \nabla T \cdot n = g(T) & \text{on } \Gamma_h. \end{cases} \quad (1)$$

ここで、 $T \in H^1(\Omega_1)$  は温度、 $\kappa$  は熱伝導率、 $n$  は外向き単位法線ベクトルを表す。熱輻射境界条件  $g(T)$  は  $g(T) = \sigma_s \varepsilon_e F (T^{d+1} - T_{amb}^{d+1})$  であり、 $\sigma_s$  はステファンボルツマン定数、 $\varepsilon_e$  は輻射率、 $F$  は形態係数とする。以降、熱輻射に関する係数をまとめて、 $h = \sigma_s \varepsilon_e F$  として表す。また、成形炉で

は上下の型が対称に配置され、型の形状および温度が同一であるため、対称境界条件として成形面  $\Gamma_o$  は断熱境界条件としている。

## 3. レベルセット法に基づくトポロジー最適化

支配方程式を設計の対象とする構造物が配置し得る領域 (以降、固定設計領域)  $D$  に拡張して、構造領域  $\Omega_1$  の構造最適化について考える。固定設計領域  $D$  は構造領域  $\Omega_1$  および、物体により占められていない領域 (以下、空孔領域)  $\Omega_0$  により構成される。構造最適化問題は、目的汎関数  $J$  を最大化あるいは最小化する構造領域  $\Omega_1$  の集合 (以降、形状) を求める問題であり、目的汎関数は一般的な物体の物理特性、例えば剛性、熱伝導特性などを考慮することが多い。そのため、構造最適化問題は、物理特性を表現する支配方程式を満たすことを前提として最適な形状を求める問題と言える。特に、レベルセット法に基づくトポロジー最適化問題では次のような最小化問題として定式化される。

$$\inf_{\phi \in \mathcal{U}_{ad}} \left\{ J(\phi) := \int_D j_1(x, \chi_\phi, u_\phi, \nabla u_\phi) dx + \int_{\partial D} j_2(x, u_\phi, \nabla u_\phi) d\sigma \right\}. \quad (2)$$

ここで、 $\mathcal{U}_{ad} \subset H^1(D; [-1, 1])$  は制約条件を満たす関数空間を表す。また、レベルセット関数  $\phi \in H^1(D)$  及び、 $\chi_\phi \in L^\infty(D; \{0, 1\})$  は

$$\phi(x) \begin{cases} < 0, & x \in \Omega_0, \\ = 0, & x \in \partial\Omega_0 \cap \partial\Omega_1, \\ > 0, & x \in \Omega_1, \end{cases} \quad (3)$$

$$\chi_\phi(x) = \begin{cases} 1 & \text{if } \phi(x) \geq 0, \\ 0 & \text{if } \phi(x) < 0 \end{cases} \quad (4)$$

として与えられるものとする。なお、 $u_\phi$  は状態変数、 $j_i(u_\phi)$  ( $i = 1, 2$ ) は所望の目的汎関数を表現する関数を表す。トポロジー最適化問題では、特性関数  $\chi_\phi \in L^\infty(D; \{0, 1\})$  を用いて形状表現を行うため、 $\Omega_1$  のトポロジーの変更が許容される。本研究では、最適化された構造を探索する過程を、式 (5) の反応拡散方程式に基づいたレベルセット関数  $\phi$  の時間発展問題として扱う。

$$\partial_t \phi - \tau \Delta \phi + J'(\phi) = 0 \quad \text{in } D \times (0, +\infty). \quad (5)$$

ただし、 $\tau > 0$  は得られる形状設計解の幾何学的複雑さを制御する正則化パラメータ (以降、正則化係数) を表す。詳細については文献 (18, 25) を参照されたい。

## 4. 最適設計問題の定式化

本研究では、型の形状設計について扱う。型を設計可能な固定設計領域  $D$  内において、構造領域  $\Omega_1$  のトポロジー最適化問題を考える。成形面  $\Gamma_o$  および加熱面  $\Gamma_t$  は固定設計領域の境界  $\partial D$  に設定される。熱輻射境界  $\Gamma_h$  は、固定設計領

域内部における構造領域の境界  $\partial\Omega_1$  の中で、熱輻射の寄与度が大きい境界 (以降、 $\Gamma_h(\phi)$ ) に設定される。構造が変化する毎に境界条件の位置も変化するため、 $\Gamma_h(\phi)$  は設計変数であるレベルセット関数の値に依存して決定される境界条件となる。

次に、目的汎関数を定式化する。前述のように、型の成形面における温度分布が成形物の品質に大きな影響を与えるため、型の形状設計問題は、成形面の温度分布規定問題として次のように定式化する。

$$\begin{aligned} & \inf_{\phi \in H^1(D; [-1, 1])} \left\{ J(\phi) := \int_{\Gamma_0} (T_\phi(x) - \tilde{T})^2 d\sigma \right\} \\ & \text{subject to } G(\phi) = \int_D \chi_\phi(x) dx - G_{\max} \leq 0. \end{aligned} \quad (6)$$

ここで、成形面  $\Gamma_0$  における目標温度を  $\tilde{T}$  とし、 $T_\phi$  は  $\phi$  を固定した際の式 (1) の解とする。そして許容される体積の上限値を  $G_{\max}$  で表す。型の熱容量が小さいほど、非定常加熱時に必要な加熱量は少ないため、体積制約  $G(\phi)$  を用いて熱容量を一定以下に抑える制約を負荷している。

## 5. 熱輻射境界の近似解法

熱輻射を考慮した熱伝導問題のトポロジー最適化において、熱輻射境界条件の適切な考慮が重要である。一般的な熱輻射問題<sup>(26)</sup>を解く場合、モンテカルロ法やヘミキューブ法を用いて計算することが多い。しかしながら、オイラー座標系による形状表現の場合、形状変更の度に逐次要素分割が必要となるため、計算コストが高い。そのため、トポロジー最適化を利用した構想設計において、実用的な時間で設計案を得ることが困難である。そこで、熱輻射境界の数値計算において計算コストを削減できる形態係数の近似解法を提案する。

### 5.1. 熱輻射境界条件に関する幾何学的特徴を評価する数理モデルの定式化

形態係数は熱を授受する2面間の幾何学的位置関係を表現している。本研究では、幾何学的特徴に着目し、簡易的に幾何学的特徴を評価する数理モデルを提案する。熱伝達問題に関する先行研究<sup>(19, 20)</sup>では、固定設計領域内部の構造境界な一律で条件を付与しているが、本研究では固定設計領域内部の構造境界を2通りに区別して取り扱う。具体的には、熱輻射における形態係数の数理モデルを提案し、形態係数の大小を区別した境界条件とする。

まず、形態係数の近似方法を定義する。モンテカルロ法などを用いて形態係数を計算する場合、輻射熱量を分割して独立した放射光子と見なし、光子の挙動について乱数を用いて解析し、放射熱の到達率を得る。本研究では、光子の放射方向を任意の座標軸並行になるように近似することで計算コストを削減する。特に、本研究では固定設計領域内に存在する構造間の温度差よりも、構造と周囲との温度差が大きいため、設計領域内部における構造間の熱輻射計算は無視できると仮定する。図2(a)に示す型形状を考える場合は、(a)の青線がレベルセット関数のゼロ等位面であり、構造境界  $\partial\Omega_1$

である。そして、構造領域  $\Omega_1$  内部で閉じた境界や、周囲構造がある  $\Gamma_{\text{amb}}$  に面していない領域は熱輻射寄与度が小さいと判断する。そのため、(b)において赤線が抽出する対象となる。このような境界を抽出するためには、(c)で示すスカラー場を有する仮想的な支配方程式を定式化し、赤線で示す境界を判別できれば良い。本研究では、領域全体に仮想的な熱が生じ、 $\Gamma_{\text{amb}}$  ではディリクレ境界が付与される問題を考える。ここでは、空洞領域  $\Omega_0$  には、構造領域  $\Omega_1$  と比較して大きな拡散係数を与える。そして、空洞領域  $\Omega_0$  における拡散係数の指向性を考慮することで、輻射方向を表現できる。その結果、周囲構造  $\Gamma_{\text{amb}}$  に連結し、面する空洞領域  $\Omega_0$  では、スカラー値が0となり、(c)における白色領域を表現でき、構造領域  $\Omega_1$  及び周囲構造  $\Gamma_{\text{amb}}$  に面しない空洞領域  $\Omega_0$  では、スカラー値が1となり、(c)における青色領域を表現できると考える。

このような条件を満たす仮想的な場  $p_\phi$  を与える偏微分方程式を式 (7) に示す。

$$\begin{cases} -\text{div}(A_\phi \nabla p_\phi) + p_\phi = 1 & \text{in } D, \\ p_\phi = 0 & \text{on } \Gamma_{\text{amb}}, \\ \nabla p_\phi \cdot n = 0 & \text{on } \partial D \setminus \Gamma_{\text{amb}}. \end{cases} \quad (7)$$

ここで、 $A_\phi := (a_{ij} - \varepsilon)(1 - \chi_\phi) + \varepsilon$  とする。座標軸方向  $i, j = 1, 2, 3$  において、 $a_{ij}$  は空孔領域における  $x_{ij}$  方向の拡散係数、 $\varepsilon$  は構造領域の拡散係数を表す。本論文全体を通じて、式 (7) を境界抽出方程式と呼ぶ。式 (7) の解  $p_\phi$  は熱輻射境界より内部で  $p_\phi = 1$  となり  $\Gamma_{\text{amb}}$  上で  $p_\phi = 0$  となるような数値的に滑らかな関数であり、熱輻射寄与の大きい境界において勾配を持つため、その値域に注目して境界抽出を行う。抽出した領域のみ形態係数  $F = 1$  とし、それ以外の領域は周囲構造と対面せず、熱の授受が生じないため断熱境界条件としている。本研究では、熱輻射境界を付与する  $\Gamma_h(\phi)$  と比較して周囲構造が大きく、かつ周囲構造の輻射面は座標軸に平行であり、生成される構造の境界も概ね座標軸に平行であると仮定する。なお、基本設計以降においては、本手法で抽出した境界上で、モンテカルロ法を適用することにより精度の高い計算が期待できると考える。

## 6. 数値実装法

### 6.1. 最適化アルゴリズム

本研究では、次に示すアルゴリズムに従って最適化を行う。

- ステップ 1.** 初期レベルセット関数  $\phi_0$  を付与する。
- ステップ 2.** 有限要素法を用いて境界抽出方程式 (7) を計算し、 $p_\phi$  の値域から熱輻射境界  $\Gamma_h(\phi)$  を抽出する。
- ステップ 3.** 有限要素法を用いて支配方程式 (8) を計算し、状態変数  $T_\phi$  を求める。
- ステップ 4.** 目的汎関数  $J(\phi)$  及び体積制約汎関数  $G(\phi)$  を計算し、収束条件を満たせば最適化を終了する。ここで、体積制約汎関数  $G(\phi)$  は拡張ラグランジュ未定乗数法を用いて無制約最適化問題に置き換えて更新を行う。

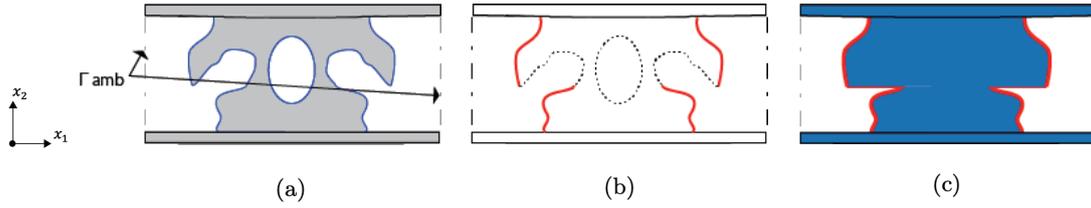


Fig.2: Image of two-dimensional boundary extraction. (a) Material distribution. (b) Boundaries with large contribution of thermal radiation. (c) Solution  $p_\phi$ .

**ステップ 5.** 有限要素法を用いて随伴方程式 (9) を計算し、状態変数  $T_\phi$  に対する随伴変数を  $S_\phi$  として設計感度  $J'(\phi)$  を求める。

**ステップ 6.** 反応拡散方程式 (5) を用いてレベルセット関数  $\phi$  を更新し、ステップ 2 に戻る。

式 (5) を解くにあたり、 $\partial_t \phi = \{\phi(x, (i+1)\Delta t) - \phi(x, i\Delta t)\} / \Delta t$ 、として時間差分を取る。ただし、 $i \in \mathbb{N} \cup \{0\}$  として扱い、 $\Delta t = 0.25$  とする。

以上の手続きにより最適化された構造の候補を与える  $\Omega_1 = [\chi = 1]$  が得られる。なお、最適化における有限要素解析には汎用有限要素解析ソフトウェア FreeFEM++<sup>(27)</sup>、境界抽出方程式の数値実験には汎用有限要素解析ソフトウェア COMSOL を用いている。また、使用するソフトウェアに制約はないことを注記する。

## 6.2. 感度解析

本研究で扱う熱伝導問題の支配方程式を固定設計領域  $D$  に拡張すると以下ようになる。

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(\kappa_\phi \nabla T_\phi) = 0 & \text{in } D, \\ T_\phi = T_t & \text{on } \Gamma_t, \\ -\kappa_\phi \nabla T_\phi \cdot n = 0 & \text{on } \Gamma_o, \\ -\kappa_\phi \nabla T_\phi \cdot n = g(T_\phi) & \text{on } \Gamma_h(\phi). \end{cases} \quad (8)$$

ここで、熱伝導率  $\kappa_\phi$  は、 $\kappa_\phi = \alpha\chi_\phi + \beta(1 - \chi_\phi)$  である。なお、構造領域  $\Omega_1$  の熱伝導率  $\alpha$ 、空洞領域  $\Omega_0$  の熱伝導  $\beta$  は  $\alpha > \beta > 0$  の大小関係を持つ。本研究では、随伴変数法を用いて感度解析を行う。随伴変数  $S_\phi$  は、以下の随伴方程式を満たす。

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(\kappa_\phi \nabla S_\phi) = 0 & \text{in } D, \\ S_\phi = 0 & \text{on } \Gamma_t, \\ -\kappa_\phi \nabla S_\phi \cdot n = -2(T_\phi - \tilde{T}) & \text{on } \Gamma_o, \\ -\kappa_\phi \nabla S_\phi \cdot n = g'(T_\phi)S_\phi & \text{on } \Gamma_h(\phi). \end{cases} \quad (9)$$

以上より、

$$J'(\phi) \approx -\chi_\phi \nabla T_\phi \cdot \nabla S_\phi \quad (10)$$

として近似設計感度が構成される。感度の導出過程は付録を参照頂きたい。

## 6.3. オイラー座標系に基づく近似解法

構造領域  $\Omega_1$  の形状はオイラー座標系により表現されており、最適化の過程における反復計算毎に、有限要素の生

成が必要となる。計算コストの観点から、Ersatz material approach<sup>(16)</sup> による近似解法を適用する。すなわち、空洞領域  $\Omega_0$  は相対的に小さい熱伝導率を持つ構造材料と仮定し、その界面近傍では滑らかに分布する材料特性を持つと仮定する。具体的には、有限要素解析において、次に示す拡張した熱伝導率

$$\begin{aligned} \kappa_\phi(x) &= \alpha \tilde{H}(\phi(x)) + \beta(1 - \tilde{H}(\phi(x))) \\ &= \begin{cases} \alpha, & x \in \Omega_1, \\ \beta, & x \in \Omega_0 \end{cases} \end{aligned} \quad (11)$$

を用いて温度場に対する支配方程式を固定設計領域 に対して拡張する。ここで、

ヘビサイド関数は以下の式 (12) を用いる。

$$\begin{aligned} \tilde{H}(\phi) &:= \begin{cases} 0 & \text{if } \phi < -\epsilon_u, \\ \frac{1}{2} + \left(\frac{15}{16}\phi - \frac{5}{8}\phi^3 + \frac{3}{16}\phi^5\right) & \text{if } -\epsilon_u \leq \phi \leq \epsilon_u, \\ 1 & \text{if } \epsilon_u < \phi. \end{cases} \end{aligned} \quad (12)$$

ただし、 $\epsilon_u$  は近似ヘビサイド関数  $\tilde{H}$  の遷移幅を与える微小パラメータである。

## 6.4. 状態方程式と随伴方程式の近似解法

本研究では、式 (7) に基づいて境界条件を付与し、近似的な数値解析を行う。固定設計領域  $D$  の内部に熱輻射境界条件を与える場合は  $p_\phi$  の分布に合わせて境界を与える。この方法の基本的な考え方は、以下の式 (13) に示すように、ディラックのデルタ関数  $\delta_{p=y}(p_\phi)$  を用いて、境界積分を固定設計領域における領域積分への置き換えに基づく。

$$\int_{\Gamma_h(\phi)} \xi(x) d\sigma = \int_D \xi(x) \delta_{p=y}(p_\phi) dx \quad \text{for } \xi \in L^1(\bar{D}). \quad (13)$$

また、デルタ関数の中央値は  $y = (p_l + p_u)/2$ 、閾値は  $p_l, p_u$  とする。ここで、先行研究<sup>(28)</sup> より、

$$\delta_{p=y}(p_\phi) = \nabla H(p_\phi) \cdot N \quad (14)$$

として表現し、 $N$  は  $\Gamma_h(\phi)$  上の外向き法線ベクトルを表す。そして、 $H(p_\phi)$  は、以下の式 (15) に示すように、 $p_\phi < p_l$  の領域で正の微小値  $\epsilon_h > 0$ 、 $p_u < p_\phi$  の領域で 1 をとり、 $p_l$  から  $p_u$  の区間  $[p_l < p_\phi < p_u]$  において連続的に分布する、近

似されたヘビサイド関数である。

$$H(p_\phi) := \begin{cases} \epsilon_h & \text{if } p_\phi < p_l, \\ \frac{1}{2} + \left(\frac{15}{16}p_\phi - \frac{5}{8}p_\phi^3 + \frac{3}{16}p_\phi^5\right) & \text{if } p_l \leq p_\phi \leq p_u, \\ 1 & \text{if } p_u < p_\phi. \end{cases} \quad (15)$$

このとき、先行研究<sup>(19)</sup>より式(14)を用いて式(8)を

$$\begin{aligned} & \int_D \kappa_\phi(x) \nabla u(x) \cdot \nabla \tilde{v}(x) dx \\ & \approx - \int_D g(u(x) + T_t)(x) \tilde{v}(x) \frac{dH(p_\phi(x))}{dp_\phi(x)} |\nabla p_\phi(x)| dx \\ & \text{for all } \tilde{v} \in H^1(D) \end{aligned} \quad (16)$$

として近似し、式(9)を

$$\begin{aligned} & \int_D \kappa_\phi(x) \nabla v(x) \cdot \nabla \psi(x) dx \\ & \approx - \int_D g'(u(x) + T_t)v(x)\psi(x) \frac{dH(p_\phi(x))}{dp_\phi(x)} |\nabla p_\phi(x)| dx \\ & + \int_{\Gamma_o} 2(u(x) + T_t - \tilde{T})\psi(x) d\sigma \\ & \text{for all } \psi \in H^1(D) \end{aligned} \quad (17)$$

として近似する。式(16)、式(17)を弱形式で取り扱うため、 $u = u_\phi = T_\phi - T_t \in V := \{u \in H^1(D) \cap L^{d+2}(\Gamma_h(\phi)) : u = 0 \text{ on } \Gamma_t\}$ ,  $v = S_\phi$  とする。本研究では、熱輻射境界条件における非線形項は最適化における1ステップ前の支配方程式の解  $T_{\text{old}}$  を用いて、 $g(T_\phi) = h(T_\phi^{d+1} - T_{\text{amb}}^{d+1}) \approx h(T_{\text{old}}^d T_\phi - T_{\text{amb}}^{d+1})$ ,  $g'(T_\phi) = h(d+1)T_\phi^d \approx h(d+1)T_{\text{old}}^{d-1} T_\phi$  として近似する。なお、初回の計算における初期温度  $T_{\text{old}}$  を周囲参照温度としている。式(16)、式(17)を用いることで、 $p_\phi$  の勾配が零でない  $[p_l < p_\phi < p_u]$  においてヘビサイド関数を付与し、状態方程式と随伴方程式を解く際に自動的に熱輻射境界を付与できる。その結果、設計変数に依存する境界条件の取り扱いが期待される。

## 7. 数値解析例

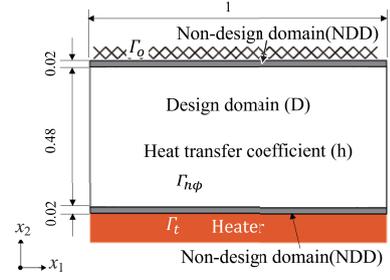
本研究で提唱する方法の妥当性と有効性を数値解析例により検証する。問題設定は図1における、下部の型を対象とし、図3に型的设计モデルを示す。図3において、(a)が2次元のモデル、(b)が3次元のモデルである。はじめに、適当な形状に対して境界抽出方程式を適用し、抽出する境界の妥当性を確認する。次に、提案するアルゴリズムに則り、設計変数依存を考慮した最適化を行う。

### 7.1. 境界抽出方程式の数値実験

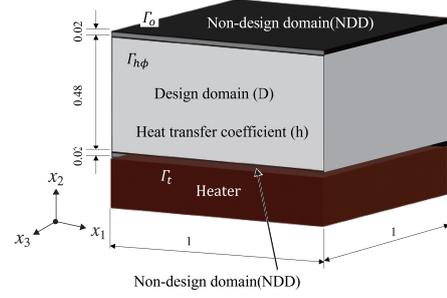
適当な形状を対象に境界抽出方程式を適用して、所望の境界を抽出できることを検証する。

#### 7.1.1. 2次元問題への適用

数値実験の対象モデルを図4に示す。ここで、(a)は適当な材料分布を持つ構造とする。灰色の領域が構造領域  $[\chi_\phi = 1]$ 、白色の領域が空孔領域  $[\chi_\phi = 0]$  に対応する。熱輻射寄与の大きい境界を識別するために、周囲構造が配置される  $x_1$  方向の



(a)



(b)

Fig. 3: Design domain and boundary conditions. (a) Two-dimensional problem. (b) Three-dimensional problem.

拡散係数を構造同士の拡散係数よりも大きくする。次に、座標軸方向  $i, j = 1, 2$  において、 $a_{11} = 1 \times 10^1$ ,  $a_{22} = 1 \times 10^{-1}$ ,  $a_{12} = a_{21} = 0$ ,  $\epsilon = 1 \times 10^{-4}$  とする。このとき、式(7)の解  $p_\phi$  は、図4(b)のようになり、青色の領域が熱輻射境界より内部、白色の領域が熱輻射境界より外部を表す。そして、図4(b)における  $[0.1 < p_\phi < 0.5] := \{x \in D : p_l < p_\phi(x) < p_u\}$  を熱輻射境界と定義すると、図4(c)の青線で示す通り、 $\Gamma_{\text{amb}}$  に面する熱輻射境界条件を課す領域が抽出できる。本研究では、構造の外形近傍を抽出するために  $p_\phi$  が零近傍の値域を設定している。

#### 7.1.2. 3次元問題への適用

3次元の場合、熱輻射の寄与度が大きい面が4面となるため、 $x_1$  方向と  $x_3$  方向に分けて検討する。まず、 $x_1 - x_2$  平面を  $\Gamma_{\text{amb}}^{x_1-x_2}$ ,  $x_3 - x_2$  平面を  $\Gamma_{\text{amb}}^{x_3-x_2}$  と定義する。図5(a)に、適当な形状の  $x_1 - x_3$  断面を示す。(a)において、灰色の領域が構造領域で、白色の領域が空孔領域である。図5において、上下の辺が  $\Gamma_{\text{amb}}^{x_1-x_2}$  であり、左右の辺が  $\Gamma_{\text{amb}}^{x_3-x_2}$  である。3次元問題では  $\Gamma_{\text{amb}}^{x_1-x_2}$  と  $\Gamma_{\text{amb}}^{x_3-x_2}$  の両方に面している構造最外形を熱輻射境界とする。図5(b)に熱輻射影響が大きい境界を赤線、熱輻射影響が小さい境界を黒い点線で示す。このような境界を抽出するためには、境界抽出方程式を解き、(c)、(d)における赤線で示す境界を抽出する。その境界の共通部分が(b)の赤線となり、3次元問題で求めたい熱輻射境界である。

数値実験モデルとして図6(a)の構造を適用する。灰色の領域が構造領域で、それ以外は空孔領域である。ここで、

座標軸方向  $i, j = 1, 2, 3$  において, 図 6 (b) に示すように  $x_1$  方向の拡散を大きくした解を  $p_{\phi 1}$  とし,  $a_{11} = 1 \times 10^1$ ,  $a_{22} = a_{33} = 1 \times 10^{-1}$ ,  $a_{12} = a_{13} = a_{23} = 0$ ,  $\varepsilon = 1 \times 10^{-4}$  とした. ただし,  $p_{\phi} = 0$  on  $\Gamma_{\text{amb}}^{x_3-x_2}$  とする. 次に, 図 6 (c) に示すように  $x_3$  方向の拡散を大きくした解を  $p_{\phi 2}$  とし,  $a_{33} = 1 \times 10^1$ ,  $a_{11} = a_{22} = 1 \times 10^{-1}$ ,  $a_{12} = a_{13} = a_{23} = 0$ ,  $\varepsilon = 1 \times 10^{-4}$  とした. ただし,  $p_{\phi} = 0$  on  $\Gamma_{\text{amb}}^{x_1-x_2}$  とする. このとき, 式 (7) の解  $p_{\phi}$  は, 図 6 (b), (c) のようになり, 青色の領域が所望の熱輻射境界より内部, 白色の領域が外部を表す. 図 6 (d), (e) では, 図 6 (b), (c) における  $[0.1 < p_{\phi} < 0.5]$  を青線, それ以外を白色で示している. そして, 適切な値域で抽出し,  $p_{\phi} = p_{\phi 1} p_{\phi 2}$  とすると, 図 6 (f) に示すように, 3次元でも必要とする熱輻射の寄与度が大きい境界を抽出できる.

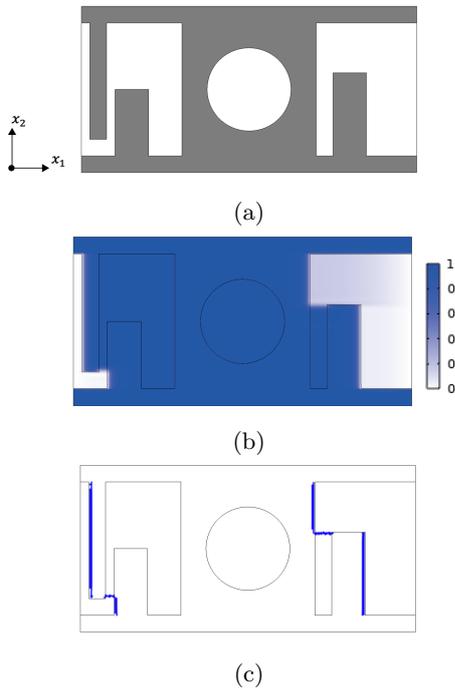


Fig. 4: Result of two-dimensional boundary extraction equation. (a) Material distribution. (b) Solution  $p_{\phi}$ . (c) Extracted boundaries.

## 7.2. 設計変数依存を考慮したトポロジー最適化

数値解析例により, 本研究で提唱する方法の有効性と妥当性を検証する. 問題設定は, 図 3 (a), (b) に示すように成形面  $\Gamma_o$ , 加熱面  $\Gamma_t$  を含む領域を非設計領域とし, その間の矩形領域を固定設計領域とする. 非設計領域には常に材料が配置され, 固定設計領域内の材料分布が最適化されるものとする. なお, 初期構造として全領域に材料が配置されるものとする.

### 7.2.1. 2次元問題への適用

図 3 (a) に示すように, 成形面  $\Gamma_o$ , 加熱面  $\Gamma_t$  を含む  $1\text{ m} \times 0.02\text{ m}$  の領域を非設計領域とし,  $1\text{ m} \times 0.48\text{ m}$  の矩形領域を固定設計領域とした2次元問題に適用する. まず, 加熱面  $\Gamma_t$  を温度規定  $T_t = 700\text{ K}$ , 固定設計領域内部の熱輻射寄与の高

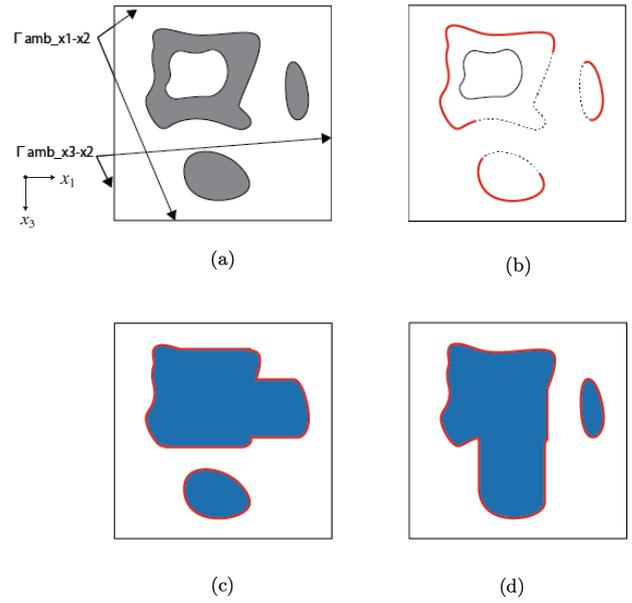


Fig. 5: Image of three-dimensional boundary extraction. (a) Cross-sectional design domain. (b) Boundaries with large contribution of thermal radiation. (c) Solution  $p_{\phi 1}$ . (d) Solution  $p_{\phi 2}$ .

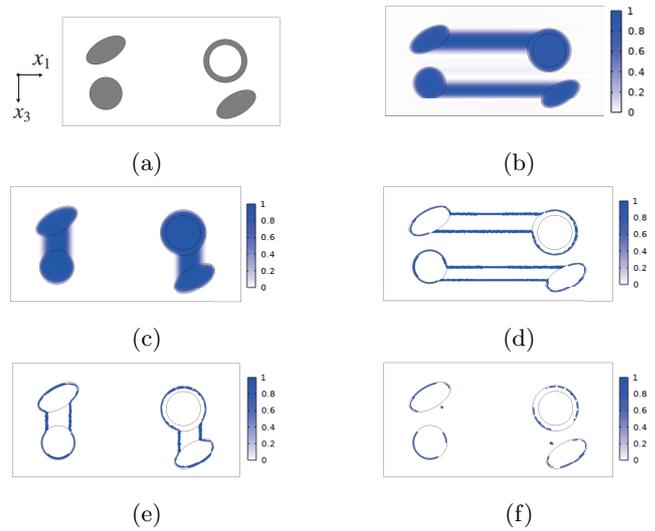


Fig. 6: Result of three-dimensional boundary extraction equation. (a) Material distribution. (b) Solution  $p_{\phi 1}$ . (c) Solution  $p_{\phi 2}$ . (d)  $[0.1 < p_{\phi 1} < 0.5]$ . (e)  $[0.1 < p_{\phi 2} < 0.5]$ . (f) Extracted boundaries.

い領域に設計変数に依存した熱輻射境界条件を与える。ここでは、物体領域の熱伝導率を  $\alpha = 10 \text{ W}/(\text{mK})$ 、空孔領域の熱伝導率を  $\beta = 1 \times 10^{-3} \text{ W}/(\text{mK})$  とした。また、熱輻射境界条件  $\Gamma_h(\phi)$  の外部参照温度  $T_{\text{amb}}$  は  $T_{\text{amb}} = 400 \text{ K}$  とし、本研究では、外部参照温度は実構造物の測温値とする。文献<sup>(29)</sup>より、2次元のステファンボルツマン定数は  $\sigma_s = 1.92 \times 10^{-10} \text{ W}/(\text{mK}^3)$ 、放射率は  $\epsilon_e = 1$  の場合について考える。また、本研究ではヘビサイド関数  $\tilde{H}$  の遷移幅を  $\epsilon_u = 0.1$ 、ヘビサイド関数  $H(p_\phi)$  における正の微小値を  $\epsilon_h = 0.01$ 、境界抽出における閾値を  $p_l = 0.1$ 、 $p_u = 0.5$ 、デルタ関数の中央値を  $y = (p_l + p_u)/2 = 0.3$  とする。目的汎関数の目標温度は  $\tilde{T}$  で表す  $\Gamma_o$  の温度分布とし、制約条件は固定設計領域の 50% 以下の体積制約とする。この問題設定により、 $\Gamma_o$  での理想温度分布を満たすような構造が得られる。支配方程式、随伴方程式、境界抽出方程式及び反応拡散方程式を2次要素により離散化する。固定設計領域は6節点三角要素で分割し、要素数は80197、節点数は100090である。

まず、目的汎関数の一定温度  $\tilde{T}$  を  $\tilde{T} = 600 \text{ K}$ 、正則化係数  $\tau = 5 \times 10^{-6}$  の条件下での最適化された構造を図7 (a) に示す。図7 (a)において、青色の領域が構造領域  $\Omega_1$ 、白色の領域が空洞領域  $\Omega_0$  を表す。構造の連結性を持つ明確な構造領域が創出されていることが分かる。図7 (b) は抽出された構造境界を示しており、赤線が熱輻射境界、青色の領域が構造領域、白色の領域が空洞領域を示している。これにより境界抽出方程式を用いて  $\Gamma_{\text{amb}}$  と面する境界だけを識別し、所望の境界が設定できる。図8 (a)には初期構造における温度分布、図8 (b)に最適化された構造における温度分布を示す。初期構造では成形面  $\Gamma_o$  において、中央部の温度が高く、 $\Gamma_h(\phi)$  近傍の温度低下が顕著であるため、目標温度との差異が大きい。しかし、最適化された構造の中央は空孔となり、中央部の温度上昇が抑えられ、 $\Gamma_h(\phi)$  近傍では  $\Gamma_t$  と  $\Gamma_o$  の間に構造を設けることで  $\Gamma_o$  の温度が一様化し、目標温度との差異が小さくなることが確認された。特に、熱輻射境界条件を与える  $\Gamma_h$  では細長い構造が形成され、遮熱効果をもたらす遮熱板のような構造が確認された。図9 (a)に、目標温度との解析値の差異を表す目的汎関数の収束履歴を示す。目的汎関数に関して、条件  $\{(J(\phi_i) - J(\phi_{i-1}))/J(\phi_{i-1})\} < 0.01$  を10回継続して満たすことを収束判断基準としている。なお  $i$  は計算ステップであり、138ステップで収束判断基準を満たした。最適化の初期段階では目的汎関数の振動が確認されるが、形状変化が大きい段階では温度変化も大きく、随伴方程式の外力項の符号変化が目的汎関数の振動を引き起こしていると考えられる。加えて、体積制約汎関数が安定するまでは形状変化が大きく、温度変化が大きいことも目的汎関数の振動に影響していると推測される。60ステップ以降は体積制約汎関数が目標値に収束し、目的汎関数の振動も減少している。そして、図9 (b)にステップ間の温度差の絶対値  $|T - T_{\text{old}}|$  を領域内で積分した値の履歴を示す。120ステップ以降では、ステップ間の温度差が1K未満となり、周囲参照温度400Kと比較しても十分に小さく、最適化された構造に

おける線形近似の妥当性が確認できる。これらの結果から、本手法を用いた有効性が示された。

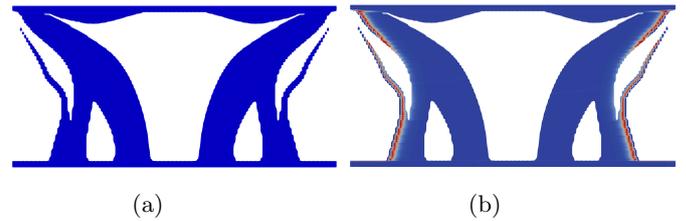


Fig. 7: (a) Optimized configurations. (b) Extracted boundaries.

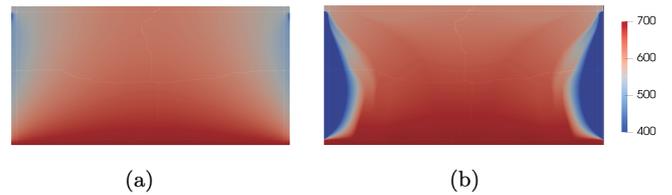
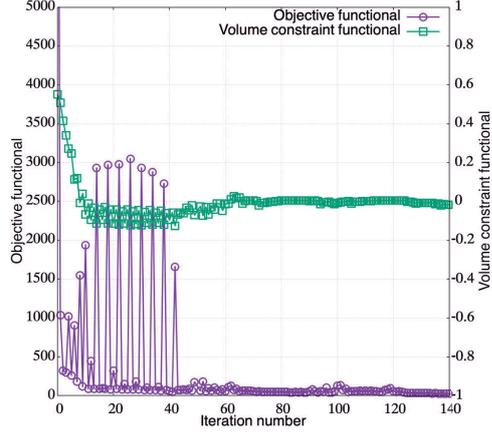


Fig. 8: (a) Initial temperature distribution. (b) Optimized temperature distribution.

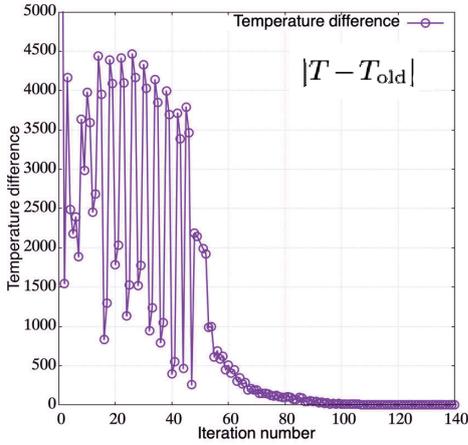
次に、異なる正則化係数  $\tau$  を設定し、最適化した結果を図10に示す。本研究では正則化係数を (a) では  $\tau = 5 \times 10^{-3}$ 、(b) では  $\tau = 5 \times 10^{-4}$ 、(c) では  $\tau = 5 \times 10^{-5}$ 、(d) では  $\tau = 5 \times 10^{-6}$  と設定した。目的汎関数は (a) では72.9、(b) では59.8、(c) では45.5、(d) では39.1となり、正則化係数  $\tau$  が小さくなるに連れて、幾何学的に複雑な形状が生成され、目的汎関数値が小さくなる傾向が確認される。これは、式(5)で示される反応拡散方程式の正則化係数が、構造の周長制約に影響を与えるためである。

### 7.2.2. 3次元問題への適用

次に、本提案手法を3次元設計問題へ適用し、有効性を検証した。図3 (b)に示すように、成形面  $\Gamma_o$ 、加熱面  $\Gamma_t$  を含む  $1 \times 0.02 \times 0.02 \text{ m}$  の領域を非設計領域とし、 $1 \times 1 \times 0.48 \text{ m}$  の領域を固定設計領域とする。3次元のステファンボルツマン定数  $\sigma_s$  は  $\sigma_s = 5.67 \times 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2\text{K}^4)$  の場合を考える。固定設計領域は、10節点四面体要素で分割し、要素数300831、節点数403020である。他の条件は6.1節の2次元問題と同じである。目的汎関数を一定温度  $\tilde{T} = 600 \text{ K}$ 、正則化係数  $\tau = 5 \times 10^{-6}$  とした場合の最適化された構造を図11に示す。(a)が鳥瞰図、(b)が一部を除去した断面である。2次元の結果と同様に中央部に空孔が創出され、 $\Gamma_o$  と  $\Gamma_t$  の間は構造が繋がれている。図11 (c)に抽出した熱輻射境界を示す。構造内部の  $\partial\Omega_1$  は含まずに、所望の境界を抽出できていることが分かる。次に図12 (a)に初期構造の温度分布、(b)に最適化された構造の温度分布を示す。(a)では、領域  $\Gamma_o$  において、中央部と比較して、 $\Gamma_{\text{amb}}$  に近い位置の温度が低い。最適化された構造では  $\Gamma_o$  における中央の温度上昇が抑えられ、 $\Gamma_{\text{amb}}$  近傍の温度低下が抑制されている。そして、図13に示す目的汎関数は、98ステップで収束判断基準を満たした。以



(a)



(b)

Fig. 9: (a) Convergence history of objective functional and volume constraint functional. (b) Temperature difference between iteration.

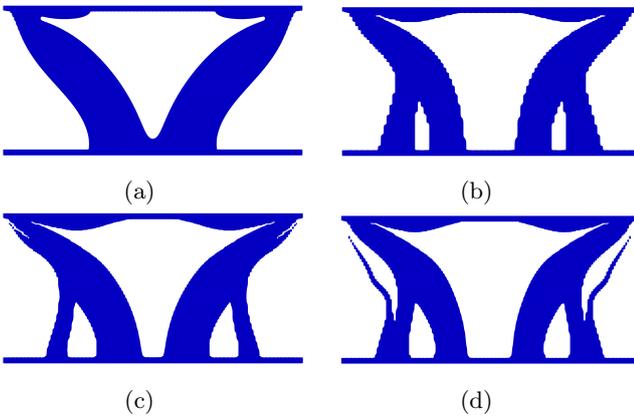


Fig. 10: Dependence of optimized configurations on regularization factor  $\tau$ . (a)  $\tau = 5 \times 10^{-3}$ . (b)  $\tau = 5 \times 10^{-4}$ . (c)  $\tau = 5 \times 10^{-5}$ . (d)  $\tau = 5 \times 10^{-6}$ .

上より、3次元でも本手法を用いた有効性が示された。

## 8. 結言

本研究では、設計変数に依存する熱輻射境界条件を考慮した熱伝導問題のトポロジー最適化法を提案した。本研究で得られた結果を次に示す。

1. 一般的な機械構造物の熱設計の方法を明示し、熱輻射の影響が支配的な熱伝導問題において、マクロ的な構造は形態係数、ミクロ的な構造は輻射率の影響が大きいことを議論した。
2. 機械構造物の例として、温度制御が難しい成形炉の型における温度場をモデル化し、熱伝導問題を定式化した。
3. 熱輻射境界条件を付与した熱伝導における最適化問題を定式化し、熱輻射による非線形項を含む感度解析を行なった。
4. 形態係数が大きい領域の幾何学的位置関係を表現する偏微分方程式（境界抽出方程式）を提案した。境界抽出方程式に基づいて、設計変数に依存する熱輻射境界の識別方法を提案し、適切な値域を設定することで熱輻射境界を抽出できることを示した。
5. 最適化ステップ毎に境界抽出を行い、非線形項を線形近似したトポロジー最適化法のアルゴリズムを構築し、その数値実装法を提案した。
6. 2次元および3次元のモデルに本手法を適用し、方法論の妥当性と有効性の結果を検討した。その結果、熱伝導だけでは発生しない熱輻射特有の構造を創出できることを確認した。

## 9. 付録

本文中6.2節における、設計感度の導出方法を記す。設計感度  $J'(\phi)$  を導出するために、 $u = u_\phi = T_\phi - T_i \in V := \{u \in H^1(D) \cap L^{d+2}(\Gamma_h(\phi)) : u = 0 \text{ on } \Gamma_t\}$  とし、変数を変換すると式(8)は以下ようになる。

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(\kappa_\phi \nabla u_\phi) = 0 & \text{in } D, \\ u_\phi = 0 & \text{on } \Gamma_t, \\ -\kappa_\phi \nabla u_\phi \cdot n = 0 & \text{on } \Gamma_o, \\ -\kappa_\phi \nabla u_\phi \cdot n = g(u_\phi + T_t) & \text{on } \Gamma_h(\phi). \end{cases} \quad (18)$$

すなわち、式(8)の弱形式は次のように記述される。

$$\int_D \kappa_\phi(x) \nabla u_\phi(x) \cdot \nabla \tilde{v}_\phi(x) dx + \int_{\Gamma_h(\phi)} g(u_\phi + T_t)(x) \tilde{v}_\phi(x) d\sigma = 0 \quad \text{for all } \tilde{v}_\phi \in V. \quad (19)$$

次に、随伴変数を  $\tilde{v}_\phi$  として、以下のラグランジュ関数  $\mathcal{L}(\phi, u_\phi, \tilde{v}_\phi)$

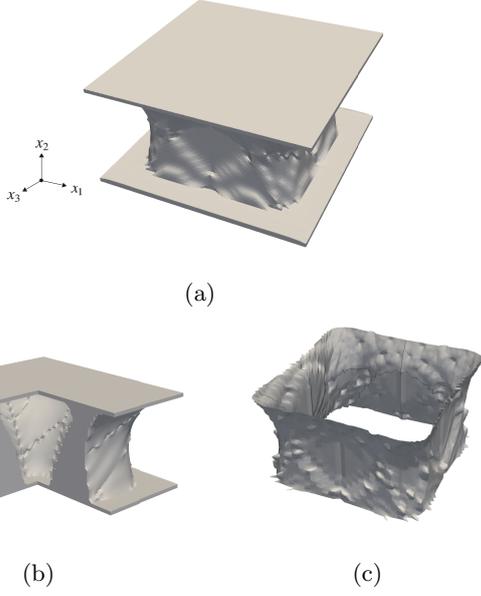


Fig. 11: Optimized configuration. (a) Bird's-eye view. (b) Cross section. (c) Extracted boundaries.

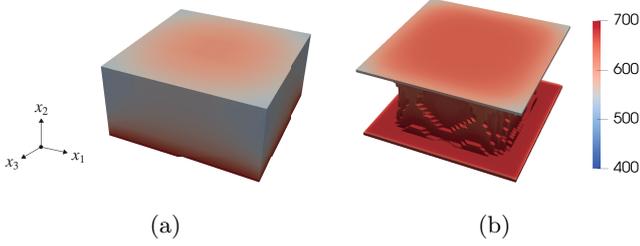


Fig. 12: (a) Initial temperature distribution. (b) Optimized temperature distribution.

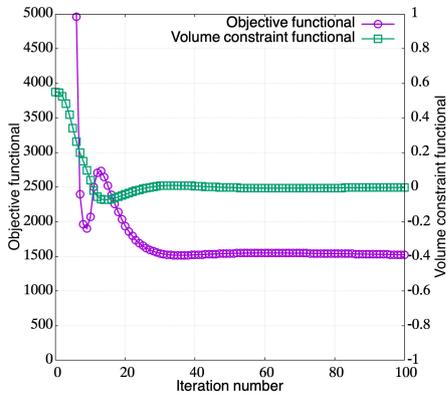


Fig. 13: Convergence history of objective functional and volume constraint functional.

を導入する.

$$\begin{aligned}
& \mathcal{L}(\phi, u_\phi, \tilde{v}_\phi) \\
& := \int_{\Gamma_o} (u_\phi(x) + T_t - \tilde{T})^2 d\sigma \\
& \quad + \int_D \kappa_\phi(x) \nabla u_\phi(x) \cdot \nabla \tilde{v}_\phi(x) dx \\
& \quad + \int_{\Gamma_h(\phi)} h((u_\phi + T_t)^{d+1} - T_{\text{amb}}^{d+1}) \tilde{v}_\phi(x) d\sigma. \quad (20)
\end{aligned}$$

このとき、 $\partial_{u_\phi} \mathcal{L}(\phi, u_\phi, \tilde{v}_\phi) = 0$  となる  $\tilde{v}_\phi \in V_{\Gamma_t} = \{v \in H^1(D) : v = 0 \text{ on } \Gamma_t\}$  を特定すると、 $J'(\phi) = \partial_\phi \mathcal{L}(\phi, u_\phi, \tilde{v}_\phi)$  が成り立つ。そこで、 $\partial_{u_\phi} \mathcal{L}(\phi, u_\phi, \tilde{v}_\phi) = 0$  となる  $\tilde{v}_\phi \in V_{\Gamma_t}$  について考察すると、

$$\begin{aligned}
& \langle \partial_{u_\phi} \mathcal{L}(\phi, u_\phi, \tilde{v}_\phi), \psi \rangle_{H^1(D)} \\
& = \int_{\Gamma_o} 2(u_\phi(x) + T_t - \tilde{T}) \psi(x) d\sigma \\
& \quad + \int_D \kappa_\phi(x) \nabla \tilde{v}_\phi(x) \cdot \nabla \psi(x) dx \\
& \quad + \int_{\Gamma_h} h(d+1)(u_\phi(x) + T_t)^d \tilde{v}_\phi(x) \psi(x) d\sigma \\
& \text{for all } \psi \in H^1(D) \quad (21)
\end{aligned}$$

が成り立つ。ここで、 $v_\phi \in V_{\Gamma_t}$  を次の方程式、

$$\begin{aligned}
& \int_D \kappa_\phi(x) \nabla v_\phi(x) \cdot \nabla \psi(x) dx \\
& \quad - \int_{\Gamma_o} 2(u_\phi(x) + T_t - \tilde{T}) \psi(x) d\sigma \\
& \quad + \int_{\Gamma_h} h(d+1)(u_\phi(x) + T_t)^d v_\phi(x) \psi(x) d\sigma = 0 \quad (22)
\end{aligned}$$

の解とすると、 $\partial_{u_\phi} \mathcal{L}(\phi, u_\phi, -v_\phi) = 0$ 、 $\partial_{v_\phi} \mathcal{L}(\phi, u_\phi, -v_\phi) = 0$  を満たす。このとき、 $T_\phi = u_\phi + T_t$ 、 $v_\phi = S_\phi$  より、 $T_\phi \in H^1(D)$  に対する随伴方程式 (9) が得られる。また、 $J(\phi) = \mathcal{L}(\phi, u_\phi, -v_\phi)$  である。そして、 $\mathcal{L}(\phi, u_\phi, -v_\phi)$  を  $\phi$  で微分すると、

$$\begin{aligned}
& \langle J'(\phi), \psi \rangle_{H^1(D)} \\
& = \left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_\phi} \frac{\partial u_\phi}{\partial \phi} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v_\phi} \frac{\partial v_\phi}{\partial \phi}, \psi \right\rangle_{H^1(D)} \\
& = \langle \partial_\phi \mathcal{L}(\phi, u_\phi, -v_\phi), \psi \rangle_{H^1(D)} \\
& = - \lim_{\eta \rightarrow 0_+} \int_D \frac{\kappa_{(\phi+\eta\psi)}(x) - \kappa_\phi(x)}{\eta} \nabla u_\phi(x) \cdot \nabla v_\phi(x) dx \quad (23)
\end{aligned}$$

が形式的に成り立つ。ここで、

$$\lim_{\eta \rightarrow 0_+} \frac{\kappa_{(\phi+\eta\psi)}(x) - \kappa_\phi(x)}{\eta} = \delta(\phi) \quad (24)$$

であり、トポロジーの変更を許容するため、係数を  $C_\eta$ 、 $\eta$  とし、

$$\delta(\phi) \approx \frac{C_\eta \chi_{[0 \leq \phi \leq \eta]}}{\eta} \quad \text{a.e. in } D, \quad (25)$$

$$\chi_{[0 \leq \phi \leq \eta]} = \begin{cases} 1 & \text{if } 0 \leq \phi \leq \eta, \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (26)$$

としてデルタ関数を表現する．なお， $[0 \leq \phi \leq \eta] = \{x \in D : 0 \leq \phi(x) \leq \eta\}$ である．ここで， $T_t$ が定数ならば式(2)の構造領域でのみ感度を持つように，特性関数  $\chi_\phi \in L^\infty(D; \{0, 1\})$ を用いると，文献<sup>(25)</sup>より以下が成り立ち，

$$J'(\phi) \approx -\eta \chi_\phi \nabla u_\phi \cdot \nabla v_\phi = -\chi_\phi \nabla T_\phi \cdot \nabla S_\phi \quad (27)$$

として近似設計感度が構成される．ここでは，簡便化するため， $C_\eta = 1, \eta = 1$ としている．

### 参考文献

- (1) Viskanta, R. and Mengü, C. M.: Radiation heat transfer in combustion systems, *Progress in Energy and Combustion Science*, **13**(1987), pp. 97–160.
- (2) Andre, S. and Degiovanni, A.: A theoretical study of the transient coupled conduction and radiation heat transfer in glass: phonic diffusivity measurements by the flash technique, *Journal of Heat and Mass Transfer*, **38. 18**(1995), pp. 3401–3412.
- (3) Can, A. G. and Melik, B. A.: Numerical analysis of the radiant heating effectiveness of a continuous glass annealing furnace, *Applied Thermal Engineering*, **204**(2022), 117943.
- (4) Furkan, F. S., Hesani, Z., Olindo, I. and Miro, Z.: Fast and accurate ray-casting-based view factor estimation method for complex geometries, *Solar Energy Materials and Solar Cells* **200**(2019), 109934.
- (5) Bendsøe, M.P. and Kikuchi, N.: Generating optimal topologies in structural design using a homogenization method, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **71. 2**(1988), pp. 197–224.
- (6) Diaz, A.R. and Sigmund, O.: A topology optimization method for design of negative permeability metamaterials, *Structural and Multidisciplinary Optimization* **141. 2**(2010), pp. 163–177.
- (7) Murai, N., Noguchi, Y., Matsushima, K. and Yamada, T.: Multiscale topology optimization of electromagnetic metamaterials using a high-contrast homogenization method, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* **403**(2023), 115728.
- (8) Yoon, G., Jensen, J. and Sigmund, O.: Topology optimization of acoustic-structure interaction problems using a mixed finite element formulation, *Additive Manufacturing*, **70. 9**(2007), pp. 1049–1075.
- (9) Lee, J., Kim, Y., Kim, J. and Kang, Y.: Two-dimensional poroelastic acoustical foam shape design for absorption coefficient maximization by topology optimization method, *The Journal of the Acoustical Society of America* **123. 4**(2008), pp. 2094–2106.
- (10) Allaire, G.: *Shape optimization by the homogenization method*, Springer-Verlag, (2002), pp. 189–257.
- (11) Haslinger, J. Hillebrand, A. Karkkainen, T. and Miettinen, M.: Optimization of conducting structures by using the homogenization method, *Structural and Multidisciplinary Optimization* **24**(2002), pp. 125–140.
- (12) Gersborg-H, A. Bendsøe, M. P. and Sigmund, O.: Topology optimization of heat conduction problems using finite volume method, *Structural and Multidisciplinary Optimization* **31**(2006), pp. 251–259.
- (13) Tang, L. Gao, T. Song, L. et al.: Topology optimization of nonlinear heat conduction problems involving large temperature gradient, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **357**(2019), 112600.
- (14) Chen, Y., Ye, L., Zhang, Y., X. and Yang, C.: A multi-material topology optimization with temperature-dependent thermoelastic properties, *Engineering Optimization* **54. 12**(2022), pp. 2140–2155.
- (15) Osher, S. and Sethian, J.A.: Fronts propagating with Curvature-Dependent Speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi Formulations, *Journal of computational Physics*, **79**(1988), pp. 12–49.
- (16) Allaire, G., Jouve, F. and Toader, A.M.: Structural optimization using sensitivity analysis and a level-set method, *Journal of Computational Physics*, **194. 1**(2004), pp. 363–393.
- (17) 山田 崇恭, 西脇 眞二, 泉井 一浩, 吉村 允孝, 竹澤 晃弘: レベルセット法による形状表現を用いたフェーズフィールド法の考え方に基づくトポロジー最適化, *日本機械学会論文集 A 編*, **75. 753**(2009), pp.550–558.
- (18) Yamada, T., Izui, K., Nishiwaki, S., and Takezawa, A.: A topology optimization method based on the level set method incorporating a fictitious interface energy, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **199.45**(2010), pp. 2876–2891.
- (19) Yamada, T., Izui, K. and Nishiwaki, S.: Level set-based topology optimization method for maximizing thermal diffusivity in problems including design-dependent effects, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **133**(2011), pp. 031011-1–031011-9.
- (20) 小川 竣, 音羽 貴史, 山田 崇恭: レベルセット法に基づくトポロジー最適化による熱交換性能最大化, *日本計算工学会論文集*, **66. 641**(2020), pp. 227–234.
- (21) 山田 崇恭, 正宗 淳, 寺本 央, 長谷部 高広, 黒田 紘敏: 幾何学的特徴量に対する偏微分方程式系に基づく幾何学的特徴制約付きトポロジー最適化 (積層造形における幾何学的特徴点を考慮したオーバーハング制約法), *日本機械学会論文集*, **85. 877**(2019), 19–00129.
- (22) Yamada, T., and Noguchi, Y.: Topology optimization with a closed cavity exclusion constraint for additive

- manufacturing based on the fictitious physical model approach, *Additive Manufacturing*, **52**(2022), 102630.
- (23) Sato, Y., Yamada, T., Izui, K. and Nishiwaki, S.: Manufacturability evaluation for molded parts using fictitious physical models, and its application in topology optimization, *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, **92**(2017), pp. 1391–1409.
- (24) 酒井虹太, 岡大将, 山田崇恭: トポロジー最適化における仮想的な物理モデルに基づく最大厚み制約, *計算数理工学論文集*, **22**(2022), pp. 147–154.
- (25) Oka, T. and Yamada, T.: Topology optimization method with nonlinear diffusion, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **408**(2023), 115940.
- (26) 今野 雅, 倉渕 隆, 鎌田 元康: 放射熱伝達解析における形態係数の計算法についての研究, *日本建築学会環境系論文集*, **68. 572**(2003), pp. 17–22.
- (27) Hecht, F.: New development in FreeFem++, *Journal of Numerical Mathematics* **20**(2012), pp. 251–265.
- (28) Osher, S. and Fedkiw, R.: *Level Set Methods And Dynamic Implicit Surface*, Springer, (2003), pp. 14–15.
- (29) Landsberg, Peter T and De Vos, Alexis.: The Stefan-Boltzmann constant in n-dimensional space, *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **22**(1989), pp. 1073–1084.

# A mode reduction method used for calculating the frequency response and topological derivatives

Hao REN<sup>1)</sup>, Yi CUI<sup>2)</sup>, Toru TAKAHASHI<sup>3)</sup>, Toshiro MATSUMOTO<sup>4)</sup>

- 1) Nagoya University (Furo-cho, Chikusa-ku, Nagoya, Aichi, 464-8601, E-mail: ren.hao.j9@s.mail.nagoya-u.ac.jp)  
 2) Nagoya University (Furo-cho, Chikusa-ku, Nagoya, Aichi, 464-8601, E-mail: yi.cui@mae.nagoya-u.ac.jp)  
 3) Nagoya University (Furo-cho, Chikusa-ku, Nagoya, Aichi, 464-8601, E-mail: ttaka@nuem.nagoya-u.ac.jp)  
 4) Nagoya University (Furo-cho, Chikusa-ku, Nagoya, Aichi, 464-8601, E-mail: t.matsumoto@nuem.nagoya-u.ac.jp)

For the calculation of elastic structure frequency response, a commonly used method is the full mode method (FM). However, for a frequency range, this approach tends to be computationally expensive, especially in the process of topology optimization. Therefore, this study proposes to use the mode displacement method (MDM), which is one of the mode reduction methods. Similarly, for topology optimization in the frequency range, using this method to calculate the adjoint operator can greatly reduce the calculation cost of topological derivatives. The results show that in frequency range, using MDM can significantly improve the efficiency of calculating frequency response and topological derivatives while ensuring a certain accuracy.

**Key Words:** Mode reduction, Mode displacement method, Frequency response, Topological derivative

## 1. Introduction

In numerical calculation of the response of a structure to a single frequency, a commonly used method is called the full mode method (FM), which provides quite accurate results. However, when calculating the response in a frequency interval, the calculation cost is very expensive because the response of different frequencies needs to be repeatedly calculated, and all modes of the discrete structure will be used each time. In practical situations, we are often interested in the low-frequency response. Therefore, mode reduction methods are becoming increasingly popular. These methods utilize only a few modes of the discrete structure, thereby reducing computational cost while maintaining accuracy. The mode displacement method (MDM) is one of the mode reduction methods used in this paper. It has a significant advantage when applied to the calculation of frequency band responses. When calculating multiple frequency responses with MDM, the eigenfrequencies and eigenvectors only need to be calculated once. Each subsequent frequency responses calculation involves only simple superposition, which significantly reduces the computational cost compared to FM.

In the context of frequency domain topology optimization, mode reduction methods are often applied. The first type is based on modal superposition, Ma<sup>(1)</sup> used MDM combined with the density-based method to perform optimization of the elastic structure. Liu<sup>(2)</sup> compared the optimization of MDM and mode acceleration method (MAM)<sup>(3)</sup>. Among them, MAM has more calculation cost than MDM, but its accuracy is slightly higher. The second type is based on series expansion, such as Jensen<sup>(4)</sup> used Padé expansion and density-based method. Yoon<sup>(5)</sup> used the Quasi-Static Ritz Vector (QSRV) to make the optimization.

The topological derivative is a new sensitivity analysis method, which is different from the previous gradient-based sensitivity analysis. Otomori<sup>(6)</sup>, Filho<sup>(7)</sup> used topological derivatives to optimize static problems. Lopes<sup>(8)</sup> used a method based on topological derivatives to perform multi-load topology optimization of static problems. Giusti<sup>(9)</sup> used the topological derivative for topology optimization of anisotropic materials. Isakari<sup>(10)</sup> derived the topological derivative of the eigenvalue objective function based on the Helmholtz equation structure. Yamada<sup>(11)</sup> used this approach to optimize the response at specific frequency. When performing sensitivity analysis for non-self-adjoint situations, it is also necessary to calculate the

adjoint operator of the topological derivative. The adjoint operator is usually obtained by solving the adjoint problem, which is also a computationally intensive process. In previous research, Hoshuku<sup>(12)</sup> used Padé approximation to approximate frequency response and topological derivative. In this study, MDM is also proposed for solving the adjoint problem of frequency band responses.

Overall, this paper aims to explore efficient methods for calculating the frequency response and topological derivatives of elastic structures. Using MDM for frequency response calculation and combining it with topological derivative to achieve efficient frequency band optimization. Numerical experiments will be performed to verify the effectiveness and efficiency of the proposed method, and comparisons with the FM method will be presented. The results of this study contribute to the development of improved optimization techniques for elastic structures under harmonic excitation.

## 2. Methods for Frequency Response Calculation

The forward problem calculation in this paper, which involves the frequency response calculation of the structure, will be based on the finite element method (FEM).

### 2.1. Full Mode Method (FM)

First, let's introduce the full mode method. For a linear elastic structure under harmonic excitation, as shown in Figure 1, it satisfies the following governing equations:

$$C_{ijkl}u_{k,lj} + \rho\omega^2 u_i = 0 \quad \text{in } \Omega \quad (1)$$

$$t_i = \bar{t}_i \quad \text{on } \Gamma_t \quad (2)$$

$$u_i = \bar{u}_i \quad \text{on } \Gamma_u, \quad (3)$$

where  $C_{ijkl}$  is elasticity tensor,  $u_i$  is frequency response,  $\rho$  is material density,  $t_i$  is traction,  $\bar{t}_i$  is the amplitude of the external force on boundary  $\Gamma_t$ ,  $\bar{u}_i$  is the specified displacement value on boundary  $\Gamma_u$ .

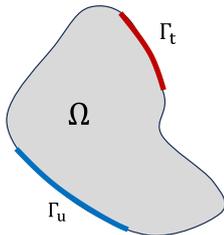


Fig. 1 Elastic body problem

The weak forms of (1) to (3) can be expressed as:

$$\int_{\Omega} \tilde{u}_{i,j} C_{ijkl} u_{k,l} d\Omega - \omega^2 \int_{\Omega} \rho \tilde{u}_i u_i d\Omega = \int_{\Gamma_t} \bar{t}_i \tilde{u}_i d\Gamma, \quad (4)$$

here  $\tilde{u}_i$  is the test function. The matrix form of (4) is:

$$(\mathbf{K} - \omega^2 \mathbf{M})\mathbf{u} = \mathbf{F}, \quad (5)$$

where  $\mathbf{K}$  is stiffness matrix,  $\mathbf{M}$  is mass matrix,  $\mathbf{u}$  is the vector of frequency response,  $\mathbf{F}$  is load vector. Through (5), the frequency response  $\mathbf{u}$  can be obtained:

$$\mathbf{u} = (\mathbf{K} - \omega^2 \mathbf{M})^{-1} \mathbf{F}. \quad (6)$$

It can be seen from (6) that for a system with  $n$  degrees of freedom, obtaining its response requires the inversion operation of an  $n \times n$  matrix. This process requires a lot of calculations, and computational cost increases cubically as the degree of freedom of the system increases.

### 2.2. Mode Displacement Method (MDM)

The Mode Displacement Method is one of the mode reduction methods, which can efficiently calculate the displacement response of a structure with reduced computational effort. It is particularly useful for problems involving multiple frequency responses, significantly reducing computation time. For a linear elastic structure subjected to harmonic loads, it satisfies the following equation:

$$C_{ijkl}u_{k,lj} - \rho\ddot{u}_i = 0 \quad \text{in } \Omega \quad (7)$$

$$t_i = \bar{t}_i e^{j\omega t} \quad \text{on } \Gamma_t \quad (8)$$

$$u_i = \bar{u}_i \quad \text{on } \Gamma_u, \quad (9)$$

where  $\ddot{u}_i$  is the second derivative of displacement to time. The weak form of (7) to (9) is:

$$\int_{\Omega} \tilde{u}_{i,j} C_{ijkl} u_{k,l} d\Omega + \int_{\Omega} \rho \tilde{u}_i \ddot{u}_i d\Omega = \int_{\Gamma_t} \bar{t}_i e^{j\omega t} \tilde{u}_i d\Gamma. \quad (10)$$

The matrix form of (10) is:

$$\mathbf{K}\mathbf{u} + \mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}} = \bar{\mathbf{T}} e^{j\omega t}. \quad (11)$$

For a discrete system with  $n$  degree of freedoms, its normalized  $i$ -th order eigenvector  $\boldsymbol{\varphi}_i$  satisfies:

$$\boldsymbol{\varphi}_i^T \mathbf{M} \boldsymbol{\varphi}_i = 1 \quad (12)$$

$$\boldsymbol{\varphi}_i^T \mathbf{K} \boldsymbol{\varphi}_i = \omega_i^2, \quad (13)$$

where  $\omega_i$  represents the  $i$ -th eigenvalue of the system. For the displacement vector, it can be expressed using the eigenvector matrix  $\boldsymbol{\Phi}$  as the base conversion matrix, represented by generalized coordinates  $y_i$ :

$$\mathbf{u} = \boldsymbol{\Phi} \mathbf{y} = \sum_{i=1}^n \boldsymbol{\varphi}_i y_i, \quad (14)$$

where matrix  $\boldsymbol{\Phi} = [\boldsymbol{\varphi}_1, \boldsymbol{\varphi}_2, \dots, \boldsymbol{\varphi}_n]$ . By substituting (12), (13) and (14) into the matrix form of the governing equation (11), we obtain:

$$\boldsymbol{\Phi}^T \mathbf{M} \boldsymbol{\Phi} \ddot{\mathbf{y}} + \boldsymbol{\Phi}^T \mathbf{K} \boldsymbol{\Phi} \mathbf{y} = \ddot{\mathbf{y}} + \text{diag}(\omega_i^2) \mathbf{y} = \boldsymbol{\Phi}^T \bar{\mathbf{T}} e^{j\omega t}. \quad (15)$$

Since the load  $\bar{\mathbf{T}} e^{j\omega t}$  is harmonic, the response in generalized coordinates  $\ddot{y}_i$  can also be obtained:

$$\ddot{y}_i = -\omega^2 y_i. \quad (16)$$

Substituting (16) into (15), we can obtain:

$$y_i = (\omega_i^2 - \omega^2)^{-1} \boldsymbol{\varphi}_i^T \bar{\mathbf{T}} e^{j\omega t}. \quad (17)$$

Substituting (17) back into (14), obtained:

$$\mathbf{u} = \sum_{i=1}^n \boldsymbol{\varphi}_i y_i = \sum_{i=1}^n \frac{\boldsymbol{\varphi}_i^T \bar{\mathbf{T}} \boldsymbol{\varphi}_i}{\omega_i^2 - \omega^2} e^{j\omega t}. \quad (18)$$

Therefore, the response amplitude should be:

$$\mathbf{u}' = \sum_{i=1}^n \frac{\boldsymbol{\varphi}_i^T \bar{\mathbf{T}} \boldsymbol{\varphi}_i}{\omega_i^2 - \omega^2}. \quad (19)$$

By reducing the modes and considering only the first  $l$ -th eigenvalues and eigenvectors, we can get:

$$\mathbf{u}' = \sum_{i=1}^l \frac{\boldsymbol{\varphi}_i^T \bar{\mathbf{T}} \boldsymbol{\varphi}_i}{\omega_i^2 - \omega^2}, \quad (20)$$

where  $l \ll n$ . The above formula represents the frequency response calculation using the MDM.

### 2.3. Comparison between two methods

Figure 2 and Figure 3 are the processes of the two frequency response calculation methods respectively.

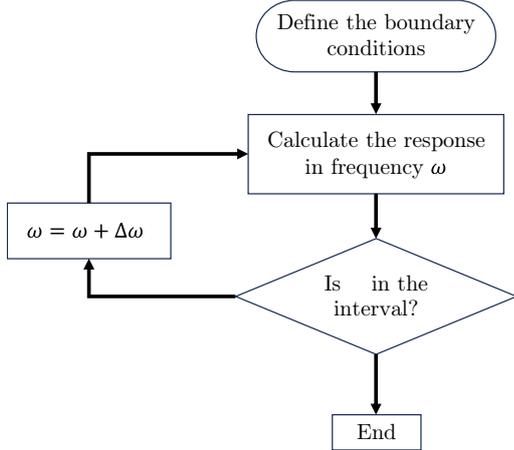


Fig. 2 Process of FM

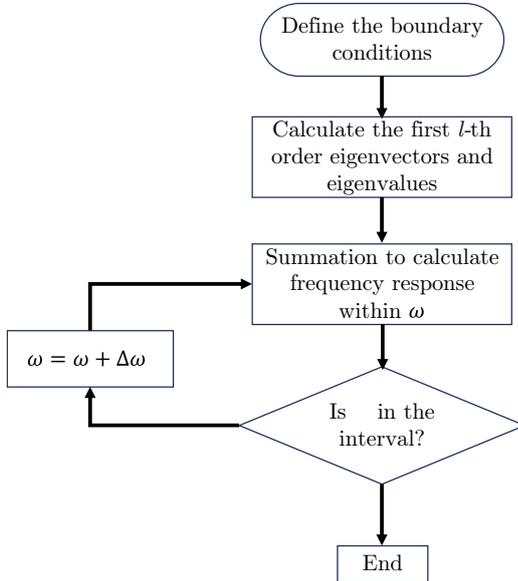


Fig. 3 Process of MDM

Taking a two-dimensional cantilever beam with 6642 degrees of freedom as an example, with one edge subjected to uniformly distributed harmonic excitation as shown in Figure 4. The material parameters are Young's modulus  $E = 2e11$  Pa, Poisson's ratio  $\nu = 0.33$ , and density  $\rho = 7890$  kg/m<sup>3</sup>. The

frequency responses in the angular frequency range  $[0, 5000]$  are calculated using both methods. The response curve obtained using the FM method is shown in Figure 5 with blue lines, while the MDM results are shown in Figure 5 with red lines. Here,  $l$  indicates different orders of eigenvalues and eigenvectors. Comparing the graphics, it can be observed that when the total degrees of freedom of the structure are 6642, if  $l$  is greater than or equal to 3, approximately accurate results can be obtained.

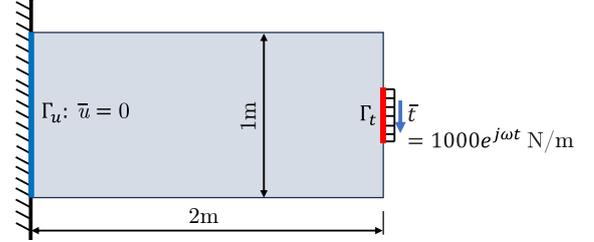
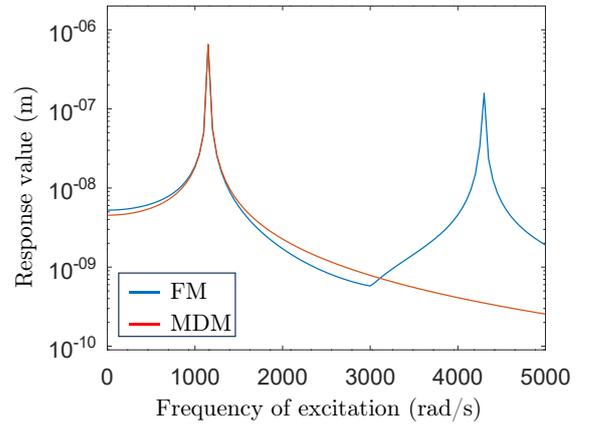
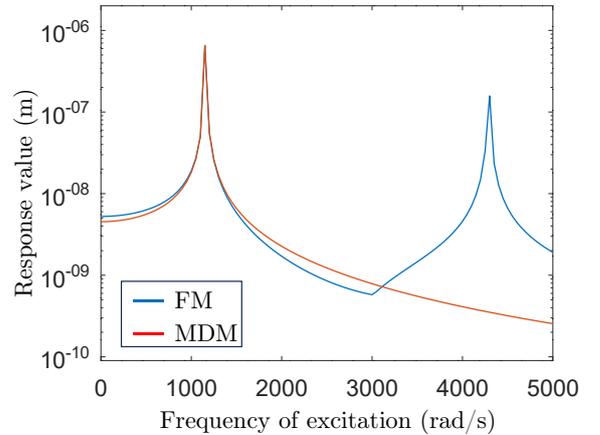


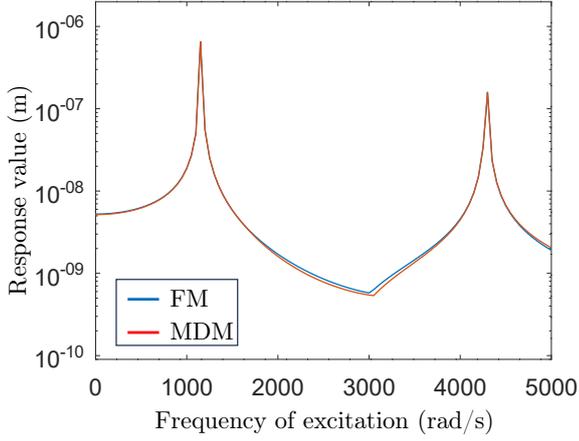
Fig. 4 2D cantilever beam



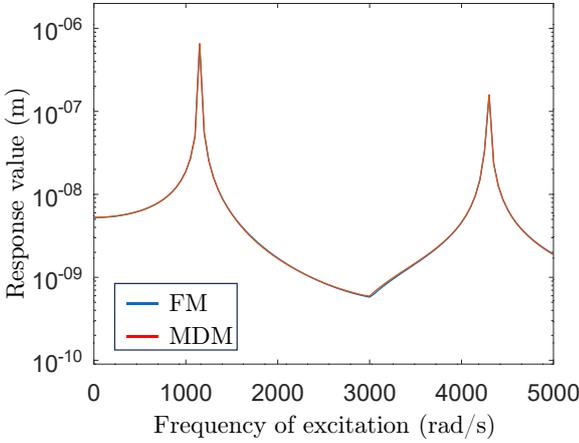
(a)  $l = 1$



(b)  $l = 2$



(c)  $l = 3$



(d)  $l = 5$

Fig. 5 When  $l$  takes 1, 2, 3 and 5 respectively, the comparison of MDM and FM calculation results. The blue lines are FM, and the red lines are MDM. When  $l \geq 3$ , MDM can get approximately accurate results.

Considering the example of 2D cantilever beam with 420 degrees of freedom, we compare the accuracy achieved with different numbers of eigenvalues and eigenvectors used in MDM. In comparison with the FM method, the relationship between the maximum relative residual of the obtained results and the number is shown in Figure 6. When the number of eigenvectors and eigenvalues  $l$  is greater than 100, the relative residual errors  $r$  are typically less than 1%, and when  $l > 400$ ,  $r = 0$ . The calculation formula for  $r$  is as follow:

$$r = \max\left(\frac{|\mathbf{u}_{\text{MDM}} - \mathbf{u}_{\text{FM}}|}{\mathbf{u}_{\text{FM}}}\right). \quad (21)$$

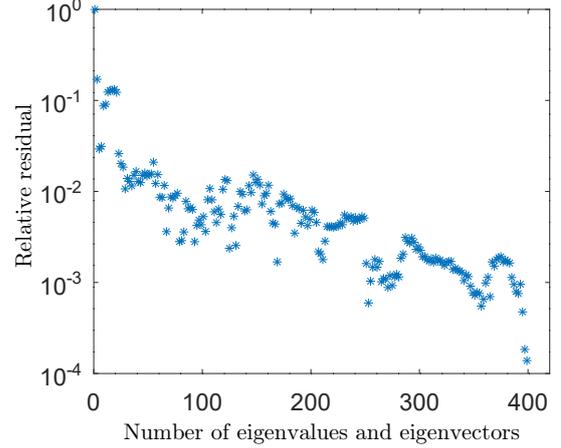


Fig. 6 Relationship between the maximum relative residual of the obtained results and the number of selected modes.

Compare the computation time of the two methods. We use  $m$  to represent the number of samples in the frequency interval,  $t_0$  to represent the calculation time of FM to calculate a certain frequency response. The total time of frequency response in the calculation interval is  $T_0 = m \cdot t_0$ . For MDM, we use  $t_1$  to represent the time required for calculate the first few modes,  $t_2$  to represent the time required to superpose for response at a certain frequency. In this way, the total time for using MDM to calculate the frequency response in the interval is  $T_1 = t_1 + m \cdot t_2$ . Using the cantilever beam mentioned above as the example. The MDM uses the first 10 order modes, and the single frequency response is calculated in two methods.  $t_0$  is 0.003s.  $t_1$  is 0.005s and  $t_2$  is less than 0.001s. So for a single frequency,  $t_1 + t_2 > t_0$ , FM requires less calculation time. For the response in frequency range, if the number of frequency samples is  $m=500$ , then the total time of FM is  $T_0 = 2.5$ s theoretically, and the total time of MDM is  $T_1 = 0.505$ s. Therefore, MDM can significantly reduce calculation time. The selection of the number of modes is also affect the total time in MDM. Figure 8 shows in MDM, the relationship between the total calculation time and the number of modes. It can be seen that they are approximately linear relation. When MDM uses all of modes, the time is similar to FM.

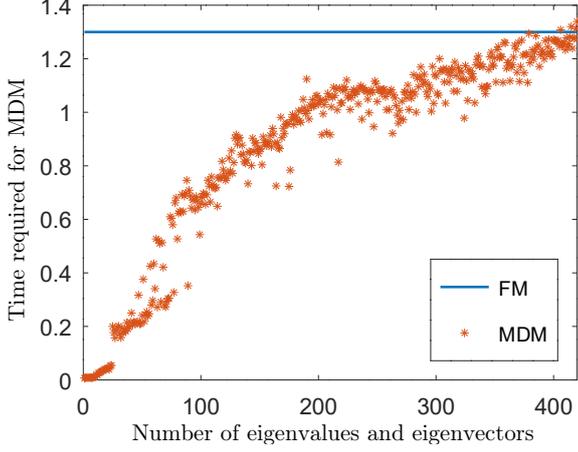


Fig. 7 Computation time of MDM as the number of eigenvectors and eigenvalues increase.

### 3. Topological derivative

To find the best material distribution in the design domain, we define a level-set function  $\phi(x)$  to continuously evolve the new boundary. The updating of the level-set function can be done through the following reaction-diffusion equation:

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi}{\partial t} = K(-\mathcal{T} + \tau \nabla^2 \phi) & \text{in } D \\ \frac{\partial \phi}{\partial n} = 0 & \text{on } \partial D \setminus \partial \Gamma_t \\ \phi = 1 & \text{on } \partial \Gamma_t \end{cases}, \quad (22)$$

where  $t$  is the fictitious time,  $K$  is the coefficient of proportionality,  $\tau$  is a regularization parameter for the fictitious interface energy,  $D$  represents the design domain.  $\mathcal{T}$  is so-called topological derivative, which determines whether the material should exist at each node, and the evolution direction of the level-set function boundary.

In this paper, topological derivatives are performed to make the sensitivity analysis. The topological derivatives represent the effect of a small hole appearing in the structure on the growth or decrease of the objective function. As shown in Figure 5, when a small hole  $\Omega_\epsilon$  with a radius  $\epsilon$  appears in the domain  $\Omega$ , the objective functional  $J$  undergoes a change  $\delta J$ . Therefore, the influence of the hole on the objective function can be expressed as:

$$\mathcal{T} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{(J + \delta J) - J}{f(\epsilon)} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\delta J}{f(\epsilon)}, \quad (23)$$

where  $f(\epsilon)$  is a positive function that  $f(\epsilon) \rightarrow 0$  when  $\epsilon \rightarrow 0$ .  $J$  is the objective functional.

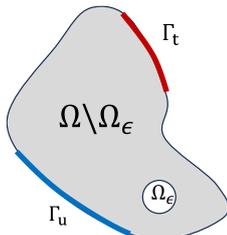


Fig. 8 Design domain  $\Omega$  generate a small hole  $\Omega_\epsilon$

The topological derivatives can be calculated by using the adjoint method. For a single frequency boundary integral objective functional:

$$F = \int_{\Gamma} f(u_i, t_i) d\Gamma, \quad (24)$$

according to references<sup>(11)(13)</sup>, the topological derivative for it can be calculated by:

$$\mathcal{T}_\omega = \frac{3(1-\nu)}{2(1+\nu)(7-5\nu)} \left\{ \frac{-(1-14\nu+15\nu^2)E}{(1-2\nu)^2} \delta_{ij} \delta_{kl} + 5E(\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \right\} \tilde{u}_{i,j}^0 u_{k,l}^0 - \rho \omega^2 \tilde{u}_i^0 u_i^0, \quad (25)$$

where  $\tilde{u}_i$  is the adjoint operator. When the problem is non-self-adjoint, it can be obtained by solve the problem:

$$C_{ijkl} u_{k,l} + \rho \omega^2 \tilde{u}_i = 0 \quad \text{in } \Omega \quad (26)$$

$$\tilde{t}_i = \frac{\partial f(u_i, t_i)}{\partial u_i} \quad \text{on } \Gamma_t \quad (27)$$

$$\tilde{u}_i = -\frac{\partial f(u_i, t_i)}{\partial t_i} \quad \text{on } \Gamma_u, \quad (28)$$

which also can be solved by MDM in adjoint field. Through this, it can greatly improve the efficiency of topology optimization. For optimization over a frequency band, the objective function can be defined as a numerical integration over a frequency interval:

$$J = \int_{\omega_1}^{\omega_2} F d\omega. \quad (29)$$

Correspondingly, the topological derivative also requires numerical integration over the frequency interval:

$$\mathcal{T} = \int_{\omega_1}^{\omega_2} \mathcal{T}_\omega d\omega. \quad (30)$$

To compare the accuracy of MDM in calculating topological derivatives, we use the aforementioned cantilever beam once again. We select a node on the beam, and then calculate the corresponding topological derivatives of the compliance objective. The frequency response interval is [100, 600]. The relative residual errors between MDM and FM are shown in Figure 9. It can be seen that the majority of the residuals are less than 1.5%. Moreover, when the number of modes exceeds 200, the residual is less than 0.5%.

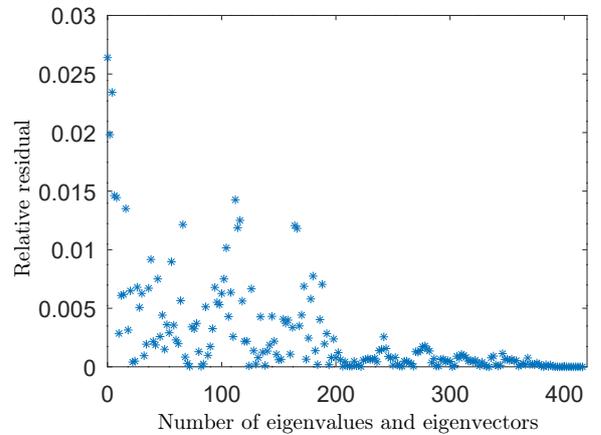


Fig. 9 Relation between the relative residual of the topological derivative and the number of selected modes.

#### 4. Numerical examples

In this section, optimization examples based on MDM and topological derivatives are presented. Also, they are compared with results obtained by FM under the same conditions. For the 2D cantilever beam, in design domain  $D$ , we look for the material distribution that minimizes the objective function  $J$ , as shown in Figure 10. The material parameters and boundary conditions remain unchanged, and the volume fraction is set to 0.4. The objective function  $J$  is the minimum compliance in the frequency interval:

$$J = \int_{\omega_1}^{\omega_2} \int_{\Gamma_t} \bar{t}_i u_i d\Gamma d\omega, \quad (31)$$

where  $\omega_1 = 100$ ,  $\omega_2 = 300$ . The mesh of the structure contains 16,186 degrees of freedom. In MDM, the number of eigenvectors and eigenvalues is  $l = 200$ . The regularization parameter  $\tau$  is equal to  $7e-4$ . Figures 11 and 12 show the results of the two methods. The structures after 50 iterations of optimization are shown in Figures 11(a) and 12(a). The changes in their respective objective functions and volume fractions with each iteration are presented in Figures 11(b) and 12(b), the time required for each optimization iteration step of FM is about 35.29s, and MDM is about 19.60s ( $\Delta\omega=1$ ). Figure 13 shows the results in the frequency interval [100, 500], with all other parameters unchanged, the time required for each optimization iteration step of FM is about 69.63s, and MDM is about 34.39s ( $\Delta\omega=1$ ).

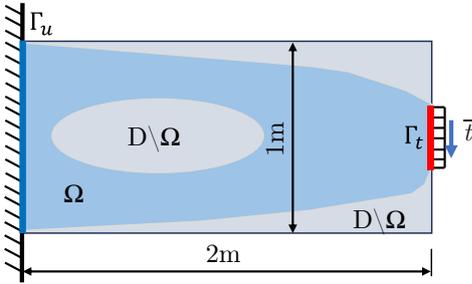
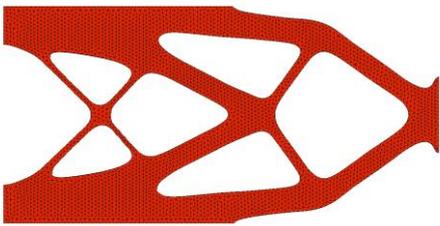
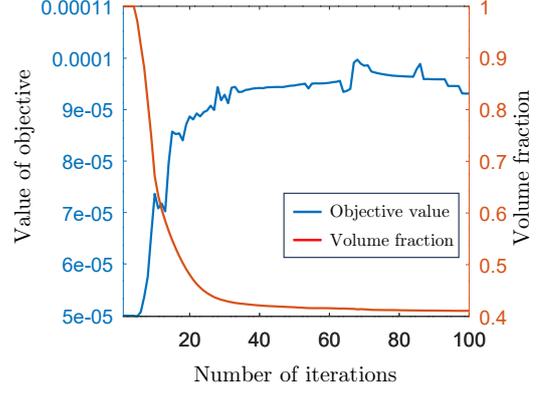


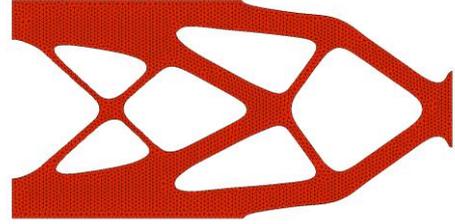
Fig. 10 Example of 2D cantilever beam.  $D$  is design domain,  $\Omega$  represents the material area,  $D \setminus \Omega$  represents the void domain.



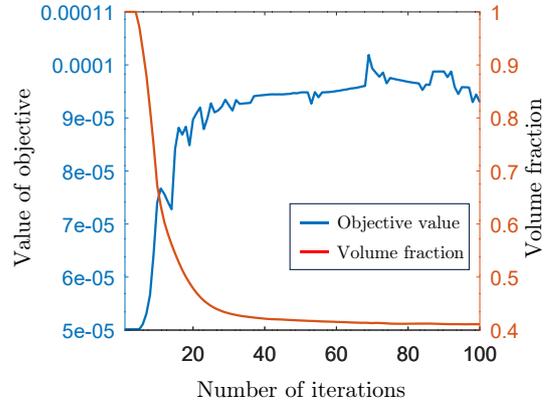
(a) Results after 50 iterations



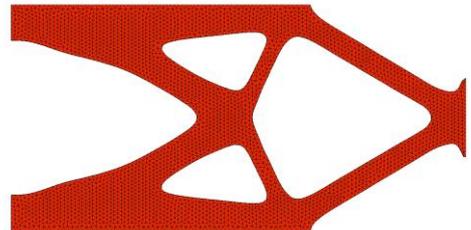
(b) Changes of objective function values and volume fractions  
Fig. 11 Result of MDM in frequency interval [100, 300].



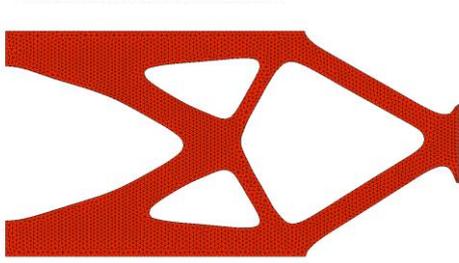
(a) Results after 50 iterations



(b) Changes of objective function values and volume fractions  
Fig. 12 Result of FM in frequency interval [100, 300].



(a)MDM



(b)FM

Fig. 13 Results of MDM and FM in frequency interval [100, 500].

The results of MDM are basically same as FM, with slight differences. The changes of corresponding objective functions and volume fractions are also roughly same. Therefore, using MDM make the topology optimization can obtain basically accurate results.

## 5. Conclusion

In calculation of frequency response in intervals, whether it is calculating the frequency response or the adjoint variable of topological derivative, compare with the full mode method, using the mode displacement method can effectively reduce the computational cost and save calculation time.

The results in Figure 12 and Figure 13 are slightly asymmetric. The possible reason is that we used the triangular elements, which lead to mesh asymmetry. Another reason may be the error caused by mode reduction, which is also the direction for improving this method in the future.

## Acknowledgement

This work was financially supported by JST SPRING, Grant Number JPMJSP2125. The author (Initial) would like to take this opportunity to thank the “Interdisciplinary Frontier Next-Generation Researcher Program of the Tokai Higher Education and Research System.”

## References

- (1) Ma, Z-D., Noboru Kikuchi, and I. Hagiwara, Structural topology and shape optimization for a frequency response problem, *Computational mechanics*, Vol 13, No. 3, (1993), pp. 157-174.
- (2) Hu Liu, Weihong Zhang and Tong Gao, A comparative study of dynamic analysis methods for structural topology optimization under harmonic force excitations, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, Vol 51, (2015), pp. 1321-1333.
- (3) Cornwell R. E., Craig Jr R. R. and Johnson C. P., On the application of the mode - acceleration method to structural engineering problems, *Earthquake engineering and structural dynamics*, Vol 11, No. 5, (1983), pp. 679-688.
- (4) Jensen and Jakob S., Topology optimization of dynamics problems with Padé approximants, *International journal for numerical methods in engineering*, Vol 72, No. 13, (2007), pp. 1605-1630.
- (5) Gil Ho Yoon, Structural topology optimization for frequency response problem using model reduction schemes, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol 199, (2010), pp. 1744-1763.
- (6) Masaki Otomori, Takayuki Yamada, Kazuhiro Izui and Shinji Nishiwaki, Matlab code for a level set-based topology optimization method using a reaction diffusion equation, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, Vol 51, (2015), pp. 1159-1172.
- (7) Luz Filho, Raquel Mattoso and Lucas Fernandez, A FreeFEM code for topological derivative-based structural optimization, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, Vol. 66, No. 4, (2023), 74.
- (8) Lopes, Cinthia Gomes, Renatha Batista dos Santos, and Antonio André Novotny, Topological derivative-based topology optimization of structures subject to multiple load-cases, *Latin American Journal of Solids and Structures*, Vol 12, (2015), pp. 834-860.
- (9) Giusti, Sebastian Miguel, Alex Ferrer, and Javier Oliver, Topological sensitivity analysis in heterogeneous anisotropic elasticity problem. Theoretical and computational aspects, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 311, (2016), pp. 134-150.
- (10) Hiroshi Isakari, Tatsuya Kitabayashi, Toru Takahashi, Toshiro Matsumoto, The topological derivative for eigenvalues related to helmholtz equation and its numerical evaluation with a fast direct BEM, *Transactions of JASCOME*, Vol. 15, (2015), pp. 31-36.
- (11) Takayuki Yamada, Hiroshi Isakari, Toshiro Matsumoto, Kazuhiro Izui, Shinji Nishiwaki, Topological derivatives and level set based topology optimization for a frequency response problem of an elastic body, *Transactions of the Japan Society for Industrial and Applied Mathematics*, Vol. 24, No. 2, (2014), pp. 139-156.
- (12) Yuta Honshuku, Hiroshi Isakari, A topology optimisation of acoustic devices based on the frequency response estimation with the Padé approximation, *Applied Mathematical Modelling*, Vol. 110, (2022), pp. 819-840.
- (13) Guzina, Bojan B., and Marc Bonnet, Topological derivative for the inverse scattering of elastic waves, *Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics*, Vol. 57, No. 2, (2004), pp. 161-179.



# 境界積分方程式で記述される形状最適化問題における 形状感度の Hilbert 正則化

## HILBERTIAN REGULARIZATION FOR SHAPE OPTIMIZATION PROBLEMS DESCRIBED VIA BOUNDARY INTEGRAL EQUATIONS

松島 慶<sup>1)</sup>, 山田 崇恭<sup>2)</sup>

Kei MATSUSHIMA and Takayuki YAMADA

1) 東京大学大学院工学系研究科 (〒 113-8656 文京区弥生 2-11-16, E-mail: matsushima@mid.t.u-tokyo.ac.jp)

2) 東京大学大学院工学系研究科 (〒 113-8656 文京区弥生 2-11-16, E-mail: t.yamada@mech.t.u-tokyo.ac.jp)

In this study, we evaluate a shape derivative and Hilbertian-regularized gradient of cost functionals associated with solutions of boundary integral equations. We focus on two-dimensional problems with smooth bounded domains and parameterize them using periodic functions. The parameterization allows us to apply the Fréchet-differential calculus in a straightforward manner. We apply the Hilbertian regularization technique to obtain a gradient (descent direction) of the cost functionals. Some numerical examples are presented to verify the obtained sensitivity.

**Key Words:** Shape derivative, Shape optimization, Boundary integral equation, Laplace equation, Regularization

### 1. 緒言

形状最適化問題は与えられた形状汎関数を最小化・最大化する形状を求める最適化問題であり、所望の物理特性を達成する構造を最適化法に基づき決定する構造最適化や、構造欠陥同定などを扱う逆問題で議論される重要な問題である<sup>(1)</sup>。

通常の数理最適化問題と同様に、形状最適化問題も非常に簡単な例を除いてその最適解を解析的に求めることはできない。したがって、形状汎関数のある種の勾配 (降下方向) を利用した勾配法を数値的に実行することで近似解を計算する方策が有力である。

多くの場合、形状汎関数の勾配は汎関数微分を与える関数として求まることになる。例えば汎関数微分として Fréchet 微分を考える場合、微分係数は形状を表現する関数の空間の双対空間の元として求まることになる。しかし、一般に双対空間の元を表現する関数は必ずしも存在するとは限らず、また見つかったとしても多くの場合元の空間に入るための正則性が不足する。これは形状最適化の分野で古くから知られている問題であり、正則性が足りない降下方向を用いることにより数値的安定性が失われ非常に波打った形状が得られるなどの現象が報告されている<sup>(2)</sup>。

この問題に対処するために、例えばスプライン曲線などを

用いて形状表現の自由度を小さくし、数値的安定性を向上させるなどの対策が取られる<sup>(3)</sup>。しかし、この方法は表現可能な形状を大きく制限することになり、形状最適化による形状設計の利点である自由度の高さを損なうことになる。

その他の方法として、境界形状あるいは勾配の正則性を高める、正則化の手続きを適宜施す方策も一般的である。畔上の  $H^1$  勾配法<sup>(2)</sup> では、正則性が不足している勾配の代わりに、それをソースとする楕円形偏微分方程式の弱解を降下方向とする。同様の方法は例えば Mohammadi and Pironneau<sup>(4)</sup> や Allaire et al.<sup>(5)</sup> によって紹介されている。Allaire et al. の記述によれば、この種の正則化は Hilbertian regularization (Hilbert 正則化) と呼ばれる手続きに一般化される。

多くの場合、形状最適化は偏微分方程式の解に陰に依存する形状汎関数を扱うため、Lipschitz 領域の変形とその上の弱解の変動を議論することが一般的である。一方で、形状最適化が扱う形状変動は境界の連続的な変形として表現できるため、境界の離散化のみで偏微分方程式を解くことができる境界要素法と相性が良い。実際、境界要素法を利用した形状最適化の例は多く報告されている<sup>(6)-(10)</sup>。さらに、境界とその上のデータが十分滑らかであれば、適切な離散化を施すことで非常に精度の良いスキームを構成することができる<sup>(11)</sup>。これは例えば汎用的な有限要素法と比較して計算コス

トの観点から大きな利点といえる。また、偏微分方程式ではなく境界積分方程式でモデル化される輻射などの物理現象を対象とする形状最適化にも有用である。

一方で、偏微分方程式の弱解に関して知られている事実と比較して境界積分方程式に関する結果は多くない。境界積分方程式の解の形状に関する Fréchet 微分に関しては、例えば Kress,<sup>(11)</sup> Colton and Kress,<sup>(12)</sup> Ammari et al.<sup>(13)</sup> が詳述している。しかし、それを引数とする汎関数微分の計算法とその勾配の正則化については議論されていない。

そこで、本研究は 2 次元問題を対象として境界積分方程式の解に依存する形状汎関数 (目的汎関数) の勾配、いわゆる形状最適化問題の設計感度を新たに導出する。本稿では形状は  $C^2$  級を仮定し、周期関数を用いてパラメトリックにこれを表現する。このパラメータ表示によって境界積分方程式を  $[0, 2\pi]$  上の積分方程式に置き換えて、解の形状に関する Fréchet 微分可能性を議論する。ここで積分作用素の Fréchet 微分に関する既存の結果<sup>(11)</sup> を利用する。その後、適当な双対系を定めることで随伴変数法を適用し、目的汎関数の Fréchet 微分係数の表現を得る。また、得られた Fréchet 微分係数に Hilbert 正則化を施し、適切な正則性を有する勾配が計算できることを示す。最後に導出した微分係数の妥当性を数値的に検証し、これを利用した簡単な形状最適化の例を示す。

## 2. 定式化

### 2.1. 準備

まず以下のように関数空間を定義する。

- $C_{2\pi} := \{\varphi \in C(\mathbb{R}) : \varphi \text{ is } 2\pi\text{-periodic}\}$
- $C_{2\pi}^k := \{\varphi \in C^k(\mathbb{R}) : \varphi \text{ is } 2\pi\text{-periodic}\} (k \in \mathbb{N})$
- $\mathcal{U}_{\text{ad}} := \{\varphi \in C_{2\pi}^2(\mathbb{R}) : \varphi(t) > 0, t \in \mathbb{R}\}$

ここで、 $C^k(\mathbb{R})$  は  $\mathbb{R}$  上で  $C^k$  級の関数全体の線形空間である。また  $C_{2\pi}$  と  $C_{2\pi}^k$  はそれぞれ以下のようにノルムを定めると Banach 空間となる。また、 $\mathcal{U}_{\text{ad}}$  は  $C_{2\pi}^2$  の開部分集合である。

$$\|\varphi\|_{C_{2\pi}} := \max_{x \in [0, 2\pi]} |\varphi(x)| \quad (1)$$

$$\|\varphi\|_{C_{2\pi}^k} := \sum_{j=0}^k \|\varphi^{(j)}\|_{C_{2\pi}} \quad (2)$$

また作用素と汎関数に関して以下を用いる。

- $\mathcal{L}(X, Y)$ : Banach 空間  $X$  から Banach 空間  $Y$  への有界線形作用素全体が成す線形空間で、作用素ノルムを備えた Banach 空間
- $X^* := \mathcal{L}(X, \mathbb{R})$ : Banach 空間  $X$  の双対空間
- $\text{isom}(X, Y)$ : Banach 空間  $X$  から Banach 空間  $Y$  への線形同型写像全体が成す線形空間で、作用素ノルムを備えた Banach 空間

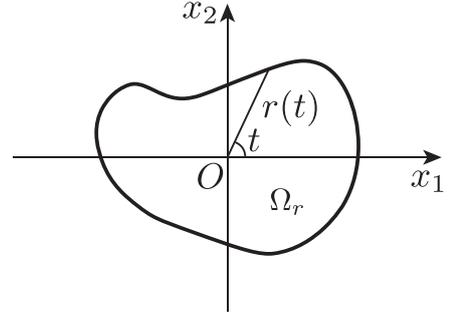


Fig. 1: Parameterized shape  $\Omega_r$ .

Banach 空間  $X$  の双対空間  $X^*$  の各元  $F \in X^*$  に関して次の表記を用いる。

$$F(\varphi) =: \langle F, \varphi \rangle_X \quad \forall \varphi \in X \quad (3)$$

Banach 空間  $X$  の開部分集合  $U$  から Banach 空間  $Y$  への写像  $F : U \rightarrow Y$  について考える。与えられた  $\varphi \in U$  に関して、ある 0 の近傍のすべての  $\hat{\varphi} \in X$  に対して

$$F(\varphi + \hat{\varphi}) = F(\varphi) + L(\hat{\varphi}) + o(\|\hat{\varphi}\|_X) \quad (4)$$

となる  $L \in \mathcal{L}(X, Y)$  が存在するとき、 $F : U \rightarrow Y$  は  $\varphi \in U$  で Fréchet 微分可能といい、 $L =: dF(\varphi) \in \mathcal{L}(X, Y)$  を  $F : U \rightarrow Y$  の  $\varphi \in U$  における Fréchet 微分係数と呼ぶ<sup>(14)</sup>。

### 2.2. 領域の定義と内部 Dirichlet 問題の境界積分方程式

周期関数  $r \in \mathcal{U}_{\text{ad}}$  が与えられたとき Fig. 1 のような  $C^2$  級かつ星状の 2 次元有界領域  $\Omega_r$  を次式で定める。

$$\partial\Omega_r = \{(r(t) \cos t, r(t) \sin t)^T : 0 \leq t \leq 2\pi\} \quad (5)$$

周期関数  $r$  が  $r \in \mathcal{U}_{\text{ad}}$  となるための条件  $r > 0$  は境界  $\partial\Omega_r$  が自己交差しないことを意味する。

ここで以下の Laplace 方程式の内部 Dirichlet 問題について考える。

$$-\Delta u_r = 0 \quad \text{in } \Omega_r \quad (6)$$

$$u_r = f|_{\partial\Omega_r} =: f_r \quad \text{on } \partial\Omega_r \quad (7)$$

ここに、 $f$  は  $\mathbb{R}^2$  上で  $C^1$  級の関数とする。

境界積分方程式

$$\frac{1}{2} v_r(x) - \int_{\partial\Omega_r} \frac{\partial G}{\partial \nu(y)}(x, y) v_r(y) ds(y) = -f_r(x) \quad \text{on } \partial\Omega_r \quad (8)$$

の唯一の解  $v_r \in C_{2\pi}$  を用いて内部 Dirichlet 問題の解は次式で与えられる<sup>(11)</sup>。

$$u_r(x) = \int_{\partial\Omega_r} \frac{\partial G}{\partial \nu(y)}(x, y) v_r(y) ds(y) \quad \text{in } \Omega_r \quad (9)$$

ここに  $G$  は 2 次元 Laplace 方程式の基本解であり、次式で与えられる。

$$G(x, y) = \frac{1}{2\pi} \log \frac{1}{|x - y|} \quad (10)$$

また、境界上の点を  $h_r(t) := (r(t) \cos t, r(t) \sin t)^T$  として  $\varphi_r(t) := v_r(h_r(t))$  かつ  $g_r(t) := -f_r(h_r(t))$  と置くと境界積分方程式 (8) は以下の  $[0, 2\pi]$  上の積分方程式として書き表すことができる。

$$\frac{1}{2}\varphi_r(t) - \int_0^{2\pi} k_r(t, \tau)\varphi_r(\tau)d\tau = g_r(t) \quad (11)$$

ここに、外向き単位法線ベクトルを

$$\nu_r(t) := ((r(t) \sin t)', -(r(t) \cos t)')^T / |h_r'(t)| \quad (12)$$

として

$$\begin{aligned} k_r(t, \tau) &:= |h_r'(\tau)|\nu_r(\tau) \cdot \nabla_y G(h_r(t), y)|_{y=h_r(\tau)} \\ &= \frac{|h_r'(\tau)|\nu_r(\tau) \cdot (h_r(t) - h_r(\tau))}{2\pi|h_r(t) - h_r(\tau)|^2} \end{aligned} \quad (13)$$

で定義した。このカーネル  $k_r$  は連続であり、特に

$$k_r(t, t) = \frac{h_r''(t) \cdot \nu_r(t)}{4\pi|h_r'(t)|} \quad (14)$$

である。

本研究の目的は、形状  $r$  と内部 Dirichlet 問題の解  $u_r$  を引数とする汎関数の  $r$  に関する Fréchet 微分係数、いわゆる形状導関数を求めることである。解  $u_r$  は式 (9) を通して  $\varphi_r \in C_{2\pi}$  で表現できるから、 $r \in \mathcal{U}_{\text{ad}}$  と  $\varphi_r \in C_{2\pi}$  を引数とする汎関数  $J(r, \varphi_r)$  について考えれば良い。すなわち、形状最適化問題

$$\inf_{r \in \mathcal{U}_{\text{ad}}} J(r, \varphi_r) \quad (15)$$

を勾配法を用いて数値的に解くための形状感度について議論する。

この汎関数  $J: \mathcal{U}_{\text{ad}} \times C_{2\pi} \rightarrow \mathbb{R}$  が  $(r, \varphi_r)$  で Fréchet 微分可能であると仮定し、 $\mathcal{U}_{\text{ad}} \ni r \mapsto J(r, \varphi_r) =: j(r)$  の Fréchet 微分係数  $j'(r) \in (C_{2\pi}^2)^*$  を以下で導出する。

### 2.3. 領域変動に関する Fréchet 微分

まず積分方程式 (11) 右辺について、 $\mathcal{U}_{\text{ad}} \ni r \mapsto g_r \in C_{2\pi}$  の Fréchet 微分について考える。 $\hat{r} \in C_{2\pi}^2$  とすると

$$\begin{aligned} g_{r+\hat{r}}(t) &= -f(h_{r+\hat{r}}(t)) \\ &= -f(h_r(t) + h_{\hat{r}}(t)) \\ &= -f(h_r(t)) - h_{\hat{r}}(t) \cdot \nabla f(h_r(t)) + o(\|\hat{r}\|_{C_{2\pi}^2}) \end{aligned} \quad (16)$$

と評価でき、また  $\hat{r} \mapsto h_{\hat{r}}(t) \cdot \nabla f(h_r(t))$  は有界だから  $\mathcal{U}_{\text{ad}} \ni r \mapsto g_r \in C_{2\pi}$  の Fréchet 微分係数  $g_r' \in \mathcal{L}(C_{2\pi}^2, C_{2\pi})$  は

$$g_r'[\hat{r}] = -h_{\hat{r}}(t) \cdot \nabla f(h_r(t)) \quad (17)$$

で与えられる。

次に積分方程式 (11) の解について、 $r \mapsto \varphi_r$  が Fréchet 微分可能であることを確かめる。まず積分作用素  $K_r: C_{2\pi} \rightarrow C_{2\pi}$  を次式で定義する。

$$(K_r \varphi)(t) = \int_0^{2\pi} k_r(t, \tau)\varphi_r(\tau)d\tau \quad (18)$$

カーネル  $k_r$  は連続であるから  $K_r: C_{2\pi} \rightarrow C_{2\pi}$  はコンパクト作用素である。また  $\mathcal{U}_{\text{ad}} \ni r \mapsto K_r \in \mathcal{L}(C_{2\pi}, C_{2\pi})$  は Fréchet 微分可能であり、その微分係数  $K_r' \in \mathcal{L}(C_{2\pi}^2, \mathcal{L}(C_{2\pi}, C_{2\pi}))$  は次式で表される<sup>(11)</sup>。

$$(K_r'[\hat{r}]\varphi)(t) = \int_0^{2\pi} k_r'(t, \tau; \hat{r})\varphi(\tau)d\tau \quad (19)$$

ここに、カーネル  $k_r'$  は次式で定義される。

$$\begin{aligned} k_r'(t, \tau; \hat{r}) &= \frac{|h_{\hat{r}}'(\tau)|\nu_{\hat{r}}(\tau) \cdot (h_r(t) - h_r(\tau))}{2\pi|h_r(t) - h_r(\tau)|^2} - \frac{|h_r'(\tau)|}{2\pi|h_r(t) - h_r(\tau)|^2} \\ &\times \left[ 2 \frac{[(h_r(t) - h_r(\tau)) \cdot \nu_r(\tau)][(h_r(t) - h_r(\tau)) \cdot (h_{\hat{r}}(t) - h_{\hat{r}}(\tau))] - (h_{\hat{r}}(t) - h_{\hat{r}}(\tau)) \cdot \nu_r(\tau)}{|h_r(t) - h_r(\tau)|^2} \right] \end{aligned} \quad (20)$$

このカーネル  $k_r'$  もまた連続であり、実際  $t = \tau$  で以下の値を取る。

$$\begin{aligned} k_r'(t, t; \hat{r}) &= \frac{1}{4\pi|h_r'(t)|^2} \left[ |h_r'(t)|\nu_r(t) \cdot h_{\hat{r}}''(t) + |h_{\hat{r}}'(t)|\nu_{\hat{r}}(t) \cdot h_r''(t) \right. \\ &\quad \left. - 2(h_r''(t) \cdot \nu_r(t)) \frac{h_r'(t) \cdot h_{\hat{r}}'(t)}{|h_r'(t)|} \right] \end{aligned} \quad (21)$$

また第二種 Fredholm 方程式 (8) の可解性に関する結果<sup>(11)</sup> から任意の  $r \in \mathcal{U}_{\text{ad}}$  で  $\frac{1}{2}I - K_r \in \text{isom}(C_{2\pi}, C_{2\pi})$  である。よって Banach 空間上の逆写像の微分公式 (Lang,<sup>(15)</sup> Proposition 3.9) より  $r \mapsto (\frac{1}{2}I - K_r)^{-1}g_r = \varphi_r$  は Fréchet 微分可能である。

### 2.4. 随伴変数法による汎関数微分の計算

以上の考察から  $r \mapsto j(r)$  が Fréchet 微分可能であることが確かめられた。本小節ではその具体的な計算方法について議論する。以降は簡単のために、 $r$  を固定した  $\varphi$  に関する  $J$  の Fréchet 微分係数が

$$\langle d_\varphi J(r, \varphi), \hat{\varphi} \rangle_{C_{2\pi}} = \langle J'_\varphi(r, \varphi), \hat{\varphi} \rangle_{C_{2\pi}, C_{2\pi}} \quad \forall \hat{\varphi} \in C_{2\pi} \quad (22)$$

となる  $J'_\varphi(r, \varphi) \in C_{2\pi}$  が存在すると仮定する。ここに  $\langle \cdot, \cdot \rangle_{C_{2\pi}, C_{2\pi}}: C_{2\pi} \times C_{2\pi} \rightarrow \mathbb{R}$  は次式で定義される非退化な双線形形式である。

$$\langle \varphi, \psi \rangle_{C_{2\pi}, C_{2\pi}} := \int_0^{2\pi} \varphi(t)\psi(t)dt \quad (23)$$

この双線形形式により定められる双対系  $\langle C_{2\pi}, C_{2\pi} \rangle$  における随伴変数を用いて、目的汎関数  $j(r)$  の Fréchet 微分係数  $j'(r) \in (C_{2\pi}^2)^*$  を計算する。まず Lagrange 汎関数  $L: \mathcal{U}_{\text{ad}} \times C_{2\pi} \times C_{2\pi} \rightarrow \mathbb{R}$  を次式で定義する。

$$L(r, \varphi, \psi) := J(r, \varphi) + \left\langle \psi, \left( \frac{1}{2}I - K_r \right) \varphi - g_r \right\rangle_{C_{2\pi}, C_{2\pi}} \quad (24)$$

特に  $\varphi = \varphi_r$  を選ぶと、 $j(r) = L(r, \varphi_r, \psi)$  を得る。また、随伴変数  $\psi_r \in C_{2\pi}$  を次式を満たすように定める。

$$\begin{aligned}
0 &= \langle d_\varphi L(r, \varphi, \psi_r), \hat{\varphi} \rangle_{C_{2\pi}} \\
&= \langle d_\varphi J(r, \varphi), \hat{\varphi} \rangle_{C_{2\pi}} + \left\langle \psi_r, \left( \frac{1}{2}I - K_r \right) \hat{\varphi} \right\rangle_{C_{2\pi}, C_{2\pi}} \\
&= \langle J'_\varphi(r, \varphi), \hat{\varphi} \rangle_{C_{2\pi}, C_{2\pi}} + \left\langle \psi_r, \left( \frac{1}{2}I - K_r \right) \hat{\varphi} \right\rangle_{C_{2\pi}, C_{2\pi}} \\
&= \left\langle \left( \frac{1}{2}I - K_r^* \right) \psi_r + J'_\varphi(r, \varphi), \hat{\varphi} \right\rangle_{C_{2\pi}, C_{2\pi}} \quad \forall \hat{\varphi} \in C_{2\pi}
\end{aligned} \tag{25}$$

ここで  $K_r$  はコンパクト作用素であり従って  $\frac{1}{2}I - K_r : C_{2\pi} \rightarrow C_{2\pi}$  が有界であることを用いた。また  $K_r^*$  は  $K_r$  の  $\langle C_{2\pi}, C_{2\pi} \rangle$  に関する随伴作用素であり、次式で与えられる。

$$(K_r^* \psi)(t) = \int_0^{2\pi} k_r(\tau, t) \psi(\tau) d\tau \tag{26}$$

問題 (25) は次の随伴方程式と等価である。

$$\left( \frac{1}{2}I - K_r^* \right) \psi_r = -J'_\varphi(r, \varphi) \tag{27}$$

Fredholm の交代定理より随伴方程式 (27) は積分方程式 (11) と同様に well-posed である。

これらを利用して Fréchet 微分係数を連鎖律を用いて計算すると次式を得る。

$$\begin{aligned}
\langle j'(r), \hat{r} \rangle_{C_{2\pi}^2} &= \langle d_r L(r, \varphi, \psi) |_{\varphi=\varphi_r, \psi=\psi_r, \hat{r}} \rangle_{C_{2\pi}^2} \\
&\quad + \langle d_\varphi L(r, \varphi, \psi_r) |_{\varphi=\varphi_r, \varphi'_r[\hat{r}]} \rangle_{C_{2\pi}} \\
&\quad + \langle d_\psi L(r, \varphi_r, \psi) |_{\psi=\psi, \psi'_r[\hat{r}]} \rangle_{C_{2\pi}} \\
&= \langle d_r L(r, \varphi, \psi) |_{\varphi=\varphi_r, \psi=\psi_r, \hat{r}} \rangle_{C_{2\pi}^2} \\
&= \langle d_r J(r, \varphi) |_{\varphi=\varphi_r, \hat{r}} \rangle_{C_{2\pi}^2} \\
&\quad - \langle \psi_r, K'_r[\hat{r}] \varphi_r + g'_r[\hat{r}] \rangle_{C_{2\pi}, C_{2\pi}} \tag{28}
\end{aligned}$$

## 2.5. Hilbert 正則化による汎関数勾配の計算

前小節で目的汎関数  $j : \mathcal{U}_{\text{ad}} \rightarrow \mathbb{R}$  の Fréchet 微分係数  $j'(r) \in (C_{2\pi}^2)^*$  が求まったが、勾配法で必要となるものは微分係数ではなく次式を満たす勾配  $\nabla j(r) \in C_{2\pi}^2$  である。

$$\langle j'(r), \nabla j(r) \rangle_{C_{2\pi}^2} > 0 \tag{29}$$

$C_{2\pi}^2$  は Hilbert 空間でないから、これを満たす勾配  $\nabla j(r) \in C_{2\pi}^2$  は即座には定まらない。また、部分積分などを用いて

$$\langle j'(r), \hat{r} \rangle_{C_{2\pi}^2} = \int_0^{2\pi} \psi(t) \hat{r}(t) dt \quad \forall \hat{r} \in C_{2\pi}^2 \tag{30}$$

となる関数  $\psi$  が形式的に見つかった場合でも、一般に  $\psi \in C_{2\pi}^2$  となる保証はない。そこで、本研究は以下で述べる Hilbert 正則化<sup>(5)</sup> を用いて勾配を計算する。

まず  $C_{2\pi}^2$  に連続に埋め込まれる Hilbert 空間を用意する。例えば Sobolev 空間の埋め込み (Saranen and Vainikko,<sup>(16)</sup> Lemma 5.3.3) から  $k \geq 3$  で  $H_{2\pi}^k \hookrightarrow C_{2\pi}^2$  が成り立つから、こ

の Hilbert 空間に  $H_{2\pi}^k$  を選ぶことができる。ここに

$$H_{2\pi}^k := \left\{ \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_m e^{imt} : c_m \in \mathbb{C}, \sum_{m=-\infty}^{\infty} (1+m^2)^k |c_m|^2 < \infty \right\} \tag{31}$$

は周期 Sobolev 空間であり、定数  $\alpha > 0$  を用いて次式で定義される内積を備えた Hilbert 空間である。

$$(\varphi, \psi)_{H_{2\pi}^k} := \sum_{m=-\infty}^{\infty} (1 + \alpha m^2)^k \varphi_m \bar{\psi}_m \tag{32}$$

$$\varphi_m = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \varphi(t) e^{-imt} dt \tag{33}$$

$$\psi_m = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \psi(t) e^{-imt} dt \tag{34}$$

この Hilbert 空間  $H_{2\pi}^k$  を用いて、以下の問題の解として勾配  $\nabla j(r) \in H_{2\pi}^k$  を求める。

$$\begin{aligned}
\text{Find } \nabla j(r) \in H_{2\pi}^k \text{ such that } (\nabla j(r), \psi)_{H_{2\pi}^k} &= \langle j'(r), \psi \rangle_{C_{2\pi}^2} \\
&\text{for all } \psi \in H_{2\pi}^k
\end{aligned} \tag{35}$$

これは Lax–Milgram の定理より well-posed である。この問題の唯一の解として定まる勾配  $\nabla j(r) \in H_{2\pi}^k$  は次式を満たすことが分かる。

$$\langle j'(r), \nabla j(r) \rangle_{C_{2\pi}^2} = (\nabla j(r), \nabla j(r))_{H_{2\pi}^k} = \|\nabla j(r)\|_{H_{2\pi}^k}^2 > 0 \tag{36}$$

すなわち  $-\nabla j(r)$  は  $j(r)$  の降下方向である。

## 3. 離散化

### 3.1. 積分方程式の求解

本研究は Kress の選点法を用いて積分方程式 (11) と (27) を数的に解く。まず  $C_{2\pi}$  の  $2N$  次元部分空間として

$$\begin{aligned}
V_h &:= \text{span}\{1, \cos t, \cos 2t, \dots, \cos(N-1)t \\
&\quad \sin t, \sin 2t, \dots, \sin(N-1)t, \sin Nt\} \tag{37}
\end{aligned}$$

を選ぶ。  $V_h$  の基底として、節点を  $t = t_j := \pi j/N$  ( $j = 0, 1, \dots, 2N-1$ ) とする以下の Lagrange 基底関数  $L_j \in V_h$  ( $j = 0, \dots, 2N-1$ ) を選ぶことができる。

$$L_j(t) = \frac{1}{2N} \left[ 1 + \cos N(t-t_j) + 2 \sum_{l=1}^{N-1} \cos l(t-t_j) \right] \tag{38}$$

この部分空間  $V_h$  と  $t = t_j$  における選点を用いて、積分方程式 (11) を次式で離散化する。

$$\text{Find } \varphi_r^h \in V_h \text{ such that } \left[ \left( \frac{1}{2}I - K_r \right) \varphi_r^h \right] (t_i) = g_r(t_i) \tag{39}$$

ここで  $\varphi_r^h \in V_h$  を未知の係数  $\Phi_j^r \in \mathbb{R}$  ( $j = 0, \dots, 2N-1$ ) を用いて以下のように Lagrange 基底関数で展開する。

$$\varphi_r^h(t) = \sum_{j=0}^{2N-1} \Phi_j^r L_j(t) \tag{40}$$

これを式 (39) に代入すると以下の連立一次方程式が得られる。

$$\sum_{j=0}^{2N-1} \mathcal{A}_{ij}^r \Phi_j^r = g_r(t_i) \quad (41)$$

ここに、係数行列は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{ij}^r &:= \left[ \left( \frac{1}{2}I - K_r \right) L_j \right] (t_i) \\ &= \frac{1}{2} \delta_{ij} - (K_r L_j)(t_i) \\ &\simeq \frac{1}{2} \delta_{ij} - \frac{\pi}{N} k_r(t_i, t_j) \end{aligned} \quad (42)$$

随伴方程式 (27) に関してもまったく同様に離散化を施す。

### 3.2. 形状表現の離散化

次に、形状の表現に用いる空間  $C_{2\pi}^2$  に適合する部分空間を構成する。積分方程式の密度の離散化に用いた  $V_h \subset C_{2\pi}$  は  $V_h \subset C_{2\pi}^2$  であるが、 $V_h$  は微分に関して閉じていないため適切な部分空間とはならない。実際、 $\sin Nt \in V_h$  の導関数は明らかに  $V_h$  に入らない。つまり、 $r \in U_h$  ならば  $r', r'' \in U_h$  となる  $C^{2\pi}$  の有限次元部分空間  $U_h$  を別に構成する必要がある。

本研究はこの要件を満たす  $U_h \subset C_{2\pi}^2$  に以下を選ぶ。

$$U_h := \text{span}\{1, \cos t, \cos 2t, \dots, \cos(M-1)t, \sin t, \sin 2t, \dots, \sin(M-1)t\} \quad (43)$$

すなわち、 $2M-1$  個の係数  $A_0, \dots, A_{N-1}, B_1, \dots, B_{N-1}$  を用いて次式で  $r \in U_h$  を表現する。

$$r(t) = \sum_{m=0}^{M-1} A_m \cos mt + \sum_{m=1}^{M-1} B_m \sin mt \quad t \in [0, 2\pi] \quad (44)$$

積分方程式の離散化 (42) で用いた台形則による数値積分の精度を考慮して、形状表現の自由度  $M$  は  $M < 2N$  であるとする。また、汎関数勾配  $\nabla j(u) \in H_{2\pi}^k$  の近似  $\nabla_h j(u) \in U_h$  を計算するために問題 (35) を以下で離散化する。

$$\begin{aligned} \text{Find } \nabla_h j(r) \in U_h \text{ such that } (\nabla_h j(r), \psi)_{H_{2\pi}^k} &= \langle j'(r), \psi \rangle_{C_{2\pi}^2} \\ &\text{for all } \psi \in U_h \end{aligned} \quad (45)$$

テスト関数  $\psi \in U_h$  に  $U_h$  の基底を選ぶことで次式が得られる。

$$(\nabla_h j(r))(t) = \sum_{m=0}^{M-1} C_m \cos mt + \sum_{m=1}^{M-1} D_m \sin mt \quad (46)$$

$$C_m =: \frac{2\langle j'(r), \cos mt \rangle_{C_{2\pi}^2}}{(1 + \alpha m^2)^k} \quad (m \geq 1) \quad (47)$$

$$C_0 =: \langle j'(r), 1 \rangle_{C_{2\pi}^2} \quad (48)$$

$$D_m =: \frac{2\langle j'(r), \sin mt \rangle_{C_{2\pi}^2}}{(1 + \alpha m^2)^k} \quad (49)$$

### 3.3. discretize-then-optimize により求められる目的汎関数の偏微分係数

有限次元空間  $U_h$  上で汎関数  $j$  の勾配を求める方法は前章節で記述した提案法に限られない。従来からよく用いられて

いる簡便な方法は、いわゆる discretize-then-optimize と呼ばれる以下の手続きで一般的に記述できる。

$X$  を Banach 空間、 $U$  を  $X$  の開部分集合として、Fréchet 微分可能な汎関数  $l : U \rightarrow \mathbb{R}$  の降下方向の数値計算について考える。 $X$  から適当に選ばれた  $M$  個の線形独立な元  $w_1, \dots, w_M$  により構成される部分空間

$$X_h = \text{span}\{w_1, w_2, \dots, w_M\} \quad (50)$$

を用いて、 $l : X_h \cap U \rightarrow \mathbb{R}$  の勾配は以下のように計算できる。

$$\tilde{\nabla} l(w) := \sum_{i=1}^M \langle l'(w), w_i \rangle_X w_i \quad (51)$$

ここに、 $l'(w) \in X^*$  は  $l : U \rightarrow \mathbb{R}$  の  $w \in X_h \cap U$  における Fréchet 微分係数である。例えば  $X_h$  が Lagrange 要素による有限要素空間であるとき、この勾配  $\tilde{\nabla} l(w) \in X_h$  は汎関数  $l$  の節点値に関する偏微分係数を並べたベクトルと形状関数から容易に計算できる。

目的汎関数  $j : \mathcal{U}_{\text{ad}} \rightarrow \mathbb{R}$  にこの discretize-then-optimize 法を適用すると次式を得る。

$$(\tilde{\nabla} j(r))(t) = \sum_{m=0}^{M-1} \tilde{C}_m \cos mt + \sum_{m=1}^{M-1} \tilde{D}_m \sin mt \quad (52)$$

$$\tilde{C}_m =: \langle j'(r), \cos mt \rangle_{C_{2\pi}^2} \quad (53)$$

$$\tilde{D}_m =: \langle j'(r), \sin mt \rangle_{C_{2\pi}^2} \quad (54)$$

### 3.4. 勾配法

汎関数勾配  $\nabla_h j(r)$  (あるいは  $\tilde{\nabla} j(r)$ ) を用いることで、最小化問題 (15) の局所最適解の候補を探索するための勾配法を構成することができる。適当な初期値  $r_0 \in U_h$  を  $r_0 \in \mathcal{U}_{\text{ad}}$  となるように与えて、以下のアルゴリズムで  $r_1, r_2, \dots \in U_h$  を計算する。

$$r_{i+1} = r_i - \varepsilon_i \nabla_h j(r_i) \quad (55)$$

ここで、ステップ幅  $\varepsilon_i > 0$  は  $r_{i+1} \in \mathcal{U}_{\text{ad}}$  となるように十分小さい値を取るものとする。本研究はさらに Armijo の条件

$$\begin{aligned} j(r_i - \varepsilon_i \nabla_h j(r_i)) &\leq j(r_i) - c\varepsilon_i \langle j'(r_i), \nabla_h j(r_i) \rangle_{C_{2\pi}^2} \\ &= j(r_i) - c\varepsilon_i \|\nabla_h j(r_i)\|_{H_{2\pi}^k}^2 \end{aligned} \quad (56)$$

を満たすようにステップ幅  $\varepsilon_i$  を定める。ここに、 $0 < c < 1$  は定数である。この直線探索はバックトラック法を用いて実施する。

## 4. 数値例

### 4.1. 形状導関数の検証

まず導出した形状導関数 (28) の検証を行う。例として、与えられた観測点  $\bar{x} \in \Omega_r$  におけるポテンシャル

$$\begin{aligned} J(r, \varphi_r) &= u_r(\bar{x}) \\ &= \int_0^{2\pi} \frac{|h_r'(\tau)| \nu_r(\tau) \cdot (\bar{x} - h_r(\tau))}{2\pi |\bar{x} - h_r(\tau)|^2} \varphi_r(\tau) d\tau \end{aligned} \quad (57)$$

Table 1: Comparison with the shape derivative (28) and finite difference of  $j(r)$  for various  $\varepsilon$ .

$\varepsilon$	$\langle j'(r), \hat{r} \rangle_{C_{2\pi}^2}$	$j(r + \hat{r}) - j(r)$
$10^{-1}$	$9.2718558840 \times 10^{-2}$	$9.0251435633 \times 10^{-2}$
$10^{-2}$	$9.2718558840 \times 10^{-3}$	$9.2672850514 \times 10^{-3}$
$10^{-3}$	$9.2718558840 \times 10^{-4}$	$9.2715978824 \times 10^{-4}$
$10^{-4}$	$9.2718558840 \times 10^{-5}$	$9.2718320717 \times 10^{-5}$
$10^{-5}$	$9.2718558840 \times 10^{-6}$	$9.2718535226 \times 10^{-6}$
$10^{-6}$	$9.2718558840 \times 10^{-7}$	$9.2718556473 \times 10^{-7}$
$10^{-7}$	$9.2718558840 \times 10^{-8}$	$9.2718558678 \times 10^{-8}$
$10^{-8}$	$9.2718558840 \times 10^{-9}$	$9.2718558387 \times 10^{-9}$

を目的汎関数とする。このとき随伴方程式 (27) の右辺は

$$J'_\varphi(r, \varphi)(t) = \frac{|h'_r(t)|\nu_r(t) \cdot (\bar{x} - h_r(t))}{2\pi|\bar{x} - h_r(t)|^2} \quad (58)$$

となり、また式 (28) 右辺第一項は次式となる。

$$\begin{aligned} & \langle d_r J(r, \varphi), \hat{r} \rangle_{C_{2\pi}^2} \\ &= \int_0^{2\pi} \frac{1}{2\pi|\bar{x} - h_r(\tau)|^2} \left[ |h'_r(\tau)|\nu_r(\tau) \cdot (\bar{x} - h_r(\tau)) \right. \\ & \quad - |h'_r(\tau)|\nu_r(\tau) \cdot h_r(\tau) + \frac{2(\bar{x} - h_r(\tau)) \cdot h_r(\tau)}{|\bar{x} - h_r(\tau)|^2} \\ & \quad \left. \times |h'_r(\tau)|\nu_r(\tau) \cdot (\bar{x} - h_r(\tau)) \right] \varphi(\tau) d\tau \quad (59) \end{aligned}$$

ソースの分布を  $f(x) = \sin(2x_1 + 3x_2)$ 、観測点を  $\bar{x} = (0, 0)^T$ 、形状を  $r(t) = 1 + 0.4 \sin 3t$ 、その摂動を十分小さい  $\varepsilon > 0$  を用いて  $\hat{r}(t) = \varepsilon \cos 2t$  で与えた際の式 (57) で定義される汎関数  $j$  の Fréchet 微分係数 (28) と対応する差分近似  $j(r + \hat{r}) - j(r)$  の値を計算した結果を Table. 1 に記す。ここで、選点の数は  $2N = 100$  とした。この結果から十分小さい  $\varepsilon > 0$  で Fréchet 微分係数の値と差分近似の値がほぼ一致していることが分かる。よって導出された形状導関数の妥当性が確かめられた。

## 4.2. 形状最適化の例

最後に、導出された汎関数勾配を用いた形状最適化の例を示す。本小節ではソース分布を

$$f(x) = (|x|^2 - 1 - 1.5 \sin x_1 \sin 2x_2)^2 \quad (60)$$

として、目的汎関数は式 (57) を用いる。また、観測点に関しても同様に  $\bar{x} = (0, 0)^T$  を用いる。形状表現の自由度は  $M = 80$ 、選点の数は  $2N = 320$  とする。

ソース  $f$  は  $f \geq 0$  であり、その零等値線は原点を囲む滑らかな閉曲線であるから、最小化問題 (15) は  $\partial\Omega_r$  がこの等値線と一致するときに最小値  $j(r) = 0$  を達成することが期待される。

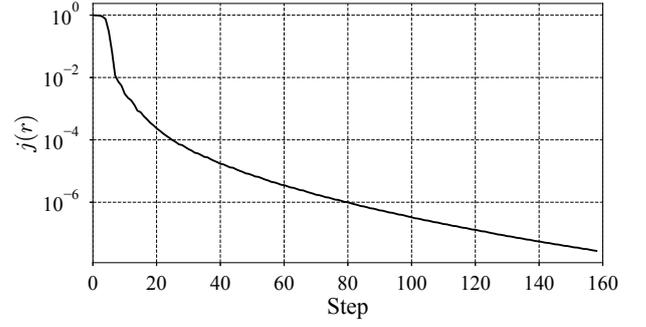


Fig. 2: Convergence history of the objective functional  $j$ .

初期形状を原点中心の半径 0.1 の円として 3.4 節の勾配法を実行した結果を示す。まず、正則化のパラメータに  $k = 3$ 、 $\alpha = 10^{-3}$  を選んで最適化を実行した際の目的汎関数の値の履歴と得られた形状をそれぞれ Fig. 2, 3 に示す。ここで、収束条件は  $\|\nabla_h j(r)\|_{H_{2\pi}^k} < 10^{-4}$ 、Armijo 条件の定数は  $c = 0.1$  とした。この結果から、初期形状から広がった形状が最終的に  $f = 0$  の等値線に到達し、ほぼ  $j(r) = 0$  を達成していることが分かる。

次に、Hilbert 正則化による勾配の正則化の効果を確認するために、 $k = 0$  として同じ最適化計算を実行する。このとき  $H_{2\pi}^k = L^2[0, 2\pi] \not\subset C_{2\pi}^2$  であるから、計算される勾配は適当な正則性を有していない可能性がある。得られた結果を Fig. 4 に示す。この結果から、Step 5 までは正則化を施した場合とおおよそ同じ過程を辿るが、Step 6 から形状の波打ちが見受けられる。この現象は以後のステップで悪化し続け、Fig. 3 と同様の形状を得ることができない。

次に、提案手法によって得られた勾配  $\nabla_h j(r)$  を、従来法である discretize-then-optimize 法によって得られた  $\tilde{\nabla} j(r)$  に置き換えた場合について検討する。本数値例では離散化のパラメータに  $M = 160$  および  $2N = 640$  を選ぶ。その他のパラメータと目的汎関数、初期形状は前数値例と同じものを用いる。以上の設定で形状最適化を実行した結果を Fig. 5 に示す。この結果から、従来法は  $k = 0$  を選んだ場合と同様に形状が波打つ現象が発生していることが分かる。一方で、提案法は前数値例と同様の形状が得られており、形状表現の自由度を表すパラメータ  $M$  が増大した場合も安定に最適化が実行できることが確かめられた。

## 5. 結言

本研究は、境界積分方程式に記述される状態場に依存する目的汎関数の Fréchet 微分を随伴変数法に基づき計算した。また、この Fréchet 微分係数に Hilbert 正則化を施すことで適切な汎関数勾配が得られることを示した。また、これらは数値例を通して妥当であることを確認した。

本研究は簡単のために Laplace 方程式の内部 Dirichlet 問題の境界積分方程式を対象としたが、同様の手順は他の境界積分方程式、特に第二種 Fredholm 積分方程式に容易に適用可能であると思われる。その際、確認すべき事項として (1)

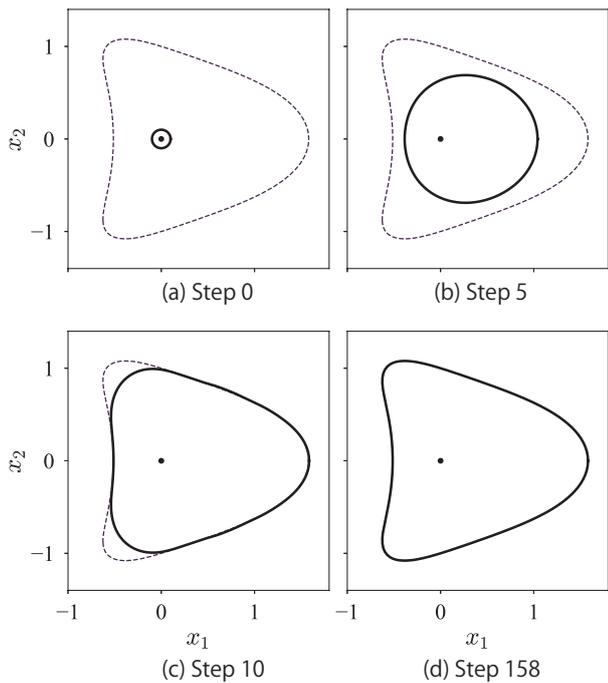


Fig. 3: Obtained shapes during the shape optimization for  $k = 3$ . The dotted lines represent the zero iseline of  $f$ . The dot indicates the observation point  $\bar{x} = (0, 0)^T$ .

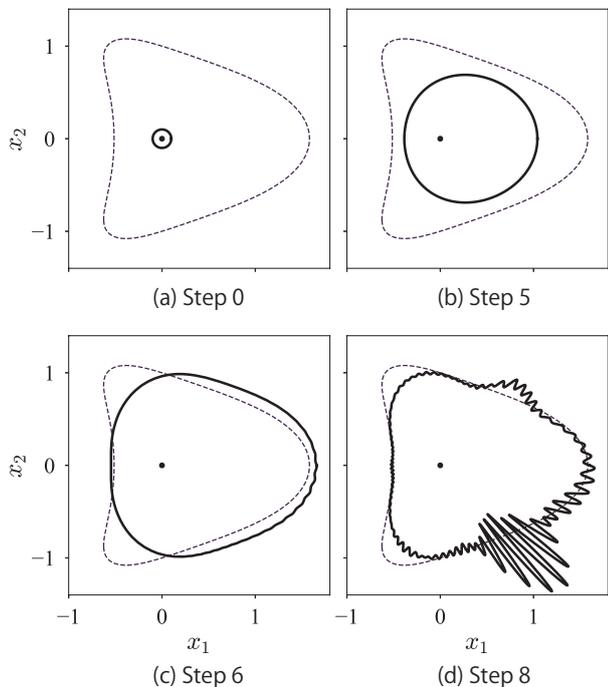
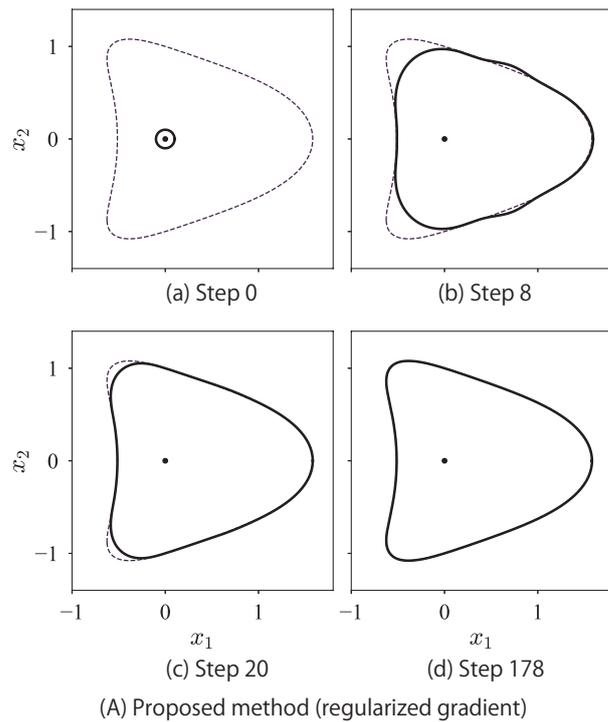
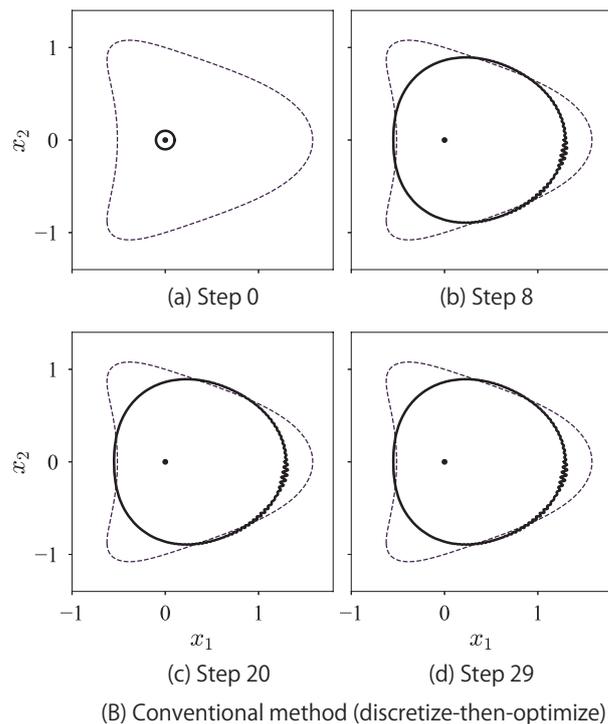


Fig. 4: Obtained shapes during the shape optimization for  $k = 0$ . The dotted lines represent the zero iseline of  $f$ . The dot indicates the observation point  $\bar{x} = (0, 0)^T$ .



(A) Proposed method (regularized gradient)



(B) Conventional method (discretize-then-optimize)

Fig. 5: Obtained shapes during the shape optimization with the regularized-gradient approach (A) and discretize-then-optimize method (B). The dotted lines represent the zero iseline of  $f$ . The dot indicates the observation point  $\bar{x} = (0, 0)^T$ .

任意の  $r \in \mathcal{U}_{\text{ad}}$  における境界積分方程式の可解性 (2) 層ポテンシャルの Fréchet 微分により得られる積分作用素のカーネルの特異性が挙げられる。例えば Helmholtz 方程式の外部問題を考える場合、(1) は見かけの固有値の影響を受けない適当な境界積分方程式を用いれば十分であり、(2) に関しては Colton and Kress<sup>(12)</sup> で多くの結果が述べられている。

また本論文は星状の 2 次元領域のみを対象としたが、星状を仮定しない一般の形状の最適化には、最適化過程における境界の自己交差を防ぐための手法が必要となる。また、境界が角を含むなどの  $C^2$  級でない形状を扱うためには本論文の定式化を大幅に変更する必要がある。これらに関する詳細な検討は本研究の今後の課題である。

## 6. 謝辞

本研究は以下の JSPS 科研費の助成を受けたものです。

- JP22K14166
- JP23H03413
- JP23H03798

## 参考文献

- (1) Sokolowski, J. and Zolesio, J.P. *Introduction to shape optimization*, pp. 5–12. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 1992.
- (2) 畔上秀幸. 形状最適化問題. 森北出版, 2016.
- (3) Braibant, V. and Fleury, C. Shape optimal design using B-splines. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 44, No. 3, pp. 247–267, 1984.
- (4) Mohammadi, B. and Pironneau, O. *Applied shape optimization for fluids*. OUP Oxford, 2009.
- (5) Allaire, G., Dapogny, C., and Jouve, F. Shape and topology optimization. In *Geometric Partial Differential Equations - Part II*, Vol. 22 of *Handbook of Numerical Analysis*, pp. 1–132. Elsevier, 2021.
- (6) Lee, B.Y. and Kwak, B.M. Shape optimization of two-dimensional thermoelastic structures using boundary integral equation formulation. *Computers & Structures*, Vol. 41, No. 4, pp. 709–722, 1991.
- (7) Li, K. and Qian, X. Isogeometric analysis and shape optimization via boundary integral. *Computer-Aided Design*, Vol. 43, No. 11, pp. 1427–1437, 2011. *Solid and Physical Modeling 2011*.
- (8) Zheng, C., Matsumoto, T., Takahashi, T., and Chen, H. A wideband fast multipole boundary element method for three dimensional acoustic shape sensitivity analysis based on direct differentiation method. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, Vol. 36, No. 3, pp. 361–371, 2012.
- (9) Lian, H., Kerfriden, P., and Bordas, S.P.A. Implementation of regularized isogeometric boundary element methods for gradient-based shape optimization in two-dimensional linear elasticity. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 106, No. 12, pp. 972–1017, 2016.
- (10) Takahashi, T., Sato, D., Isakari, H., and Matsumoto, T. A shape optimisation with the isogeometric boundary element method and adjoint variable method for the three-dimensional helmholtz equation. *Computer-Aided Design*, Vol. 142, p. 103126, 2022.
- (11) Kress, R. *Linear integral equations*. Springer, third edition, 2014.
- (12) Colton, D. and Kress, R. *Inverse Acoustic and Electromagnetic Scattering Theory*. Springer, third edition, 2013.
- (13) Ammari, H., Fitzpatrick, B., Kang, H., Ruiz, M., Yu, S., and Zhang, H. *Mathematical and computational methods in photonics and phononics*, Vol. 235. American Mathematical Society, 2018.
- (14) 増田久弥. 応用解析ハンドブック. 丸善出版, 2010.
- (15) Lang, S. *Fundamentals of differential geometry*, Vol. 191. Springer Science & Business Media, 2012.
- (16) Saranen, J. and Vainikko, G. *Periodic integral and pseudodifferential equations with numerical approximation*. Springer Science & Business Media, 2001.

# 連成型仮想的物理モデルに基づく 仮想的な異方性拡散方程式を用いた 型成形における幾何学的制約付き最適設計

## OPTIMIZATION METHOD WITH GEOMETRIC CONSTRAINT FOR MOLDING USING FICTITIOUS ANISOTROPIC DIFFUSION EQUATION BASED ON COUPLED FICTITIOUS PHYSICAL MODEL

田島 幹大<sup>1)</sup>, 山田 崇恭<sup>2)</sup>

Mikihiro TAJIMA and Takayuki YAMADA

1) 東京大学大学院工学系研究科 (〒 113-8656 文京区弥生 2-11-16, E-mail: tajima-mikihiro8@g.ecc.u-tokyo.ac.jp)

2) 東京大学大学院工学系研究科 (〒 113-8656 文京区弥生 2-11-16, E-mail: t.yamada@mech.t.u-tokyo.ac.jp)

This paper focuses on manufacturing the optimal structure obtained by topology optimization using molding techniques, e.g., casting and injection molding. In molding processes, products cannot geometrically be demolded if undercuts and interior voids exist in the structure. Thus, topology optimization that leads to a structure satisfying the geometric constraint for molding is required. In this study, we detect regions that violate the constraint using a fictitious anisotropic diffusion equation. Additionally, based on the concept of a coupled fictitious physical model, which overcomes the convergence problem in the previous formulation method, we formulate the optimization problem. After deriving design sensitivity and an optimization algorithm, we verify the validity of the proposed method through a numerical example.

**Key Words:** Topology optimization, Level set method, Molding constraint, Geometric constraint, Fictitious physical model, Coupled fictitious physical model

### 1. 緒言

トポロジー最適化<sup>(1, 2)</sup>は、与えられた制約条件の下でデバイスや材料の性能を最大化するために、新たに境界条件が生成されるようなトポロジー変更を許容しながら形状を最適化する手法であり、最も自由度の高い構造最適化手法として知られている。しかし、トポロジー最適化により得られる形状は、幾何学的に複雑な部分形状を持つ場合が多い。故に、得られた最適形状を産業製品へ応用するためには製造可能な形状の自由度が高い製造法が求められる。そのような製造法は近年様々に発展してきているが、各種製造工程において製造困難な部分形状が存在しないように幾何学的制約を考慮した最適形状設計法が必要になる。例えば、積層造形法では支持がなく局所的に宙に浮いた形状があるとき、材料を積み上げることが不可能であるため、そのような幾何学的制約を考慮する必要がある。また、多軸加工機を用いた製造におい

ては、工具が外部から工作物に到達できない部分形状は加工できないため、そのような幾何学的制約を考慮する必要がある。その他の製造手法として、鋳造や射出成形に代表される金型を用いる型成形がある。型成形では、液状にした原材料を金型に注入し、冷却および硬化後に型を取り除くことで所望の形状を持つ製品を成形する。しかし、成形した形状と型が干渉する部分(アンダーカット)や中空部分が存在する場合、型を取り除くことができない。したがって、最適形状を製造するためには、それぞれの製造方法に合わせた幾何学的制約を考慮したトポロジー最適化が要求される。

本研究では、幾何学的に複雑な形状を製造できる手法の中でも、短時間で大量生産に優れた型成形での制約に着目する。型制約を考慮したトポロジー最適化に関していくつかの先行研究が挙げられる。Xia et al.<sup>(3)</sup>やAllaire et al.<sup>(4)</sup>は、最適化プロセスを表現するHamilton-Jacobi方程式の速度ベクトルと各々の型の開閉方向ベクトルの内積に着目し

た. Sakai et al.<sup>(10)</sup> は構造の幾何学的特徴を捉える仮想的な物理場を計算し, 同様に開閉方向ベクトルとの内積の関係性から制約に違反する領域を検出した. Sato et al.<sup>(11)</sup> は仮想的な移流拡散方程式を用いて, ある一方向から離型できる領域を定義した. しかし, これらの先行研究で提案された手法では, 多方向から離型可能かを考慮する場合, 一方向ずつ式を定義し計算する必要がある. 故に, 計算時間が多くかかる課題を持つ.

一方, Liu et al.<sup>(5)</sup> や Li et al.<sup>(6)</sup> は仮想的な熱拡散方程式の温度場を用いて離型不可能な中空部分の検出を行った. さらに, Li et al.<sup>(8)</sup> は同様の式を発展させて熱伝導係数のパラメータを変えることで, アンダーカットも検出可能な型制約に違反する領域を定義した. この手法では, 離型する二方向を同時に考慮することができるため, 計算時間を短縮できる利点がある. しかし, これらの先行研究で提案された式により得られる解は, 固定設計領域 (設計対象となる構造物を含む領域) のアスペクト比や大きさに強く依存したり, 空洞領域の大きさによって値が変動し閾値を決めるのが困難であったりするため, 幾何学的制約に違反する領域を適切に検出できない問題があった. そこで, Yamada et al.<sup>(12)</sup> は設計領域全体で仮想的な温度場が 0 か 1 に近い値を取るよう改善した仮想的な拡散方程式を新たに提案した. その結果, 固定設計領域の形状の大きさに依存せずに, 構造物内部の中空部分を正しく検出可能となった. しかし, Yamada et al.<sup>(12)</sup> の提案した式では仮想的な熱が同心円上に拡散するため, 型制約に違反するアンダーカットを検出できない.

そこで本研究では, Yamada et al.<sup>(12)</sup> の提案した方程式の拡散係数に異方性を持たせた仮想的な異方性拡散方程式を用いて型制約を検出する手法を提案する. 具体的には, 型の開閉方向のみ仮想的な熱が拡散するように拡散係数を設定する. その結果, 中空部分だけでなくアンダーカット部分にも仮想的な熱が留まり, 仮想的な温度分布が正確に型制約に違反する領域を表現できる. また, 異方性拡散方程式を用いた最適化問題を Tajima et al.<sup>(13)</sup> の提案した連成型仮想的物理モデルに基づいて定式化を行う. 仮想的物理モデル<sup>(9, 10, 11, 12)</sup> とは, 製造要件を考慮するために導入される仮想的な支配方程式系である. 具体的には, Sato et al.<sup>(11)</sup> が提案した移流拡散方程式や Yamada et al.<sup>(12)</sup> の提案した拡散方程式に加えて, 本研究で扱う型制約を検出するのに用いる異方性拡散方程式などが仮想的物理モデルに該当する. 従来の仮想的物理モデルの定式化では, 幾何学的制約に違反する領域 (以下, 制約違反領域) を目的関数として, その関数の値を最小化するように設定することで, 制約を考慮した. そして, 物理現象を記述する支配方程式系である力学モデルの目的関数と仮想的物理モデルの目的関数を単に線形結合して定式化を行った. しかし, この定式化法では, 二つのモデルの状態変数及び目的関数が相互的に最適プロセスに作用しないため, 一つの最適形状に収束するのが困難な問題がある.

そこで, 連成型仮想的物理モデルでは, 制約違反領域内で力学モデルの目的関数が悪化するように材料定数を変化させて定式化を行う. その結果, 力学モデルの目的関数のみを最小化するだけで, 幾何学的制約を満たした最適形状に収束させることが可能となる. また, 支配方程式内で二つのモデルの状態変数が相互作用することも収束性の改善に貢献する.

以下, 本論文は次のように構成される. 第 2 章では, Yamada et al.<sup>(14)</sup> の提案したレベルセット法に基づいたトポロジー最適化について述べる. また, 本研究で扱う平均コンプライアンス最小化問題の定式化を行う. 第 3 章では, 型成形で考慮しなければならない幾何学的な制約 (型制約) について具体的に述べる. 続いて第 4 章において, 第 3 章で述べた型制約を検出する方法として, 異方性拡散方程式を用いた仮想的物理モデルを用いる手法を提案し定式化する. 第 5 章では, 一般的な仮想的物理モデルの定式化法に基づいた型制約を考慮した平均コンプライアンス最小化問題の定式化及び収束性に関する問題点について述べる. そして, 収束性の問題を解決するのに有用である連成型仮想的物理モデルに基づいて最適化問題を定式化する. 第 6 章では, 連成型仮想的物理モデルに基づいた最適化問題の目的関数及び支配方程式から, 随伴変数法により設計感度を導出する. 第 7 章では, 最適化アルゴリズムについて述べる. 第 8 章では, 具体的な数値解析例により, 本研究で提案した手法の妥当性を検証する. 最後に, 第 9 章に結言を記す.

## 2. レベルセット法に基づいたトポロジー最適化

### 2.1. 基本的な考え方

レベルセット法に基づくトポロジー最適化について概要を述べる. 設計対象とする構造物を包括する領域 (以下, 固定設計領域) を  $D$ , 構造領域を  $\Omega$  とする. Yamada et al.<sup>(14)</sup> の提案した手法に基づき, レベルセット関数  $\phi(\mathbf{x})$  を以下のように定義する.

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

このとき, 材料分布を表す特性関数  $\chi_\phi$  を以下のように定義する.

$$\chi_\phi = \begin{cases} 1 & \text{if } \phi \geq 0 \\ 0 & \text{if } \phi < 0 \end{cases} \quad (2)$$

トポロジー最適化の基本的な考え方は, 材料分布を設計変数とし, 目的関数  $J$  を最小化 (あるいは最大化) する構造を求める最適化問題として, 構造最適化問題を定式化することである. 所望の目的関数を表現する関数  $j(u)$  及び特性関数  $\chi_\phi$  を用いて構造最適化問題は以下のように定式化される.

$$\min_{\chi_\phi} J[u, \chi_\phi] = \int_D j(u) \chi_\phi d\Omega \quad (3)$$

$$\text{subject to:} \quad \text{Governing equations for } u \quad (4)$$

続いて, レベルセット関数の更新方法について述べる. Yamada et al.<sup>(14)</sup> は仮想的な時間  $t$  を導入して, レベルセッ

ト関数の変更を時間発展方程式により記述した．この手法に基づき，レベルセット関数の更新を以下の反応拡散方程式で行う．

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -K \left\{ \frac{J' \int_D d\Omega}{\int_D |J'| d\Omega} - \tau L^2 \nabla^2 \phi(\mathbf{x}, t) \right\} \quad (5)$$

ただし， $K \in \mathbb{R}^+$  は比例定数， $\tau \in \mathbb{R}^+$  は正則化係数， $L \in \mathbb{R}^+$  は代表長さ， $J'$  は設計感度である．正則化係数  $\tau$  を調節することにより構造領域の幾何学的な複雑さを制御することが可能となる．詳細は文献<sup>(14)</sup>を参照されたい．

## 2.2. 平均コンプライアンス最小化問題

本研究では，トポロジー最適化の代表的な適用例として，平均コンプライアンス最小化問題を考える．固定設計領域  $D$  内部に構造領域  $\Omega$  及び非構造領域  $D \setminus \Omega$  を定義し，構造領域は等方性線形弾性体で構成されるものとする．また，境界  $\Gamma_u \in \partial\Omega$  において，変位場  $\mathbf{u}$  がゼロとなるように完全拘束する境界条件及び境界  $\Gamma_t \in \partial\Omega$  において，表面力  $\mathbf{t}$  を負荷する境界条件を課す．このとき，平面ひずみを仮定した場合の変位場  $\mathbf{u}$  に関する平均コンプライアンス最小化問題の目的関数及び支配方程式は以下のように定式化される．

$$\inf_{\mathbf{u}} J(\mathbf{u}) = \int_{\Gamma_t} \mathbf{t} \cdot \mathbf{u} d\Gamma \quad (6)$$

subject to:

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(\mathbb{C}\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u})) = \mathbf{0} & \text{in } \Omega \\ \mathbf{u} = \mathbf{0} & \text{on } \Gamma_u \\ -(\mathbb{C}\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u})) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{t} & \text{on } \Gamma_t \\ -(\mathbb{C}\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u})) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0} & \text{on } \Gamma_N \end{cases} \quad (7)$$

ただし， $\mathbf{n}$  は境界  $\partial\Omega$  の単位法線ベクトルであり， $\Gamma_N = \partial\Omega \setminus (\Gamma_u \cup \Gamma_t)$  である．また， $\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u})$  及び  $\mathbb{C}$  は平面ひずみ，弾性テンソルであり，以下のように定義される．

$$\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^\top) \quad (8)$$

$$\mathbb{C}_{ijkl} = E \left( \frac{\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \delta_{ij} \delta_{kl} + \frac{1}{2(1+\nu)} (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \right) \quad (9)$$

ただし， $E$  はヤング率， $\nu$  はポアソン比である．

## 3. 型成形における幾何学的制約

トポロジー最適化により得られる幾何学的に複雑な部分を含んだ形状の製造に適した手法の一つとして，鋳造や射出成形といった金型を用いる型成形を考える．型成形では，二つの金型を合わせてできた空洞部分に液体状の材料を充填し，凝固させた後に金型を取り外して成形品を取り出すプロセスで製造する．他の積層造形法などの製造方法と比べて型成形は，金型を作成できれば成形品を短時間で大量生産できる利点がある．しかし，図1(b)に示すように，型を開閉方向に取り外すとき，成形品に突出したアンダーカットや中空部分が存在する場合，離型できず成形品を取り出すことができない．このような幾何学的な制約を型制約と呼ぶ．そのため，アンダーカットや中空部分が存在しない最適形状が得ら

れるように型制約を考慮したトポロジー最適化の手法が求められる．

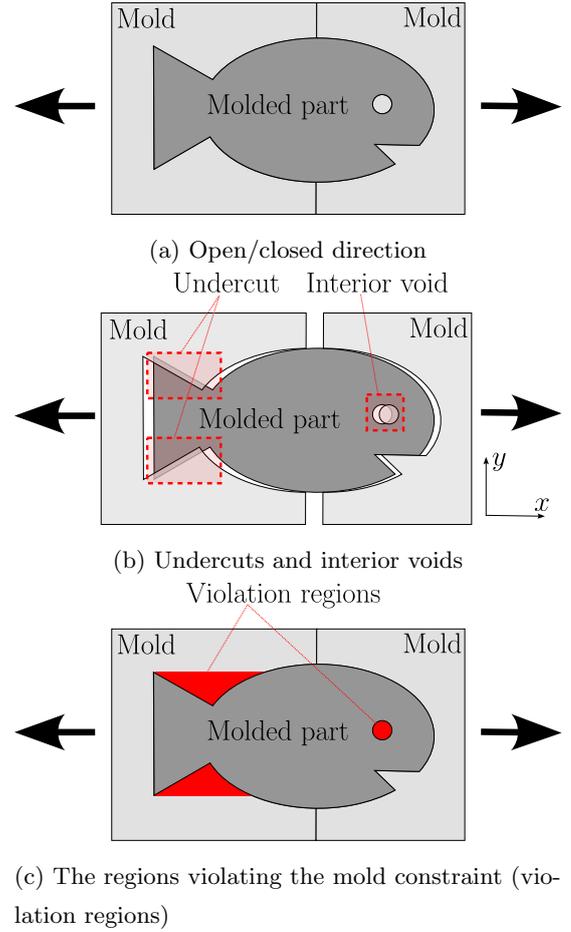


Fig. 1: The geometric constraint for molding. Undercuts and interior voids surrounded by dotted lines cannot be demolded.

## 4. 異方性拡散方程式を用いた仮想的物理モデル

### 4.1. 仮想的な異方性拡散方程式の導出

第3章での議論に基づいた型制約を満たす最適形状を得るために，図1(c)のように型を開閉方向に取り除く際にアンダーカットや中空部分に引っかかり除去できない領域を幾何学的制約に違反する領域（以下，制約違反領域）として検出する必要がある．本研究では制約違反領域を検出するために，異方性拡散方程式を用いた仮想的物理モデルを導入する．仮想的物理モデルとは，製造要件や生産工程を考慮した幾何学的制約を表現する仮想的な支配方程式系である．なお，本研究では二次元における幾何学的制約条件を定式化する．また，図1のように型の開閉方向と並行な軸を  $x$  軸とする．このとき，型制約を検出する仮想的な異方性拡散方程式を以下のように定義する．

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(L^2 \mathbf{A}_p(\chi) \nabla p) + (1 - \chi)p = 1 - \chi & \text{in } D \\ p = 0 & \text{on } \Gamma_p \\ \nabla p \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{on } \partial D \setminus \Gamma_p \end{cases} \quad (10)$$

ただし,  $p \in H^1(D)$  は状態変数,  $L$  は代表長さである.  $\mathbf{A}_p$  は異方性を持った拡散行列であり, 以下のように定義する.

$$\mathbf{A}_p(\chi) = (\mathbf{A}_{\text{void}} - \mathbf{A}_{\text{mat}})(1 - \chi) + \mathbf{A}_{\text{mat}} \quad (11)$$

$$\mathbf{A}_{\text{void}} = \begin{pmatrix} a_{\text{void},x} & 0 \\ 0 & a_{\text{void},y} \end{pmatrix} \quad (12)$$

$$\mathbf{A}_{\text{mat}} = \begin{pmatrix} a_{\text{mat},x} & 0 \\ 0 & a_{\text{mat},y} \end{pmatrix} \quad (13)$$

式 (10) は, Yamada et al.<sup>(12)</sup> の提案した拡散方程式を参考にしており, 固定設計領域の大きさやアスペクト比などに関係なく構造領域の分布のみに依存する特徴を持つ.

この偏微分方程式系の物理的な解釈について考察する. 状態変数  $p$  を仮想的な温度場と捉える. このとき, 式 (10) は, 空洞領域  $1 - \chi$  に 1 の大きさを持つ熱源を加えて, 拡散行列  $\mathbf{A}_p$  に従って熱が拡散し, ディリクレ条件  $p = 0$  を課した境界  $\Gamma_p$  に熱が吸収されるという物理現象を仮想的に表した式を意味する. 式 (10) を用いて制約違反領域を検出するために, 式 (11) で定義された拡散行列  $\mathbf{A}_p$  におけるパラメータの値を以下の二つの条件を満たすように定める.

1. 空洞領域において, 型を取り外す  $x$  軸方向の拡散係数  $a_{\text{void},x}$  を  $y$  軸方向の拡散係数  $a_{\text{void},y}$  より十分に大きい値に設定する ( $a_{\text{void},x} \gg a_{\text{void},y}$ )
2. 構造領域において, 拡散係数  $a_{\text{mat},x}$ ,  $a_{\text{mat},y}$  を十分に小さい値に設定する ( $a_{\text{mat},x} \ll 1, a_{\text{mat},y} \ll 1$ )

条件 1 により, 空洞領域に与えられた熱は (1,0) 及び (-1,0) 方向に拡散するため, 型を開閉方向に取り除くという操作を表現できる. また, 境界  $\Gamma_p$  に向かって熱が異方的に拡散する間に構造領域が存在する場合, 条件 2 から構造領域内では拡散係数が著しく低下するため熱が拡散できずに留まる. 故に, 条件 2 により, 型が干渉するアンダーカットや中空部分を表現できる. したがって, 仮想的な温度場  $p$  の分布は型制約における制約違反領域近傍で正の値を持ち, それ以外の領域では 0 に近い値を持つ. 本研究では, 制約違反領域  $G(p, \chi)$  を以下のように定義する.

$$G(p, \chi) = \mathcal{S}(p; x_0, \beta)(1 - \chi) \quad (14)$$

ただし,  $\mathcal{S}$  は以下のように定義されるシグモイド関数である.

$$\mathcal{S}(x; x_0, \beta) = \frac{\exp(\beta(x - x_0))}{\exp(\beta(x - x_0)) + 1} \quad (15)$$

パラメータ  $\beta$  を十分大きな値に設定することで, 閾値  $x_0$  より  $p$  が大きいとき  $G(p, \chi)$  は 1 となり,  $x_0$  より  $p$  が小さいとき  $G(p, \chi)$  は 0 となる. 本研究では,  $x_0 = 0.25$ ,  $\beta = 50$  に固定する.

#### 4.2. 数値例

数値例により, 領域  $G(p, \chi)$  の分布が適切に型制約に違反する領域を表現できているかどうかを検証する. 固定設計領域  $D$  と構造領域  $\Omega$  及び境界条件を図 2 のように定める. 式 (11) において, 代表長さを 1.0 に設定する. これらの問題設定のモ

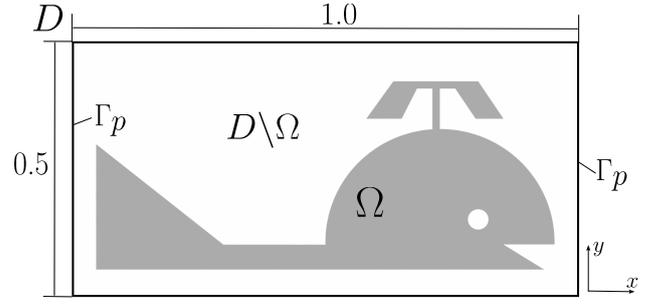


Fig. 2: Problem setting and boundary conditions.

と, 式 (11) 内の拡散係数を変化させて有限要素解析を行った結果, 図 3 のような制約違反領域  $G(p, \chi)$  の分布が得られた. 図 3a や 3b のように  $a_{\text{void},x}$  以外の拡散係数の値が十分小さい場合, 制約違反領域が正確に検出できていない箇所が見られる. 一方, 図 3c や 3d のように十分小さい値に設定することで, 所望の分布が得られた. 図 3d の方が図 3c よりも正確に制約違反領域を検出できるが, 拡散行列内の係数の値の差が大きい場合計算が不安定になる可能性があるため, 図 3c での拡散係数の設定 ( $a_{\text{void},x} = 1.0$ ,  $a_{\text{void},y} = 1.0 \times 10^{-3}$ ,  $a_{\text{mat},x} = 1.0 \times 10^{-3}$ ,  $a_{\text{mat},y} = 1.0 \times 10^{-5}$ ) を採用する.

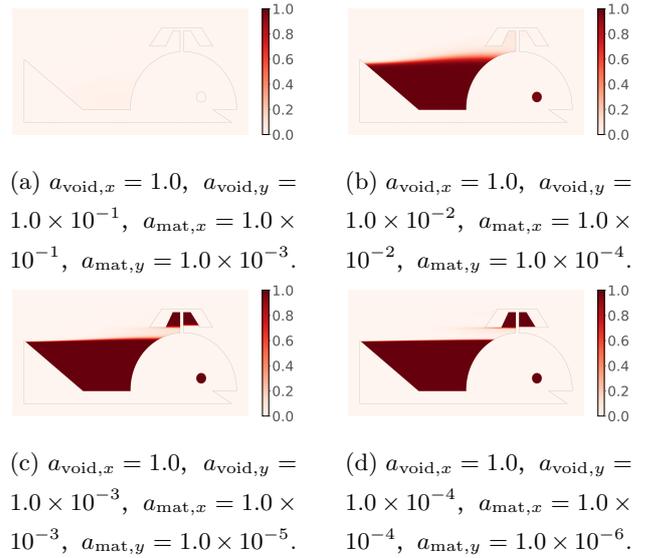


Fig. 3: The regions  $G(p, \chi)$  that violate geometric constraint at each diffusion coefficient in Eq. (11).

## 5. 連成型仮想的物理モデルに基づく最適化問題の定式化

### 5.1. 仮想的物理モデルにおける一般的な定式化及び問題点

具体的な問題設定として, 型制約を考慮した平均コンプライアンス問題を最適化問題として定式化する. 従来の仮想的物理モデルの定式化法<sup>(9, 10, 11, 12)</sup>に基づいた場合, 制約違反領域  $G(p, \chi_\phi)$  を目的関数として以下のように最適化問題を設定する.

$$\inf_{\chi_\phi} \int_D G(p, \chi_\phi) d\Omega \quad (16)$$

$$\text{subject to: } \text{Governing equation for } p \quad (\text{Eq. (10)}) \quad (17)$$

このとき、目的関数  $J(\mathbf{u})$  と  $G(p, \chi_\phi)$  は線形結合されて一つの目的関数として定式化される。また、最適形状の面積が閾値  $V_{\max}$  を超過しないように体積制約を課す。このとき、型制約付き平均コンプライアンス最小化問題は以下のように定式化される。

$$\inf_{\chi_\phi} J(\mathbf{u}) + \mu G(p, \chi_\phi) \quad (18)$$

subject to:

$$\begin{cases} G_v(\chi_\phi) = \int_D \chi_\phi d\Omega - V_{\max} \leq 0 & \\ -\operatorname{div}(\mathbb{C}\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u})) = \mathbf{0} & \text{in } \Omega \\ \mathbf{u} = \mathbf{0} & \text{on } \Gamma_u \\ -(\mathbb{C}\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u})) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{t} & \text{on } \Gamma_t \\ -(\mathbb{C}\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u})) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0} & \text{on } \Gamma_N \\ -\operatorname{div}(L^2 \mathbf{A}_p(\chi_\phi) \nabla p) + (1 - \chi_\phi)p = 1 - \chi_\phi & \text{in } D \\ p = 0 & \text{on } \Gamma_p \\ \nabla p \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{on } \partial D \setminus \Gamma_p \end{cases} \quad (19)$$

ただし、 $\mu \in \mathbb{R}^+$  は重み係数である。 $\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u})$  及び  $\mathbb{C}$  はそれぞれひずみテンソル及び弾性テンソルであり、式 (8)、式 (9) と同じである。

しかし、この定式化法では収束性が悪く一つの最適形状が得られない可能性がある。なぜなら、状態変数  $\mathbf{u}$  と  $p$  が互いに独立しているため、目的関数  $J(\mathbf{u})$  と  $G(p, \chi_\phi)$  が相互作用しないからである。その結果、平均コンプライアンスを最小化する目的と型制約を違反する領域を除去する目的が衝突し、解が収束しない可能性がある。

## 5.2. 連成型仮想的物理モデルによる定式化

収束性の問題を解決するために、Tajima et al.<sup>(13)</sup> の提案した連成型仮想的物理モデルの考えに基づいた定式化を行う。以後、平均コンプライアンス最小化問題などの現実の物理現象を表現する支配方程式系を力学モデルとする。連成型仮想的物理モデルでは、仮想的物理モデルにより検出された制約違反領域内で、力学モデル内の材料定数を力学モデルの目的関数  $J(\mathbf{u})$  を悪化させるように変化させることで、二つのモデルを連成する。

本研究で考える最適化問題に、このモデルを適用することを考える。図 3 より、制約違反領域  $G(p, \chi)$  は空洞領域に分布しており、構造領域の材料定数に影響を与えることができない。そこで、以下のように定義する仮想的なフィルタリング方程式により、領域  $G(p, \chi)$  を構造領域まで拡張させる。

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(L^2 a_q \nabla q) + q = G(p, \chi)(1 - \chi) & \text{in } D \\ \nabla q \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{on } \partial D \end{cases} \quad (20)$$

ただし、 $q \in H^1(D)$  は仮想的なフィルタリングによる拡張領域を表す状態変数、 $a_q \in \mathbb{R}^+$  は拡散係数、 $L$  は代表長さである。

続いて、本研究で扱う平均コンプライアンス最小化問題において、目的関数  $J(\mathbf{u})$  に影響を与えるヤング率を、連成型仮想的物理モデルの考えに基づき変化させる材料定数として

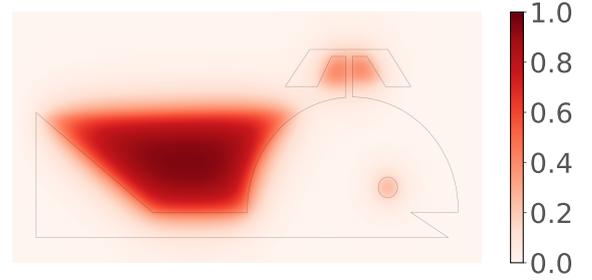


Fig. 4: The distribution of the state variable  $q$  of the fictitious filtering equation.

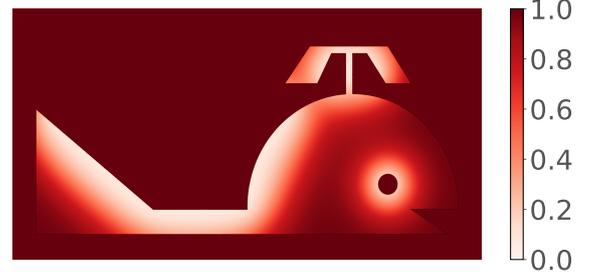


Fig. 5: Fictitious Young's modulus  $E_f(q, \chi)$ .

選択する。そして、拡張領域  $q$  と構造領域  $\Omega$  の共通部分  $q\chi$  を連成型仮想的物理モデルの定式化に用いる新たな制約違反領域として再定義し、その領域内でヤング率を低下させることで荷重  $\mathbf{t}$  を加えたときの変位  $\mathbf{u}$  を増大させる。その結果、平均コンプライアンス  $J(\mathbf{u})$  が増加すなわち悪化する。以上より、制約違反領域  $q\chi$  内でヤング率を低下させた仮想的なヤング率  $E_f(q, \chi)$  を以下のように定義する。

$$E_f(q, \chi) = E \left( 1 - \frac{2}{\pi} \arctan(\gamma q \chi) \right) \quad (21)$$

ただし、 $E$  は元々の材料のヤング率、 $\gamma \in \mathbb{R}^+$  はヤング率を下げる度合いを調整するパラメータである。

数値例により、仮想的なヤング率が所望な分布をとっているかを確認した。問題設定及び境界条件として図 2 のような分布を考えた。式 (20) において、拡散係数  $a_q$  及び代表長さ  $L$  をそれぞれ  $1.0 \times 10^{-3}$ 、 $1.0$  に設定した。このとき、図 4 のような仮想的な拡散領域  $q$  の分布が得られた。また、式 (21) において、ヤング率  $E$  を  $1.0$ 、パラメータ  $\gamma$  を  $20$  に設定した。その結果、図 5 のような仮想的ヤング率  $E_f(q, \chi)$  の分布が得られた。図 4 から、領域  $G(p, \chi)$  がフィルタリング方程式により構造領域まで拡張されている。さらに図 5 から、制約違反領域  $q\chi$  内でヤング率が低下しており、所望な分布をしていることが確認できる。

以上の式 (20)、(21) を用いて、連成型仮想的物理モデルに

基づいた最適化問題は以下のように定式化される。

$$\inf_{\chi_\phi} J(\mathbf{u}) \quad (22)$$

subject to:

$$\begin{cases} G_v(\chi_\phi) = \int_D \chi_\phi d\Omega - V_{\max} \leq 0 & \text{in } \Omega \\ -\operatorname{div}(\mathbb{C}(q, \chi_\phi)\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u})) = \mathbf{0} & \text{on } \Gamma_u \\ \mathbf{u} = \mathbf{0} & \text{on } \Gamma_t \\ -(\mathbb{C}(q, \chi_\phi)\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u})) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{t} & \text{on } \Gamma_N \\ -(\mathbb{C}(q, \chi_\phi)\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u})) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0} & \text{on } \Gamma_D \\ -\operatorname{div}(L^2 \mathbf{A}_p(\chi_\phi) \nabla p) + (1 - \chi_\phi)p = 1 - \chi_\phi & \text{in } D \\ p = 0 & \text{on } \Gamma_p \\ \nabla p \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{on } \partial D \setminus \Gamma_p \\ -\operatorname{div}(L^2 a_q \nabla q) + q = G(p, \chi_\phi)(1 - \chi_\phi) & \text{in } D \\ \nabla q \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{on } \partial D \end{cases} \quad (23)$$

ただし、 $\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u})$  及び  $\mathbb{C}(q, \chi_\phi)$  はそれぞれひずみテンソル及び弾性テンソルである。ひずみテンソルは式 (8) と同等であるが、弾性テンソルは式 (9) から以下のように再定義される。

$$E_f(q, \chi_\phi) = E \left( 1 - \frac{2}{\pi} \arctan(\gamma q \chi_\phi) \right) \quad (24)$$

$$\mathbb{C}_{ijkl}(q, \chi_\phi) = E_f(q, \chi_\phi) \left( \frac{\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \delta_{ij} \delta_{kl} + \frac{1}{2(1+\nu)} (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \right) \quad (25)$$

式 (9) と式 (25) の違いはヤング率  $E$  が仮想的ヤング率  $E_f(q, \chi_\phi)$  に置き換わっている点である。これにより、弾性テンソルを含む力学モデルが仮想的物理モデルの状態変数  $q$  の影響を受けるため、二つのモデルが相互作用することができる。加えて、式 (22) のように力学モデルの目的関数のみを考慮するだけで、剛性を低下させた領域すなわち領域  $G(p, \chi_\phi)$  の減少に間接的に影響を与える。以上の連成型仮想的物理モデルに基づいた最適化問題の定式化により、収束性が改善される。

## 6. 感度設計

式 (22), (23) のように連成型仮想的物理モデルにより定式化された最適化問題に対して随伴変数法に基づいた感度設計を行い、密度感度を求めて設計感度とする。平均コンプライアンス問題は自己随伴問題として知られており、状態変数  $\mathbf{u}$  に対応する随伴変数を  $\mathbf{v}$  としたとき、 $\mathbf{u} = \mathbf{v}$  が成り立つ。フィルタリング方程式 (20) の状態変数  $q$  に対応する随伴変数を  $\lambda_q$  とする。このとき、式 (20) の随伴方程式は以下のように導出される。

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(L^2 a_q \nabla \lambda_q) + \lambda_q \\ = - \left( \frac{\partial \mathbb{C}(q, \chi_\phi)}{\partial q} \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}) \right) \cdot \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{v}) & \text{in } D \\ \nabla \lambda_q \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{on } \partial D \end{cases} \quad (26)$$

また、仮想的な異方性拡散方程式 (10) の状態変数  $p$  に対応する随伴変数を  $\lambda_p$  とする。このとき、式 (10) の随伴方程式

は以下のように導出される。

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(L^2 \mathbf{A}_p \nabla \lambda_p) + (1 - \chi_\phi) \lambda_p \\ = \lambda_q \frac{\partial G(p, \chi_\phi)}{\partial p} (1 - \chi_\phi) & \text{in } D \\ \lambda_p = 0 & \text{on } \Gamma_p \\ \nabla \lambda_p \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{on } \partial D \setminus \Gamma_p \end{cases} \quad (27)$$

以上の導出された随伴変数  $\lambda_p$ ,  $\lambda_q$  を用いて密度感度は以下のように導出される。

$$\begin{aligned} J' = & \left( (\mathbb{C}(q, \chi_\phi)\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u})) \cdot \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{v}) + \left( \frac{\partial \mathbb{C}(q, \chi_\phi)}{\partial \phi} \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}) \right) \cdot \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{v}) \right) \chi_\phi \\ & + \left( L^2 \frac{\partial \mathbf{A}_p(\chi_\phi)}{\partial \phi} \nabla p \right) \cdot \nabla \lambda_p - (p - 1) \lambda_p \chi_\phi \\ & + 2 \lambda_q G(p, \chi_\phi) \chi_\phi \end{aligned} \quad (28)$$

## 7. 最適化アルゴリズム

最適化アルゴリズムについて議論する。体積制約は拡張ラグランジュ法により考慮される。解析は有限要素法 (FEM) に基づき、以下のステップで反復計算される。

- step 0:** レベルセット関数  $\phi$  及び固定設計領域  $D$  の設定
- step 1:** FEM を用いた支配方程式の計算 (式 (23))
- step 2:** 目的関数の算出 (式 (22)), 十分な反復計算を行い設計感度が十分小さい値になった場合終了
- step 3:** FEM を用いた随伴方程式の計算 (式 (26), (27))
- step 4:** 設計感度の算出 (式 (28))
- step 5:** 体積制約におけるラグランジュ変数の更新
- step 6:** レベルセット関数の更新 (式 (5))
- step 7:** step1 に戻る

なお、有限要素解析は偏微分方程式を数値的に解析可能なオープンソースソフトウェアである FreeFEM++ を用いた。

## 8. 数値解析例

### 8.1. 問題設定① (固定設計領域の長軸方向と $x$ 軸方向を一致させた場合)

数値解析例により、本手法の妥当性を検証する。図 6 に示すように、 $2\text{m} \times 1\text{m}$  の矩形型の固定設計領域及び境界条件を定める。レベルセット関数  $\phi$  の初期値は固定設計領域内の全てで  $\phi = 1$  とする。型を取り外す  $x$  軸方向を固定設計領域の長軸方向とし、境界  $\Gamma_p$  を固定設計領域の短軸両辺とする。また、構造領域  $\Omega$  はヤング率  $210\text{GPa}$ 、ポアソン比  $0.3$  の平面ひずみを仮定した等方性線形弾性体で占められているものと仮定する。メッシュの分割数は  $150 \times 75$  とし、三角形メッシュで等間隔に分割する。加えて、境界  $\Gamma_t$  において表面力  $\mathbf{t} = (t_x, t_y) = (0\text{N}, -1\text{N})$  を加え、境界  $\Gamma_u$  において構造を完全拘束する。代表長さ  $L$  は  $2.0$  に設定する。また、式 (5) において、パラメータを  $K = 1$ ,  $\tau = 5 \times 10^{-5}$  に設定する。式 (11) において、拡散係数をそれぞれ  $a_{\text{void},x} = 1.0$ ,  $a_{\text{void},y} = 1.0 \times 10^{-3}$ ,  $a_{\text{mat},x} = 1.0 \times 10^{-3}$ ,  $a_{\text{mat},y} = 1.0 \times 10^{-5}$  とする。式 (20) では、拡散係数  $a_q$  を  $1.0 \times 10^{-1}$  に設定する。

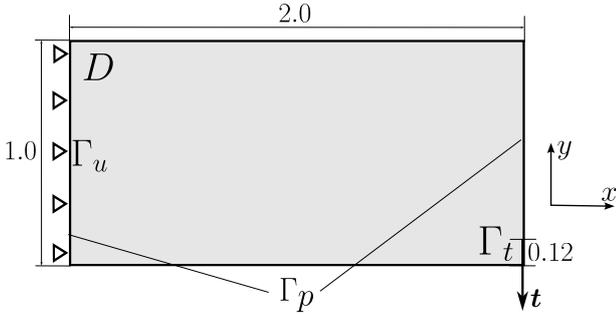


Fig. 6: Problem setting and boundary conditions. The size of the fixed design domain is in meters.

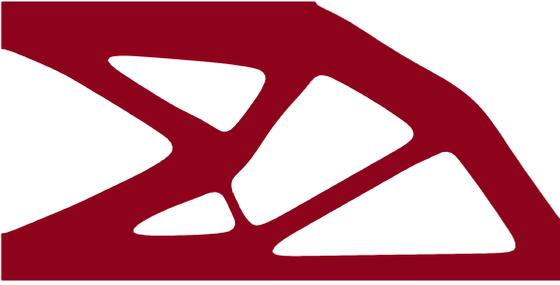


Fig. 7: Optimal structure obtained after 500 steps without the molding constraint.

体積制約は、最適形状の面積  $V$  が最終的に固定設計領域の面積  $V_{\text{init}}$  の 50%以下になるように  $V_{\text{max}}$  の閾値を定める。

なお、最適化計算において、構造領域は反復計算ごとに変化するため、メッシュの再定義が必要となるが多大な計算コストがかかる。故に、Allaire et al.<sup>(15)</sup> の提案した Ersatz material approach による近似解法を用いる。この手法では、空洞領域  $D \setminus \Omega$  は相対的に小さいヤング率に設定された構造材料と仮定し、構造領域と空洞領域の間の境界近傍はヘビサイド関数を用いた滑らかな分布を持つ材料特性であると仮定する。これらの仮定のもと、有限要素の再定義を行わずに近似的に解析する。今回の数値解析では、空洞領域におけるヤング率の相対値を  $1 \times 10^{-4}$ 、ヘビサイド関数の遷移幅を 0.5 に設定した。

### 8.2. 数値解析結果① (固定設計領域の長軸方向と $x$ 軸方向を一致させた場合)

まず、式 (21) におけるヤング率を下げる度合いを表すパラメータ  $\gamma$  を 0 に設定し、型制約を考慮せずに 500 ステップ反復計算を行った。その結果、図 7 に示すような最適形状が得られた。図 7 より、幾何学的制約を課さない場合構造領域により閉じられた空洞領域が存在し、型制約に違反している。図 8 に、型制約に違反する領域  $G(p, \chi_\phi)$  の分布を示す。図 8 から、適切に型制約を満たさない領域を検出できている。

次に、式 (21) 内のパラメータ  $\gamma$  を 20 に設定し、型制約を考慮して 500 ステップ反復計算を行った。その結果、図 9 のような最適形状が得られた。図 9 より、 $x$  軸方向から型を取り除くことができる形状をしており、型制約が満たされていることが確認できる。



Fig. 8: The regions  $G(p)$  that violate the molding constraint when the constraint is not considered.

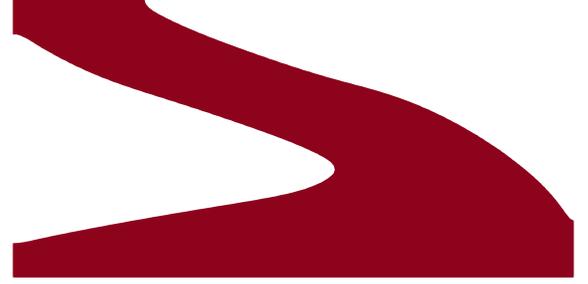


Fig. 9: Optimal structure obtained after 500 steps with the molding constraint.

加えて、制約の有無による平均コンプライアンス  $J(\mathbf{u})$ 、面積比  $V/V_{\text{init}}$  及び型制約に違反する領域  $G(p, \chi_\phi)$  のステップごとの変化を調べた。図 10、図 11 及び図 12 はそれぞれ平均コンプライアンス、面積比及び領域  $G(p, \chi_\phi)$  の面積分の値の変化を示す。これらの図から、連成型仮想的物理モデルに基づいた定式化によりそれぞれの値が収束している。図 10 より、反復回数が 50~75 で制約ありの場合、一時的に平均コンプライアンスが振動している箇所が見られる。これは一時的に制約に違反する解になった後、大域的に性能の高い安定解に移行する過程であることに起因する。また、反復回数が 75~100 付近で制約ありの場合、平均コンプライアンスの値が下がった後、少し大きい値で収束している。これは図 11 からステップ数 75~100 付近で最適形状がわずかに体積制約に違反しており、その制約を満たすために微小に平均コンプライアンスが大きい形状に変化したからである。加えて、図 12 から、制約を考慮した場合  $G(p, \chi_\phi)$  の値が限りなく 0 に近い値をとっており、最終的な最適形状 (Fig. 9) が幾何学的制約を満たしていることが確認できる。

### 8.3. 問題設定② (固定設計領域の短軸方向と $x$ 軸方向を一致させた場合)

続いて、図 13 のような問題設定及び境界条件を考える。問題設定①との違いは、型を取り外す  $x$  軸方向を固定設計領域の短軸方向とし、境界  $\Gamma_p$  を固定設計領域の長軸両辺とする。その他のパラメータの値及び条件は全て問題設定①と同等に設定する。

### 8.4. 数値解析結果② (固定設計領域の短軸方向と $x$ 軸方向

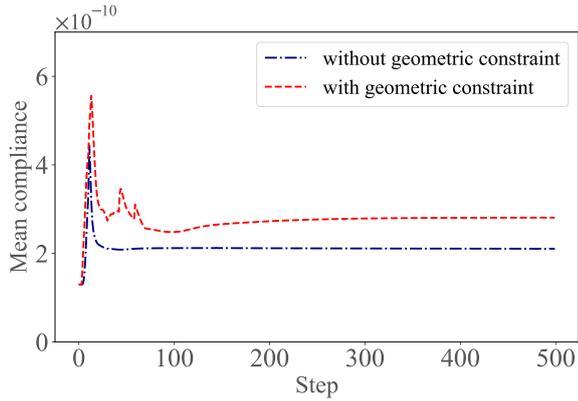


Fig. 10: Changes in mean compliance by step with and without the molding constraint.

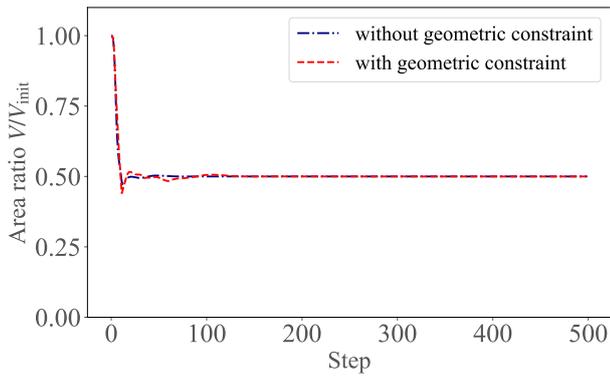


Fig. 11: Changes in area ratio by step with and without the constraint.

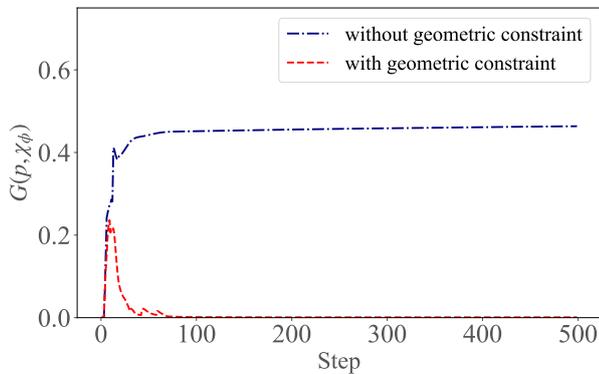


Fig. 12: Changes in regions violating the molding constraint by step with and without the constraint.

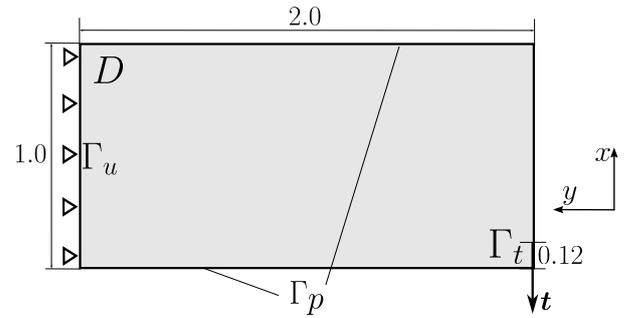


Fig. 13: Problem setting and boundary conditions. The size of the fixed design domain is in meters.

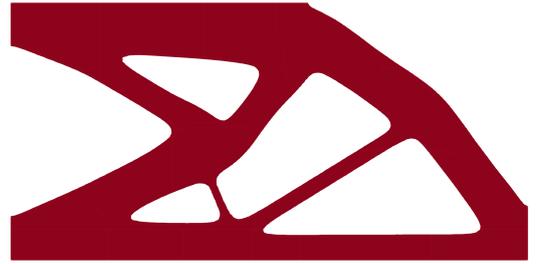


Fig. 14: Optimal structure obtained after 500 steps without the molding constraint.

#### を一致させた場合)

まず、式 (21) 内のパラメータ  $\gamma$  を 0 に設定し、型制約を考慮しない場合で 500 回繰り返し計算を行った。その結果、図 14 のような最適形状が得られた。型制約に関する境界条件を変更しただけであるため、制約なしの最適形状は図 7 と変化はない。また、図 19 は型制約に違反する領域  $G(p, \chi_\phi)$  の分布を示す。図 19 から、適切に離型時に干渉する部分が検出できている。

次に、式 (21) 内のパラメータ  $\gamma$  を 20 に設定し、型制約を考慮した場合で 500 回繰り返し計算を行った。その結果、図 16 に示すような数値解析結果が得られた。図 16 より、型制約を考慮することにより  $x$  軸方向に離型可能な最適形状が得られた。

最後に、図 17, 18, 19 はそれぞれ、平均コンプライアンス、面積比及び領域  $G_p(p, \chi_\phi)$  のステップごとの変化を示す。



Fig. 15: The regions  $G(p)$  that violate the molding constraint when the constraint is not considered.

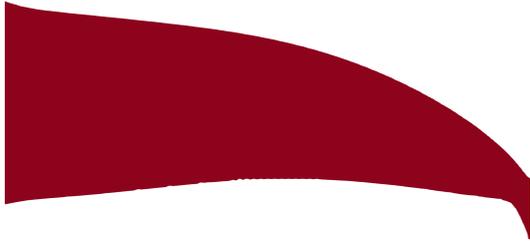


Fig. 16: Optimal structure obtained after 500 steps with the molding constraint.

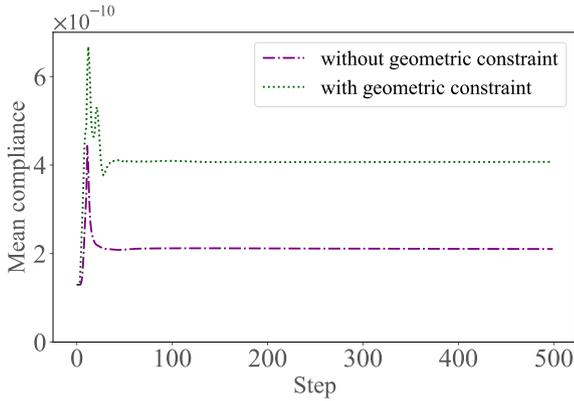


Fig. 17: Changes in mean compliance by step with and without the molding constraint.

これらの図から、制約の有無にかかわらずそれぞれの値が一定の値に収束している。加えて、図 18 から体積制約が満たされていること、及び図 19 から制約付きの最適形状が型制約を満たしていることが確認できる。

## 9. 結言

本論文では、鋳造や射出成形に代表される型成形における幾何学的制約 (型制約) を考慮したトポロジー最適化に着目した。そして、型制約に違反する領域を仮想的な異方性拡散方程式を用いて検出した。また、連成型仮想的物理モデルに基づいて定式化及び感度解析をし、具体的な数値解析を行っ

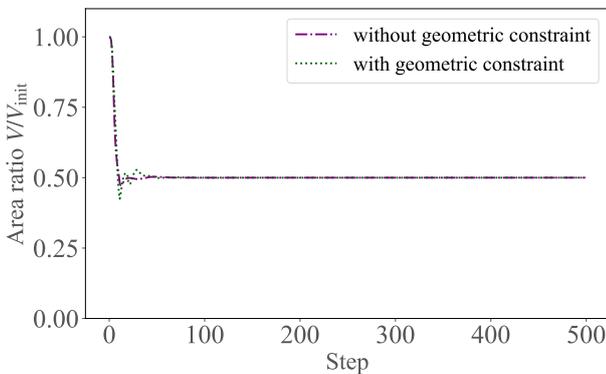


Fig. 18: Changes in area ratio by step with and without the constraint.

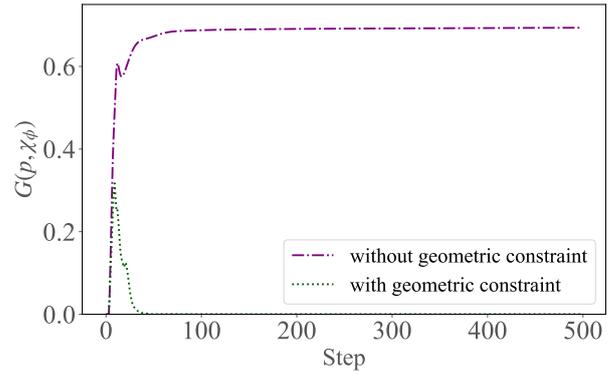


Fig. 19: Changes in regions violating the molding constraint by step with and without the constraint.

た。以下に結果をまとめる。

1. 型成形における幾何学的制約に違反する領域を仮想的な異方性拡散方程式を用いて定式化した。
2. 連成型仮想的物理モデルに基づいて、型制約を考慮した平均コンプライアンス最小化問題を具体例として定式化した。
3. 本研究で扱う最適化問題の感度設計及び最適化アルゴリズムを導出した。
4. 数値解析例として、型制約を考慮した二次元の等方性線形弾性体の平均コンプライアンス最小化問題を考え、提案手法の妥当性を検証した。

なお、本研究では一つの離型方向における制約を取り扱った。将来的には、複数の異方性拡散方程式を導入することで二回以上の離型段階を踏んだ場合の幾何学的制約を考慮できる可能性が挙げられる。

## 謝辞

本研究は科研費 23H03800 の助成を受けました。

## 参考文献

- (1) Bendsøe, M. P., and Kikuchi, N.: Generating optimal topologies in structural design using a homogenization method, *Computer methods in applied mechanics and engineering*, **71**(2)(1988), pp. 197–224.
- (2) Suzuki, K., and Kikuchi, N.: A homogenization method for shape and topology optimization, *Computer methods in applied mechanics and engineering*, **93**(3)(1991), pp. 291–318.
- (3) Xia, Q., Shi, T., Wang, M. Y., and Liu, S.: A level set based method for the optimization of cast part, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **41**(2010), pp. 735–747.
- (4) Allaire, G., Jouve, F., and Michailidis, G.: Molding direction constraints in structural optimization via a level-set method, *Variational Analysis and Aerospace Engi-*

- neering: Mathematical Challenges for the Aerospace of the Future, (2016), pp. 1-39.
- (5) Liu, S., Li, Q., Chen, W., Tong, L., and Cheng, G.: An identification method for enclosed voids restriction in manufacturability design for additive manufacturing structures, *Frontiers of Mechanical Engineering*, **10**(2015), pp. 126–137.
- (6) Li, Q., Chen, W., Liu, S., and Tong, L.: Structural topology optimization considering connectivity constraint, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **54**(2016), pp. 971–984.
- (7) Wang, C., Xu, B., Meng, Q., Rong, J., and Zhao, Y.: Topology optimization of cast parts considering parting surface position, *Advances in Engineering Software*, **149**(2020), p. 102886.
- (8) Li, Q., Chen, W., Liu, S., and Fan, H.: Topology optimization design of cast parts based on virtual temperature method, *Computer-Aided Design*, **94**(2018), pp. 28–40.
- (9) Yamada, T., Geometric shape features extraction using a steady state partial differential equation system, *Journal of Computational Design and Engineering*, Volume **6**, Issue **4**(2019), pp. 647–656.
- (10) 酒井虹太, 野口悠暉, 山田崇恭: 幾何学的特徴量に対する偏微分方程式を用いた型成形製造制約の数理モデルとトポロジー最適化への展開, *日本計算工学会論文集*, **2021**(2021) p. 20210018–20210018.
- (11) Sato, Y., Yamada, T., Izui, K., and Nishiwaki, S.: Manufacturability evaluation for molded parts using fictitious physical models, and its application in topology optimization, *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, **92**(2017), pp. 1391–1409.
- (12) Yamada, T., and Noguchi, Y.: Topology optimization with a closed cavity exclusion constraint for additive manufacturing based on the fictitious physical model approach, *Additive Manufacturing*, **52**(2022), p. 102630.
- (13) Tajima, M., and Yamada, T.: Topology optimization with geometric constraints for additive manufacturing based on coupled fictitious physical model, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **417**(2023), p. 116415.
- (14) Yamada, T., Izui, K., Nishiwaki, S., and Takezawa, A.: A topology optimization method based on the level set method incorporating a fictitious interface energy, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **199.45**(2010), pp. 2876–2891.
- (15) Allaire, G., Jouve, F., and Toader, A. M.: Structural optimization using sensitivity analysis and a level-set method, *Journal of Computational Physics*, **194.1**(2004), pp. 363–393.

# マイクロポーラ弾性体の考え方に基づいた スライダ-クランク機構のトポロジー最適化

## TOPOLOGY OPTIMIZATION FOR SLIDER-CRANK MECHANISMS BASED ON MICROPOLAR ELASTICITY

小夜 結利花<sup>1)</sup>, 山田 崇恭<sup>2)</sup>

Yurika SAYO and Takayuki YAMADA

1) 東京大学大学院工学系研究科 (〒113-28656 東京都文京区弥生 2-11-16, E-mail: sayo-y34@g.ecc.u-tokyo.ac.jp)

2) 東京大学大学院工学系研究科 (〒113-28656 東京都文京区弥生 2-11-16, E-mail: t.yamada@mech.t.u-tokyo.ac.jp)

The slider-crank mechanism plays a crucial role in various mechanical systems, converting rotational motion into linear motion and vice versa. This mechanism, comprising multiple links, offers versatility in applications such as creating intricate strokes and incorporating adjustment mechanisms. However, manually designing the part layout and dimensions for desired functionality can be challenging. This study introduces a comprehensive optimization approach to determine the number, dimensions, and link structure within a slider-crank mechanism using topology optimization techniques. The linkage mechanism is represented as a topology-optimizable continuum, utilizing micropolar elasticity with independently definable bending and tensile deformation properties. The topology optimization problem is then formulated to enable the slider to produce the desired stroke curve using the proposed model. The proposed multi-material model is defined by the design variables of the Solid Isotropic Material with Penalization (SIMP) method, and the optimization problem is solved by a gradient-based optimization algorithm. Finally, we validate the effectiveness of this method through numerical examples.

**Key Words:** Topology optimization, Slider-crank mechanism, Link mechanism, Micropolar elasticity, Mechanism synthesis

### 1. 緒言

スライダ-クランク機構は、クランクの回転運動からスライダの直線運動への変換、またはその逆の変換を行うリンク機構の一種であり、自動車のエンジンやプレス機、産業ロボットなどの機械システムに広く用いられる。スライダ-クランク機構の中では、3つの回転ジョイントと1つのスライダから構成され、スライダのストローク曲線が正弦曲線となる4節リンク型のものが最も一般的である。一方、より多くのリンク・ジョイントから構成される多リンク型のスライダ-クランク機構を用いることで、プレス機におけるスライダの複雑なストローク曲線の生成や正弦波状の動作を行う可変圧縮比エンジンにおけるスライダの上死点位置調整機構の挿入 [1] など、より自由度の高いシステムが設計できる。

多リンク型のスライダ-クランク機構では、リンク・ジョイ

ントの数や連結関係の組み合わせが複数存在し、かつリンクの寸法などの機構定数の数が増えることから、所望の運動を行う機構を試行錯誤的に設計することは簡単ではない。そこで、最適化手法を用いてスライダ-クランク機構を設計する先行研究が行われてきた。例えば、Hsieh と Tsai [2] は6節リンクから成るプレス機に対し逐次二次計画法によりリンクの寸法最適化を行うことで目標のストローク曲線の生成を行った。また、小松原と栗林 [3] は6節リンクから成る可変圧縮比エンジンに対し最小二乗法を用いてストローク曲線が正弦曲線となる機構変数の探索を行った。しかし、これらの例のように多くの先行研究において、最適化の対象は寸法に限られ、リンク・ジョイントの数と連結関係は規定である。一方、Kang ら [4] はスライダを含むリンク機構について、バネで接続された剛体ブロックから成るリンク機構の近似モデルを用いてリンク・ジョイントの数と連結関係を最適化することでエンドエフェクタの軌道生成を行っているが、

スライダを出力とした軌道生成は行っていない。

また、スライダ-クランク機構における各リンクの構造の設計も、耐久性や仕事効率の点で重要である。Vanpaemalら [5] は、柔軟マルチボディダイナミクスを基にしたトポロジー最適化により、質量制約下での各リンクの剛性最大化を行っている。しかし、この手法における設計領域は各リンクごとに設定されることから、リンク・ジョイントの数や連結関係、リンクの寸法は規定である。

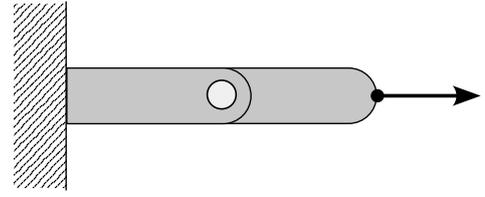
以上のように、スライダ-クランク機構において最適化による目標のスライダのストローク曲線の生成や、性能の向上が行われているが、これらを同時に行う研究はほとんど行われていない。同じストローク曲線を生成する機構が複数存在することから、機構と構造を同時に最適化することで、目標のストローク曲線を生成し、かつより性能の高い設計解が得られると期待できる。そこで本研究では、複数材料トポロジー最適化手法を用いた、スライダ-クランク機構におけるリンク・ジョイントの数や連結関係、リンクの寸法、構造の包括的な設計手法を構築する。なお本研究では特に、1つのスライダと、数が未知の回転ジョイントから構成される平面スライダ-クランク機構について考える。

複数材料トポロジー最適化では、異なる材料特性をもつ複数材料の最適な材料配置を数値解析により求める。そのため、図1のリンク機構の例のように、引張方向には変形せず曲げ方向の力には回転ジョイント部のみが曲がるリンクと回転ジョイントの変形特性を、連続体の2材料で表現できれば、リンク機構に複数材料トポロジー最適化手法を適用できると考えられる。そこで先行研究 [6] では、引張特性と曲げ特性を独立に設定可能なマイクロポーラ弾性体 [7] を用いることで、リンク機構をトポロジー最適化可能な連続体で近似し、回転ジョイントのみから成るリンク機構の最適化を行った。本研究では、スライダの運動方向と垂直な並進バネの付加により出力部の自由度を拘束することで、マイクロポーラ弾性体によるリンク機構の近似モデルによるスライダ-クランク機構のトポロジー最適化を行う。

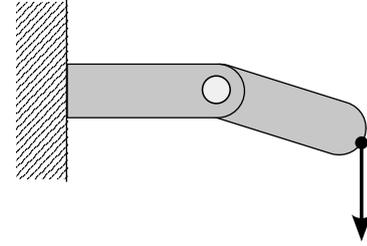
以下、本論文の構成について述べる。2章では、マイクロポーラ弾性体を用いたリンク機構の連続体近似モデルについて説明する。3章では、提案モデルを用いたスライダ-クランク機構のトポロジー最適化問題を定式化する。4章では最適化アルゴリズムについて述べ、5章では数値解析例による提案手法の妥当性の検証を行う。

## 2. リンク機構の連続体近似モデル

本章では、マイクロポーラ弾性体を用いたリンク機構の連続体近似モデルについて説明する。マイクロポーラ弾性体は材料の微細構造の特性を考慮した一般化連続体力学の1つであり、古典弾性体とは異なり材料の引張特性と曲げ特性を独立に定義することができる。本研究では、マイクロポーラ弾性体のこの特徴を用いることでリンク機構におけるリンクと回転ジョイントの変形特性をトポロジー最適化可能な連続体で表現する。



(a) Link mechanism under tensile load.



(b) Link mechanism under bending load.

Fig. 1 Deformation characteristics of the link mechanism.

### 2.1. マイクロポーラ弾性体

古典弾性体では、変位  $\mathbf{u}$  のみにより物体の変形を定義するのにに対し、マイクロポーラ弾性体では変位  $\mathbf{u}$  に加え各物質点における微視的な回転量を表すマイクロ回転  $\phi$  を考慮した上で物質点間の相互作用や材料特性を定義する。このとき、物体の変形を特徴づけるひずみテンソル  $\epsilon$ 、曲率テンソル  $\chi$  は、以下のように定義される。

$$\epsilon_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + e_{ijk} \phi_k \quad (1)$$

$$\chi_{ij} = \frac{\partial \phi_i}{\partial x_j} \quad (2)$$

ここで、 $e_{ijk}$  は3次の交代テンソルである。

マイクロポーラ弾性体の物質点の周りには、応力  $\sigma$  に加え偶応力  $\tau$  が発生し、以下の関係式で表される。

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \epsilon_{kl} \quad (3)$$

$$\tau_{ij} = B_{ijkl} \chi_{kl} \quad (4)$$

ここで、 $C_{ijkl}$ 、 $B_{ijkl}$  は弾性テンソルであり、二次元問題の場合には以下の式で定義される。

$$C_{ijkl} = \lambda_M \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu_M \delta_{il} \delta_{jk} + (\mu_M + \kappa_M) \delta_{ik} \delta_{jl} \quad (5)$$

$$B_{ijkl} = \gamma_M \delta_{ik} \delta_{jl} \quad (6)$$

$\delta_{ij}$  はクロネッカーのデルタを示す。 $\lambda_M$ 、 $\mu_M$ 、 $\kappa_M$ 、 $\gamma_M$  は弾性係数であり、ヤング率  $E_M$ 、ポアソン比  $\nu_M$ 、特性長さ  $l_M$ 、連成数  $N_M$  の4つの材料定数と以下のような関係を持つ。

つ [8] [9].

$$E_M = \frac{(2\mu_M + \kappa_M)(3\lambda_M + 2\mu_M + \kappa_M)}{2\lambda_M + 2\mu_M + \kappa_M} \quad (7)$$

$$\nu_M = \frac{\lambda_M}{2\lambda_M + 2\mu_M + \kappa_M} \quad (8)$$

$$l_M = \sqrt{\frac{\gamma_M}{4\mu_M + 2\kappa_M}} \quad (9)$$

$$N_M = \sqrt{\frac{\kappa_M}{2\mu_M + 2\kappa_M}} \quad (10)$$

特性長さ  $l_M$  の大小は、4つの弾性係数のうち、偶応力の構成式に含まれる  $\gamma_M$  のみに影響を与える。そのため、特性長さは引張特性には影響せず、曲げ特性のみに影響を与える。連成数  $N_M$  が0に近づくとマイクロポーラ弾性体は古典弾性体に、1に近づくと偶応力理論に一致する。偶応力理論では、マイクロ回転  $\phi$  が巨視的な回転量と一致する。

体積力及び体積偶力がないと仮定すると、マイクロポーラ弾性体における応力と偶応力の平衡方程式は以下のように表される。

$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma_{ji}}{\partial x_j} = 0 \\ \frac{\partial \tau_{ji}}{\partial x_j} + e_{ikl} \sigma_{kl} = 0 \end{cases} \quad (11)$$

また、応力、偶応力に関するノイマン境界条件はそれぞれ以下のように与えられる。

$$\sigma_{ji} n_j = \bar{f}_i \quad \text{on } \Gamma_f \quad (12)$$

$$\tau_{ji} n_j = \bar{m}_i \quad \text{on } \Gamma_m \quad (13)$$

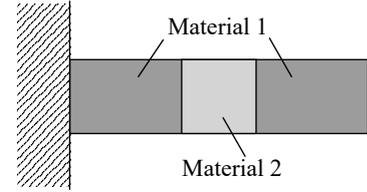
ここで、 $\mathbf{n}$  は境界面の単位法線ベクトルを、 $\bar{\mathbf{f}}$  と  $\bar{\mathbf{m}}$  はそれぞれ境界力、境界偶力をそれぞれ表す。

## 2.2. マイクロポーラ弾性体によるリンク機構の変形特性の表現

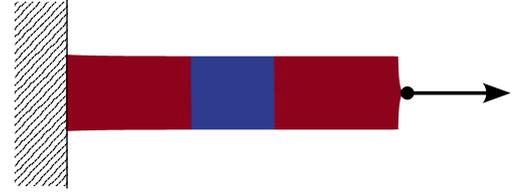
本研究では、連成数  $N_M$  を1に近い値としたとき、同じヤング率  $E_M$  とポアソン比  $\nu_M$  をもち、材料の曲げ特性を変化させる特性長さ  $l_M$  の大小を変えた2材料を用いることで、リンク機構のリンクと回転ジョイントの変形特性を近似的に表現する。本節では、2節リンク機構の例を用いて、マイクロポーラ弾性体を用いたリンク機構の連続体近似モデルがリンク機構の変形特性を模擬できることを確認する。

図1は、検証の対象とする壁に接続された2節リンク機構であり、曲げ方向に荷重をかけた際には回転ジョイントのみが曲がり、引張方向に荷重をかけた際には伸びないという特性をもつ。この2節リンク機構を、図2(a)のように2材料のマイクロポーラ弾性体から成る片持ち梁に置き換える。なお、材料1には特性長さ  $l_M$  が大きく曲がりにくいリンクに相当する材料を、材料2には特性長さ  $l_M$  が小さく曲がり

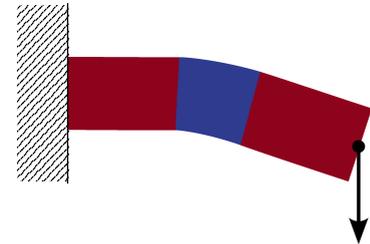
やすい回転ジョイントに相当する材料を配置する。このときの変形の様子を図2(b)(c)に示す。赤の材料がリンクに相当する材料1、青の材料がジョイントに相当する材料2である。2つの材料は曲げ方向のみ変形特性が異なるため、引張方向に力を加えた際には2つの材料が一樣に伸び、曲げ方向に力を加えた際には回転ジョイントに相当する材料2が大きく曲がる、リンク機構に近い変形をすることが確認できる。よって本研究では、マイクロポーラ弾性体において特性長さ  $l_M$  を変化させた2材料モデルをリンク機構を近似したモデルとして扱う。



(a) Cantilever beam consisting of two materials.



(b) Micropolar elasticity model under tensile load.



(c) Micropolar elasticity model under bending load.

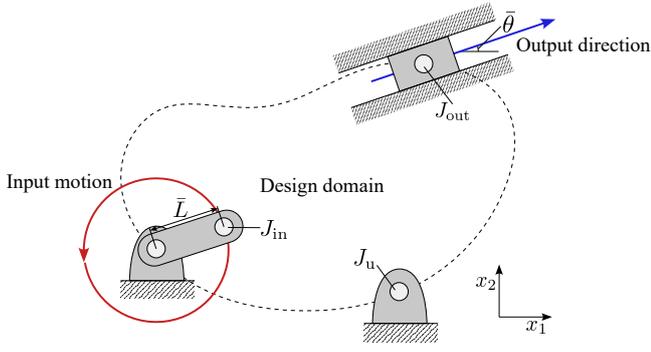
Fig. 2 Deformation characteristics of the micropolar elasticity model.

## 3. スライダー-クランク機構のトポロジー最適化問題

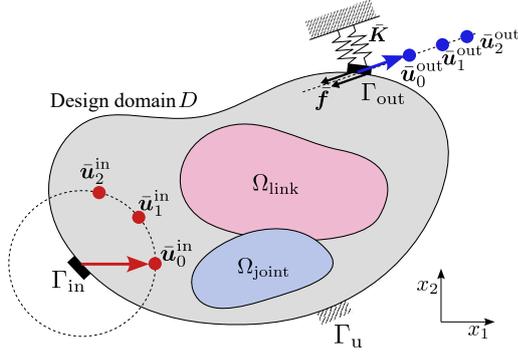
### 3.1. 定式化

本研究で扱うスライダー-クランク機構の最適化問題を図3(a)に示す。設計の対称とする機構は1つの固定されたジョイント、入力回転運動が与えられる長さ  $\bar{L}$  のクランク、 $x_1$  方向から角度  $\bar{\theta}$  だけ回転した方向の並進運動が出力されるスライダと、その間を接続する数と構造が未知のリンクから成る。本研究では、モデルは線形であると仮定するため、スライダのストローク曲線は正弦曲線に限られる。そこで、角度  $\bar{\theta}$  方向に振幅  $\bar{A}$ 、位相  $\bar{\alpha}$  の正弦波運動を行う機構をトポロジー最適化によって設計する。

図3(a)のスライダー-クランク機構の最適化問題を、連続体



(a) Problem definition to synthesize a linkage mechanism.



(b) Design domain for topology optimization of a linkage mechanism.

Fig. 3 Problem definition.

近似モデルの境界値問題に置き換えたものが図 3(b) である。設計領域  $D$  内においてリンク材料、ジョイント材料が占める領域をそれぞれ  $\Omega_{\text{link}}$ ,  $\Omega_{\text{joint}}$  とし、これらの分布により図 3(a) における未知のリンクの配置、構造を示す。また、固定リンク、入力のカランク、出力のスライダはそれぞれ境界条件によって表現される。境界  $\Gamma_u$  は、図 3(a) において固定されたジョイント  $J_u$  を示し、変位 0 のディリクレ条件を与える。また、境界  $\Gamma_{\text{in}}$  は、入力のカランクの一端であるジョイント  $J_{\text{in}}$  を示す。カランクの回転運動を表現するため、1 回転するときの時間を  $T$  ステップに分割し、各時刻  $t$  で以下の強制変位  $\bar{\mathbf{u}}_t^{\text{in}}$  を与える。

$$\bar{\mathbf{u}}_t^{\text{in}} = \begin{pmatrix} \bar{L} \cos \frac{t}{2\pi} \\ \bar{L} \sin \frac{t}{2\pi} \end{pmatrix} \quad t \in \{0, 1, \dots, T-1\} \quad (14)$$

境界  $\Gamma_{\text{out}}$  は出力のスライダのジョイント  $J_{\text{out}}$  を示し、式 (14) で定義された各時刻の入力の変位に対し、目標の変位  $\bar{\mathbf{u}}_t^{\text{out}}$  を以下のように定義する。

$$\bar{\mathbf{u}}_t^{\text{out}} = \mathbf{R}_{\bar{\theta}} \begin{pmatrix} \bar{A} \sin \left( \frac{t}{2\pi} + \bar{\alpha} \right) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (15)$$

ここで、 $\mathbf{R}_{\bar{\theta}}$  は以下の式で定義される 2 階の回転テンソルである。

$$\mathbf{R}_{\bar{\theta}} = \begin{pmatrix} \cos \bar{\theta} & -\sin \bar{\theta} \\ \sin \bar{\theta} & \cos \bar{\theta} \end{pmatrix} \quad (16)$$

さらに、 $\Gamma_{\text{out}}$  はスライダを表すため、角度  $\bar{\theta}$  方向のみに変位が許容される必要がある。そこで、角度  $\bar{\theta}$  と垂直な方向の変位に対する、十分に強いバネ剛性  $\bar{k}$  の並進バネをつけることにより拘束を表現する。このとき、バネの剛性行列は以下のように定義できる。

$$\bar{\mathbf{K}} = \mathbf{R}_{\bar{\theta}} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \bar{k} \end{pmatrix} \mathbf{R}_{\bar{\theta}}^T \quad (17)$$

境界  $\Gamma_{\text{out}}$  の変位と目標変位  $\bar{\mathbf{u}}_t^{\text{out}}$  との誤差を最小化することで目標軌道を生成するが、Pederson [10] がコンプライアントメカニズムにおける経路生成問題において示したように、中間密度領域のない構造を得るためには出力部への外力の負荷が必要である。また、出力部への外力の負荷下での目標軌道の生成は、リンク機構の自由度の冗長を避けることにも有効である [11]。そこで、境界  $\Gamma_{\text{out}}$  に対し以下のスライダの運動方向の外力を与える。

$$\bar{\mathbf{f}}_m = (-1)^m \mathbf{R}_{\bar{\theta}} \begin{pmatrix} \bar{f}_0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (18)$$

ここで、 $\bar{f}_0$  は外力の大きさを表す定数であり、初期構造において入力部  $\Gamma_{\text{in}}$  への強制変位による変位場に対し影響を与える値に設定する。また、 $m \in 0, 1$  は荷重の方向を表す。角度  $\bar{\theta}$  方向と逆方向の 2 つの荷重に対し誤差関数を最小化することで、荷重のない場合でも目標のストローク曲線をとるようにする。よって、スライダの変位の誤差関数は以下のように設定される。

$$F_{\text{all}}^{\text{path}} = \sum_{m=0}^1 \sum_{t=0}^{T-1} F_{m,t}^{\text{path}} \quad (19)$$

$$F_{m,t}^{\text{path}} = \frac{1}{|\Gamma_{\text{out}}|} \int_{\Gamma_{\text{out}}} (u_i - \bar{u}_{t,i}^{\text{out}})^2 d\Gamma \quad (20)$$

さらに、リンク機構として適切な設計解を得るためには、リンク機構の自由度が不足し回転ジョイントが駆動しない状態を避ける必要がある。境界条件の設定上、自由度が不足した場合においても強制変位によりカランクは回転するが、運動はジョイント部の回転ではなくリンク部の弾性変形により実現される。よって、リンク部の弾性変形を抑制するために、以下に示すリンク部のひずみエネルギーを最小化することで、自由度の不足の無い機構を生成する。

$$F_{\text{all}}^{\text{eg}} = \sum_{m=0}^1 \sum_{t=0}^{T-1} F_{m,t}^{\text{eg}} \quad (21)$$

$$F_{m,t}^{\text{eg}} = \frac{1}{|\Omega_{\text{link}}|} \int_{\Omega_{\text{link}}} (C_{ijkl} \epsilon_{kl}(\mathbf{u}, \phi) \epsilon_{ij}(\mathbf{u}, \phi) + B_{ijkl} \chi_{kl}(\phi) \chi_{ij}(\phi)) d\Omega \quad (22)$$

以上より、リンク機構の連続体近似モデルを用いたスライダ-クランク機構のトポロジー最適化問題は、以下のようにまとめられる。

$$\min_{\xi} F = \omega^{\text{path}} F_{\text{all}}^{\text{path}} + \omega^{\text{eg}} F_{\text{all}}^{\text{path}} \quad (23)$$

$$\text{subject to } G^{\text{link}} = \frac{\int_D \rho^{\text{link}} d\Omega}{\int_D d\Omega} - V_{\text{max}}^{\text{link}} \leq 0 \quad (24)$$

$$G^{\text{joint}} = \frac{\int_D \rho^{\text{joint}} d\Omega}{\int_D d\Omega} - V_{\text{max}}^{\text{joint}} \leq 0 \quad (25)$$

$$\begin{cases} -\frac{\partial \sigma_{ji}}{\partial x_j} = 0 \\ -\frac{\partial \tau_{ji}}{\partial x_j} - e_{ikl} \sigma_{kl} = 0 \\ u_i = \bar{u}_{t,i}^{\text{in}} & \text{on } \Gamma_{\text{in}} \\ u_i = 0 & \text{on } \Gamma_{\text{u}} \\ \sigma_{ji} n_j = -\bar{K}_{ij} u_j + \bar{f}_{m,i} & \text{on } \Gamma_{\text{out}} \end{cases} \quad (26)$$

ここで、 $\omega^{\text{path}}$  と  $\omega^{\text{eg}}$  は2つの目的関数の重み係数を、 $\xi$  は次節にて後述する材料分布を表すための設計変数を示す。式(24)(25)はそれぞれリンク材料、ジョイント材料に対し、 $V_{\text{max}}^{\text{link}}$ ,  $V_{\text{max}}^{\text{joint}}$  を上限値とした体積制約であり、 $\rho^{\text{link}}$ ,  $\rho^{\text{joint}}$  はそれぞれリンク材料、ジョイント材料の密度を示す。リンク機構に近い構造を得るために、ジョイント材料の体積の上限値は十分に小さく設定する。

### 3.2. SIMP 法に基づく設計変数の定義

本研究で扱う問題設定では、設計空間はリンク材料の領域  $\Omega_{\text{link}}$ 、ジョイント材料の領域  $\Omega_{\text{joint}}$ 、空洞部の3つの領域に分けられる。そこで、SIMP (Solid Isotropic Material with Penalization) 法 [12] における2材料モデルの材料分布の補間方法を用いて、これら3つの領域を定義する。このとき、各物質点における弾性テンソルは、2つの設計変数  $\xi_1$ ,  $\xi_2$  を用いて以下のように定義される。

$$C_{ijkl} = (\xi_1)^p \left\{ (\xi_2)^p C_{ijkl}^{\text{link}} + (1 - \xi_2)^p C_{ijkl}^{\text{joint}} \right\} \quad (27)$$

$$B_{ijkl} = (\xi_1)^p \left\{ (\xi_2)^p B_{ijkl}^{\text{link}} + (1 - \xi_2)^p B_{ijkl}^{\text{joint}} \right\} \quad (28)$$

ここで、 $C_{ijkl}^{\text{link}}$ ,  $B_{ijkl}^{\text{link}}$ ,  $C_{ijkl}^{\text{joint}}$ ,  $B_{ijkl}^{\text{joint}}$  はそれぞれリンク材料、ジョイント材料における弾性テンソルである。 $p$  は中間密度領域に対するペナルティ係数であり、本研究では  $p = 3$  を用いる。

また、リンク材料、ジョイント材料の密度  $\rho^{\text{link}}$ ,  $\rho^{\text{joint}}$  を以下のように定義する。

$$\rho^{\text{link}} = \xi_1 \xi_2 \quad (29)$$

$$\rho^{\text{joint}} = \xi_1 (1 - \xi_2) \quad (30)$$

各設計変数の範囲は以下の通りである。

$$0 < \xi_{\text{min}} \leq \xi_1 \leq 1 \quad (31)$$

$$0 \leq \xi_2 \leq 1 \quad (32)$$

ここで、 $\xi_1$  の下限値  $\xi_{\text{min}}$  は弾性テンソルを常に正則にするために設定され、本研究では  $\xi_{\text{min}} = 10^{-3}$  とする。

### 3.3. 感度解析

本研究では、勾配に基づく最適化アルゴリズムである MMA (The Method of Moving Asymptotes) [13] を用いて式(23)-(26)のトポロジー最適化問題を解く。そのため、目的関数  $F$  および不等式制約関数  $G^{\text{link}}$ ,  $G^{\text{joint}}$  に対する設計感度の導出が必要となる。

まず、随伴変数法を用いて目的関数  $F$  に対する設計感度を求める。最適化問題(23)-(26)は、各時刻、各外力方向において異なる拘束条件を持つことから、随伴方程式を複数回解く必要がある。そこで、随伴方程式を解く回数を最小限にするため、式(23)の目的関数  $F$  を同じ境界条件下での目的関数  $F_{m,t}$  の和の形に書き換える。

$$F = \sum_{m=0}^1 \sum_{t=0}^{T-1} F_{m,t} \quad (33)$$

$$F_{m,t} = \omega^{\text{path}} F_{m,t}^{\text{path}} + \omega^{\text{eg}} F_{m,t}^{\text{eg}} \quad (34)$$

このとき、設計変数  $\xi_n$  ( $n \in 1, 2$ ) の目的関数  $F$  に対する感度は以下の通り分解できる。

$$\frac{\partial F}{\partial \xi_i} = \sum_{m=0}^1 \sum_{t=0}^{T-1} \frac{\partial F_{m,t}}{\partial \xi_i} \quad (35)$$

停留条件を用いることで、各時刻、各外力方向下での解くべき随伴方程式は以下の通り導かれる。

$$\begin{aligned} & \int_D \left\{ C_{ijkl} \epsilon_{kl}(\tilde{\mathbf{v}}, \tilde{\boldsymbol{\psi}}) \epsilon_{ij}(\tilde{\mathbf{v}}, \tilde{\boldsymbol{\psi}}) + B_{ijkl} \chi_{kl}(\tilde{\boldsymbol{\psi}}) \chi_{ij}(\tilde{\boldsymbol{\psi}}) \right\} d\Omega \\ & = - \int_{\Gamma_{\text{out}}} \bar{K}_{ij} v_i \tilde{v}_j d\Gamma + \frac{2\omega^{\text{path}}}{|\Gamma_{\text{out}}|} \int_{\Gamma_{\text{out}}} (u_i - \bar{u}_{t,i}^{\text{out}}) \tilde{v}_i d\Gamma \quad (36) \\ & + \frac{2\omega^{\text{eg}}}{|\Omega_{\text{link}}|} \int_{\Omega_{\text{link}}} \left\{ C_{ijkl} \epsilon_{kl}(\tilde{\mathbf{v}}, \tilde{\boldsymbol{\psi}}) \epsilon_{ij}(\mathbf{u}, \phi) + B_{ijkl} \chi_{kl}(\tilde{\boldsymbol{\psi}}) \chi_{ij}(\phi) \right\} d\Omega \end{aligned}$$

ここで、 $\mathbf{v}$ ,  $\boldsymbol{\psi}$  はそれぞれ変位、マイクロ回転に対応する随伴変数を、 $\tilde{\mathbf{v}}$ ,  $\tilde{\boldsymbol{\psi}}$  は試験関数をそれぞれ表す。時刻  $t$ , 外力方向  $m$  における目的関数に対する設計変数  $\xi_n$  の感度は、随伴方程式 (36) の解  $\mathbf{v}$ ,  $\boldsymbol{\psi}$  を用いて以下のように導かれる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_{m,t}}{\partial \xi_n} &= \frac{\partial C_{ijkl}}{\partial \xi_n} \epsilon_{kl}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\phi}) \left\{ \epsilon_{ij}(\mathbf{v}, \boldsymbol{\psi}) - \frac{\omega^{\text{eg}} \rho^{\text{link}}}{|\Omega_{\text{link}}|} \epsilon_{ij}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\phi}) \right\} \\ &+ \frac{\partial B_{ijkl}}{\partial \xi_n} \chi_{kl}(\boldsymbol{\phi}) \left\{ \chi_{ij}(\boldsymbol{\psi}) - \frac{\omega^{\text{eg}} \rho^{\text{link}}}{|\Omega_{\text{link}}|} \chi_{ij}(\boldsymbol{\phi}) \right\} \end{aligned} \quad (37)$$

なお、各弾性テンソルに対する設計変数の偏微分は式 (27)(28) より以下のように求められる、

$$\frac{\partial C_{ijkl}}{\partial \xi_1} = p(\xi_1)^{p-1} \left\{ (\xi_2)^p C_{ijkl}^{\text{link}} + (1 - \xi_2)^p C_{ijkl}^{\text{joint}} \right\} \quad (38)$$

$$\frac{\partial B_{ijkl}}{\partial \xi_1} = p(\xi_1)^{p-1} \left\{ (\xi_2)^p B_{ijkl}^{\text{link}} + (1 - \xi_2)^p B_{ijkl}^{\text{joint}} \right\} \quad (39)$$

$$\frac{\partial C_{ijkl}}{\partial \xi_2} = p(\xi_1)^p \left\{ (\xi_2)^{p-1} C_{ijkl}^{\text{link}} - (1 - \xi_2)^{p-1} C_{ijkl}^{\text{joint}} \right\} \quad (40)$$

$$\frac{\partial B_{ijkl}}{\partial \xi_2} = p(\xi_1)^p \left\{ (\xi_2)^{p-1} B_{ijkl}^{\text{link}} - (1 - \xi_2)^{p-1} B_{ijkl}^{\text{joint}} \right\} \quad (41)$$

次に、体積制約に対する設計感度はそれぞれ以下の通りとなる。

$$\frac{\partial G^{\text{link}}}{\partial \xi_1} = \frac{\xi_2}{\int_D d\Omega} \quad (42)$$

$$\frac{\partial G^{\text{joint}}}{\partial \xi_1} = \frac{1 - \xi_2}{\int_D d\Omega} \quad (43)$$

$$\frac{\partial G^{\text{link}}}{\partial \xi_2} = \frac{\xi_1}{\int_D d\Omega} \quad (44)$$

$$\frac{\partial G^{\text{joint}}}{\partial \xi_2} = -\frac{\xi_1}{\int_D d\Omega} \quad (45)$$

## 4. 数値実装法

### 4.1. 感度の平均化とフィルタリング

最適化の安定性のため、式 (35) で求められる目的関数に対する設計感度について、以下のようにステップごとの平均化を行う。

$$\overline{\frac{\partial F}{\partial \xi_i}} = (1 - c) \overline{\frac{\partial F}{\partial \xi_i}}^{\text{old}} + c \frac{\partial F}{\partial \xi_i} \quad (46)$$

ここで、 $\overline{\frac{\partial F}{\partial \xi_i}}^{\text{old}}$  は最適化の 1 ステップ前における平均化された設計感度である。  $c$  は減衰率を表す定数であり、  $0 < c < 1$  の範囲で指定される。

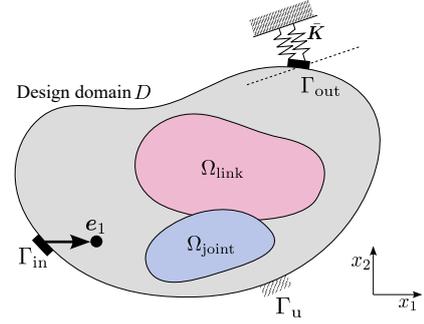
また、密度法におけるメッシュ依存性の問題を回避するため、平均化された設計感度にヘルムホルツ型偏微分方程式によるフィルタリング [14] を適用する。

### 4.2. 重ね合わせの原理を用いた状態場の計算

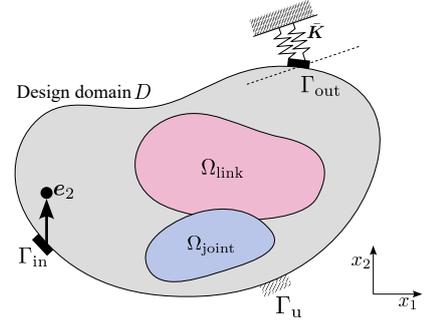
本研究では、材料の線形性を仮定しているため、状態場  $\mathbf{U} = \{\mathbf{u}, \boldsymbol{\phi}\}$  の算出に重ね合わせの原理を用いることができる。図 (a), (b), (c) の境界条件下で算出される状態場をそれぞれ  $\mathbf{U}^{\text{disp1}}$ ,  $\mathbf{U}^{\text{disp2}}$ ,  $\mathbf{U}^{\text{trac}}$  とすると、時刻  $t$ , 外力方向  $m$  の状態場は以下の式で求められる。

$$\mathbf{U}_{t,m} = \bar{u}_{t,1}^{\text{in}} \mathbf{U}^{\text{disp1}} + \bar{u}_{t,2}^{\text{in}} \mathbf{U}^{\text{disp2}} + (-1)^m \mathbf{U}^{\text{trac}} \quad (47)$$

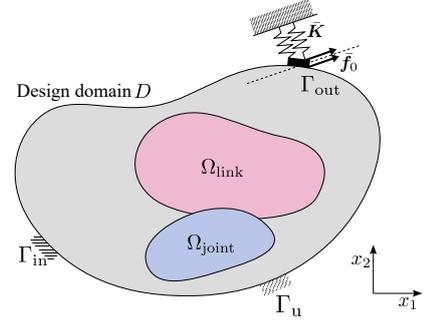
重ね合わせの原理の適用により、最適化の 1 ステップあたりに解く支配方程式の数を減らすことができる。



(a) Design domain for calculating  $\mathbf{U}^{\text{disp1}}$ .



(b) Design domain for calculating  $\mathbf{U}^{\text{disp2}}$ .



(c) Design domain for calculating  $\mathbf{U}^{\text{trac}}$ .

Fig. 4 Principle of superposition.  $\mathbf{e}_1$ ,  $\mathbf{e}_2$  represent unit vectors in the  $x_1$  and  $x_2$  directions, respectively.

### 4.3. 最適化アルゴリズム

本研究では、以下の手順に従って最適化問題を解く。

Step 1: 設計変数の初期値を与える。

- Step 2: 有限要素法により支配方程式 (26) を解き, 基本となる状態場  $U^{\text{disp}1}$ ,  $U^{\text{disp}2}$ ,  $U^{\text{trac}}$  を求める.
- Step 3: 時刻  $t$ , 荷重方向  $m$  を設定する.
- Step 4: 式 (47) により得られる状態場を用いて, 時刻  $t$ , 外力方向  $m$  における目的関数を求める.
- Step 5: 有限要素法により随伴方程式 (36) を解き, 時刻  $t$ , 外力方向  $m$  における設計感度を求める.
- Step 6: 全時刻, 全荷重方向の計算を終えるまで Step 3 から Step 5 を繰り返す.
- Step 7: 目的関数, 体積制約を計算し, 収束判定を行う.
- Step 8: MMA により設計変数を更新し, Step 2 に戻る.
- 各計算の実装には, 汎用有限要素法解析ソフトウェア FreeFEM++ [15] を用いた.

## 5. 数値解析例

本章では, 式 (23) の最適化問題を対象とした数値解析例を用いて, 提案手法の妥当性を検証する. 問題設定として, 図のような設計領域  $D$  を考える. ヤング率  $E_M$ , ポアソン比  $\nu_M$ , 適合度  $N_M$  は 2 材料ともにそれぞれ 200[GPa], 0.3, 0.99 とし, 特性長さはリンク材料では 0.1 [m], ジョイント材料では 0.001 [m] とする. また, クランクの長さ  $\bar{L}$  は 0.25 [m], スライダの変位を拘束するバネのバネ剛性  $\bar{k}$  は  $10^{24}$  [N/m], 外力の大きさ  $\bar{f}_0$  は  $10^9$  [N], 時刻の分割数  $T$  は 8 とした. 目的関数の重み係数  $\omega^{\text{path}}$ ,  $\omega^{\text{eg}}$  はそれぞれ 1,  $10^{-10}$  とした.  $\omega^{\text{eg}}$  は初期状態における  $10^{-2} \frac{F_{\text{path}}^{\text{all}}}{F_{\text{eg}}^{\text{all}}}$  程度の値となっている. また, 感度の平均化の減衰率  $c$  は 0.1, 感度のフィルタリング半径は  $\xi_1$  に対して 0.04,  $\xi_2$  に対して 0.02 とした. リンク材料の体積の最大値  $V_{\text{max}}^{\text{link}}$  は 34% とする. また, ジョイント材料の体積の最大値  $V_{\text{max}}^{\text{joint}}$  は, ジョイント材料がリンク機構の回転ジョイント同様に十分小さくなるよう 1% とする.

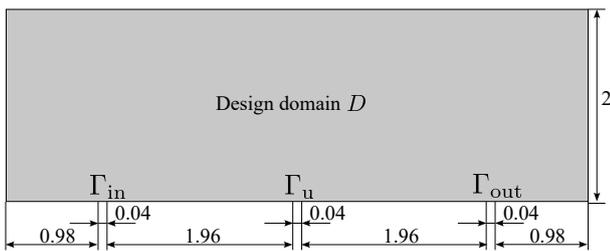


Fig. 5 Problem setting for numerical examples.

表 1 に示すように, スライダの角度  $\bar{\theta}$ , ストローク曲線の振幅  $\bar{A}$ , 位相  $\bar{\alpha}$  を変えた 4 つのケースに対して最適化を行う. 各ケースに対して得られた最適構造を図 6 に示す. なお, 赤の材料がリンク材料, 青の材料がジョイント材料を示す. 全てのケースに対する最適構造について, 境界  $\Gamma_{\text{in}}$ ,  $\Gamma_{\text{u}}$ ,  $\Gamma_{\text{out}}$  がジョイントに相当することを考慮の上, リンク材料とジョイント材料の配置をリンク機構のリンクと回転ジョイントに置き換えることで, 図 7 に示す 1 自由度の 6 節リンク機構とみなすことができる. なお, ジョイント材料部に 1 つの有限

要素で接続されたヒンジ構造が見られるが, 得られた最適構造をもとに機構を設計する際には, ヒンジ構造を含めたジョイント材料が集まる箇所をそれぞれ 1 つのジョイントで置き換えることを想定しているため, 本研究ではヒンジ構造の発生は問題としない. 図 8 は各ケースの最適構造において, 外力の大きさ  $f_0 = 0$  としたときのスライダのストローク曲線であるが, 全てのケースにおいて制御点に近い曲線を出力できているとわかる. ケース 1 の最適構造における,  $f_0 = 0$  の場合の各時刻の変形の様子とマイクロ回転の分布を表 2 に示す. ここで, 偶応力理論ではマイクロ回転と巨視的な回転量が一致するため, マイクロ回転の分布より最適構造においてジョイント材料の回転により変形が実現されているとわかる. 以上より, 提案手法は目標のストローク曲線を生成するスライダ-クランク機構を設計するのに有効であると考えられる.

Table 1 Parameters for each case in the numerical example.

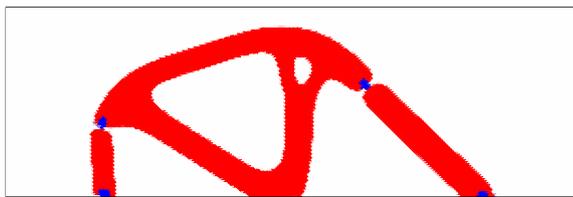
	$\bar{\theta}$ [rad]	$\bar{\alpha}$ [rad]	$\bar{A}$ [m]
Case 1	0	0	0.25
Case 2	$\frac{\pi}{4}$	0	0.25
Case 3	0	$\frac{\pi}{4}$	0.25
Case 4	0	0	0.15

## 6. 結言

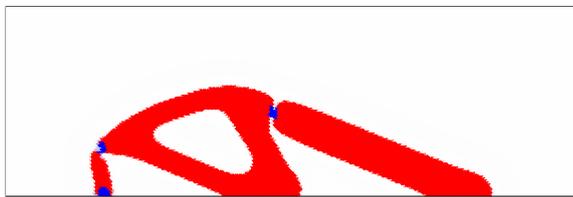
本研究では, マイクロポーラ弾性体によるリンク機構の近似モデルを導入することでスライダ-クランク機構をトポロジー最適化する手法を提案した. 得られた成果を以下に示す.

- 引張特性と曲げ特性を独立に定義可能なマイクロポーラ弾性体の 2 材料モデルを用いることで, リンク機構をトポロジー最適化可能な連続体で近似する考え方を提案した.
- 提案モデルを用いてスライダが目標のストローク曲線をとるようなスライダ-クランク機構を設計するためのトポロジー最適化問題を定式化した. スライダを表す出力部の境界に運動方向と垂直な並進バネを付加することで, 出力のスライダに対する自由度の拘束を行った. 目的関数には, 出力変位の誤差関数とリンク材料のひずみエネルギーの重み付き和を用いた.
- SIMP 法に基づいて提案モデルの材料分布を表す設計変数を設定し, その最適化アルゴリズムを構築した.
- 本手法による数値解析例を示し, 方法論の妥当性を検討した. スライダの角度, ストローク曲線の振幅, 位相の異なる目標軌道に対して, 自由度が適切な値をもつスライダ-クランク機構を最適化により得られることが確認できた.

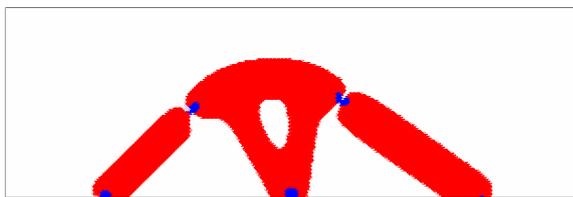
本研究では, モデルの線形性の仮定を行ったため, 得られるスライダのストローク曲線は正弦曲線に限定されたが, 今後



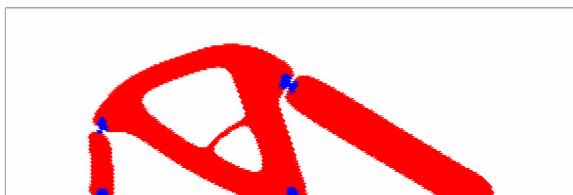
(a) Case 1.



(b) Case 2.



(c) Case 3.



(d) Case 4.

Fig. 6 Optimal distribution.

非線形解析に基づき最適化を行うことでより複雑なストローク曲線を出力する機構を設計できると期待できる。また、本研究では1つの固定ノード、1つのスライダという問題設定に対し数値解析例を示したが、ロス機構のような複数のスライダを持つ機構に対する最適化問題への拡張も考えられる。なお、本研究で得られた最適構造におけるリンク材料は古典弾性体とは異なる変形特性を持つマイクロポーラ弾性体材料であるため、実際の設計で用いた場合の挙動の変化について今後更なる研究が必要であると考えられる。

## 7. 謝辞

本研究の一部は、JST 創発的研究支援事業 (JPMJFR202J) の支援を受けました。

## 参考文献

(1) Moteki, K., Aoyama, S., Ushijima, K., Hiyoshi, R., Takemura, S., Fujimoto, H., and Arai, T.: A study of a variable compression ratio system with a multi-

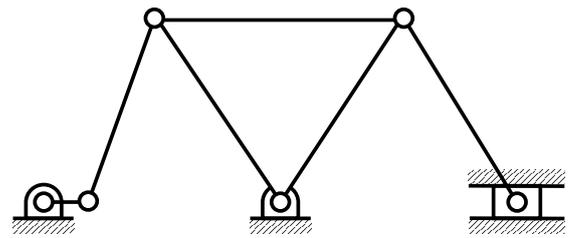


Fig. 7 Kinematic diagram of optimal distribution for Cases 1-4.

link mechanism, SAE Technical Paper, **2003-01-0921**(2003)

(2) Hsieh, W. H., and Tsai, C. H.: On a novel press system with six links for precision deep drawing, *Mechanism and Machine Theory*, **46.2**(2011), pp. 239-252.

(3) 小松原 英範, 栗林 定友: 新しい可変圧縮比エンジン機構の研究・開発 (第1報, 可変圧縮比エンジン機構の基本特性および設計), *日本機械学会論文集*, **84.860**(2018), 17-00372.

(4) Kang, S. W., and Kim, Y. Y.: Unified topology and joint types optimization of general planar linkage mechanisms, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **57.5**(2018), pp. 1955-1983.

(5) Vanpaemel, S., Asrih, K., Vermaut, M., and Naets, F.: Topology optimization for dynamic flexible multibody systems using the Flexible Natural Coordinates Formulation, *Mechanism and Machine Theory*, **185**(2023), 105344.

(6) 小夜 結利花, 山田 崇恭: トポロジー最適化とマイクロポーラ弾性体の考え方に基づくリンク機構の構想設計法, *日本機械学会論文集*, DOI: <https://doi.org/10.1299/transjsme.23-00082>

(7) Eringen, A. C.: Linear theory of micropolar elasticity, *Journal of Mathematics and Mechanics*, **15.6**(1966), pp. 909-923.

(8) Gauthier, R.D., and Jahsman, W.E.: A quest for micropolar elastic constants, *Journal of Applied Mechanics*, **2.2**(1975), pp. 369-374.

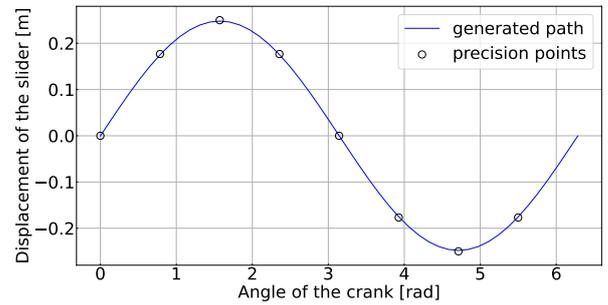
(9) Lakes, R.: Experimental methods for study of Cosserat elastic solids and other generalized elastic continua, In: Mühlhaus, H. (ed.) *Continuum models for materials with microstructure*, (1995), Wiley, New York, Ch.1, pp. 1-25.

(10) Pederson, C. B. W., Buhl, T., and Sigmund, O.: Topology synthesis of large-displacement compliant mechanisms, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **50.12**(2001), pp. 2683-2705.

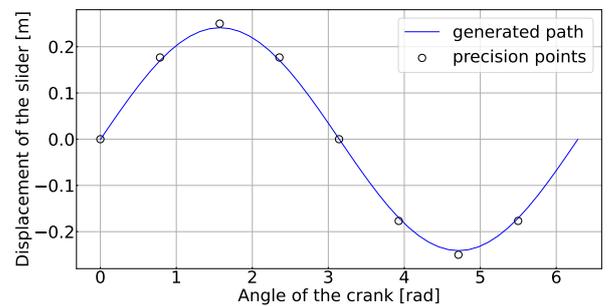
(11) Nam, S. J., Jang, G. W., and Kim, Y. Y.: The Spring-Connected Rigid Block Model Based Automatic Synthesis of Planar Linkage Mechanisms: Numerical

Issues and Remedies, *Journal of Mechanical Design*, **134.5**(2012), 051002.

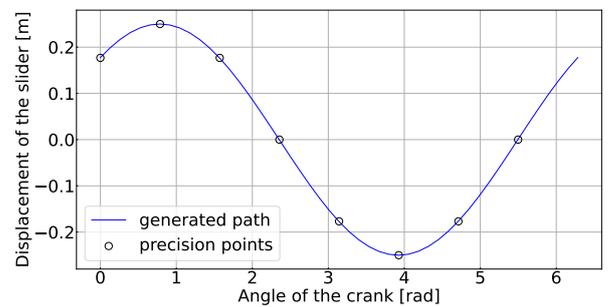
- (12) Bendøse, M. P., and Sigmund, O.: Material interpolation schemes in topology optimization, *Archive of Applied Mechanics*, **69**(1999), pp. 635–654.
- (13) Svanberg, K.: The method of moving asymptotes—a new method for structural optimization, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **24.2**(1987), pp. 359–373.
- (14) Lazarov, B. S., and Sigmund, O.: Filters in topology optimization based on Helmholtz-type differential equations, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **86.6**(2011), pp. 765–781.
- (15) Hecht, F.: New development in freefem++, *Journal of Numerical Mathematics*, **20.3–4**(2012), pp. 251–265.



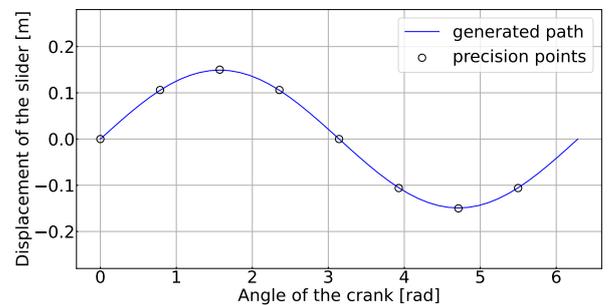
(a) Case 1.



(b) Case 2.



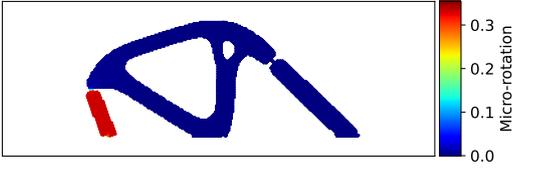
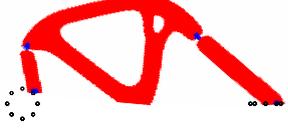
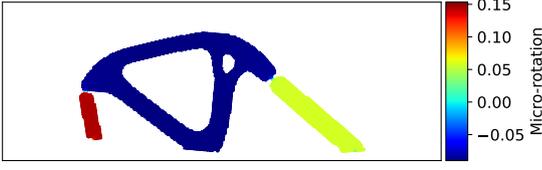
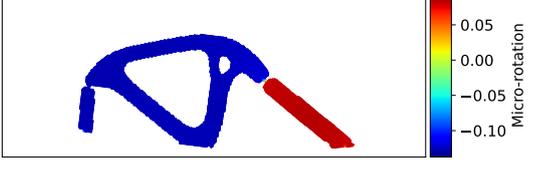
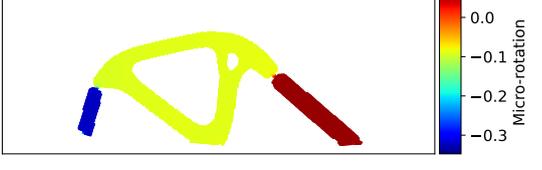
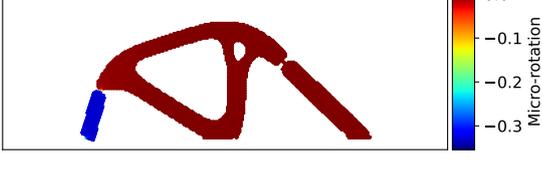
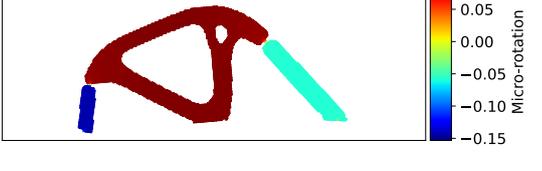
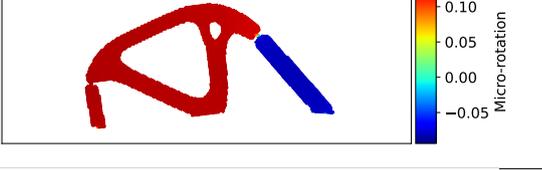
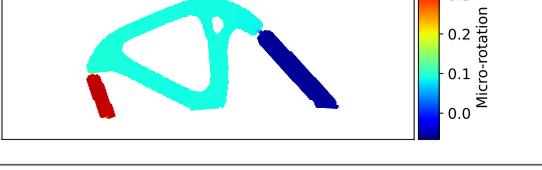
(c) Case 3.



(d) Case 4.

Fig. 8 Stroke curve of slider with optimal structure.

Table 2 Deformation and distribution of micro-rotation in Case 1.

Time	Deformation	Ditribution of micro-rotation
$t = 0$		
$t = 1$		
$t = 2$		
$t = 3$		
$t = 4$		
$t = 5$		
$t = 6$		
$t = 7$		

# 初期たわみと軸力変動が非線形 Winkler 基礎上はりの 座屈特性に及ぼす影響

## INFLUENCE OF IMPERFECTIONS ON BUCKLING SOLUTIONS OF AN INFINITE BEAM RESTING ON A NONLINEAR WINKLER FOUNDATION

阿部 和久<sup>1)</sup>, 浜崎 颯汰<sup>2)</sup>

Kazuhisa ABE and Sota HAMAZAKI

1) 新潟大学工学部 (〒 950-2181 新潟市西区五十嵐 2 の町 8050 番地, E-mail:abe@eng.niigata-u.ac.jp)

2) 新潟大学工学部 (〒 950-2181 新潟市西区五十嵐 2 の町 8050 番地, E-mail:t20a093h@mail.cc.niigata-u.ac.jp)

Buckling of an infinite Bernoulli-Euler beam resting on an elastic Winkler foundation characterized by a cubic nonlinearity is studied. Especially, theoretical formulae of the buckling load are derived based on the perturbation method for a beam with initial deflection and variable axial load. First, the snap-through buckling load is obtained for space-harmonic imperfections in both the initial deflection and the axial load. Next, the initial deflection and axial load fluctuation given by stationary random functions are considered. Expectation of the buckling load is described as a function of variance and power spectrum density of these uncertainties. Through buckling analyses, the theoretical buckling load is compared with numerical results. It is shown that the derived solutions can be a good approximation to the present problem.

**Key Words:** perturbation analysis, variable axial load, space-harmonic imperfection, stochastic uncertainty

### 1. はじめに

鉄道のロングレール軌道を管理する際に、座屈の確実な防止が重要となる<sup>(1)</sup>。近年では、左右レールとまくらぎ、およびそれを支持するバラスト道床を模擬した非線形バネから構成される精緻な数値軌道モデル<sup>(2, 3)</sup>を用いて高精度に座屈挙動を評価可能となっており、軌道の初期たわみ(通り変位)や、バラストからまくらぎに作用する拘束力(道床横抵抗力)が座屈強度に及ぼす影響などが数値解析を通して詳細に検討されている。

一方、軌道構造における各種パラメータが座屈強度に及ぼす影響に関する理論的理解は、必ずしも十分に進んではいない。一般に、軌道座屈波形の代表波長はまくらぎ間隔の約 10 倍程度であるため、基本的座屈特性の把握には連続支持ばりの様な比較的簡易な数理モデルの適用が可能である<sup>(4)</sup>。当該モデルの座屈・共振問題に対する高精度・高効率な数値解法がこれまでに多く提案されてきた<sup>(5-10)</sup>が、それらの多くは計算精度や計算効率が議論の中心であり、現象の把握にまでは及んでいない。

道床横抵抗力は軟化型の非線形特性を有するが、この様な支持構造下における座屈では、荷重低下を伴う分岐座屈後のつり合い経路上でたわみの局所化が進行する<sup>(4)</sup>。非線形 Winkler 基礎上の無限長ばりを対象とした座屈の局所化過程に関する研究の多くでは摂動解析が採用されており<sup>(11-14)</sup>、後座屈域のつり合い経路と座屈波形とが適切に評価可能となっている。なお、これらの研究では長手方向に均一な構造を対象としており、その下で支持剛性やはりの曲げモーメント-曲率関係などにおける非線形性が変形の局所化に及ぼす影響を検討している。

構造の不均一性を考慮した座屈挙動の検討は、主に有限長構造を対象に行われている。Pierre<sup>(15)</sup>は、2 径間連続支持された柱を対象に、中間に置かれた回転バネの位置の僅かなずれや剛性が局部座屈モードに及ぼす影響について議論している。また、Winkler 基礎の低剛性域の存在が座屈モードの空間分布特性に及ぼす影響については、幾つかの研究事例が報告されている<sup>(16, 17, 18)</sup>。

一方、軸力の空間変動が座屈挙動に及ぼす影響についての検討は少ない。ロングレール軌道の場合、日陰区間の存在などに起因したレールの不均等な移動(ふく進)により軸力変

動が発生する<sup>(19, 20)</sup>。レール軸力の変動は軌道の座屈挙動に大きく影響する<sup>(21)</sup>ため、軸力の空間変動が座屈挙動に及ぼす影響の把握は重要である。Luongo<sup>(22)</sup>は Winkler 基礎上の有限長のはりを対象に、作用する軸力がスパン長程度の波長で変動する場合の座屈・共振問題を扱い、一般化摂動法採用の下に局所モードを導出している。しかし、ロングレール軌道の様にはりの全長に比べて短い波長の軸力変動が座屈挙動に及ぼす影響については検討事例が無い。

構造に内在する不確実性が座屈強度に及ぼす影響についての検討も幾つかなされている。Amazigo ら<sup>(23)</sup>は、軟化型の非線形支持剛性を有する Winkler 基礎上の無限長ばりを対象に、初期たわみ存在下での飛び移り座屈の評価を摂動法に基づき行っている。定常ランダムな初期たわみについても扱われており、飛び移り座屈強度と初期たわみの標準偏差やパワースペクトル密度 (PSD) などの関係式を導出している。Simão ら<sup>(24)</sup>は、有限長柱の座屈問題を対象に、初期たわみや軸回転角などにおける不確実性について、簡単な例に基づき議論している。Abramian ら<sup>(25)</sup>は、有限長 Winkler ばりを対象に、支持剛性の変動が任意関数で与えられる場合における分岐座屈や共振周波数などを摂動法に基づき求めている。また、例題の一つとして、支持剛性が sine 波形状に変動する場合の座屈問題を扱っている。

ロングレールの初期通り変位や道床横抵抗力、レール軸力は、一般にランダムな分布性状を有する。阿部ら<sup>(26)</sup>は、これらの不確実性を考慮した軌道の座屈発生確率の評価を試みている。なお、既往の研究から、道床横抵抗力の非線形性の存在によって軌道の座屈形態が不安定対称分岐座屈で与えられることや、初期通り変位波形を分岐座屈モードで与えた場合、飛び移り座屈強度低下が初期不整振幅に対し鋭敏性を有することなどがわかっている<sup>(2, 23)</sup>。しかし、道床横抵抗力やレール軸力の変動が座屈強度に及ぼす影響については、数値解析結果に基づいた議論<sup>(26)</sup>にとどまり、その背景となる理論的検討は未だ十分になされていない。特に軸力変動と座屈強度との関係については、その分布性状に関する情報が不十分なこともあり、数値解析事例も少ない。また、これらの不確実性が座屈強度にどの様に影響するのかについても、理論的には未解明なままとなっている。

そこで本論文では、軟化型非線形剛性を有する Winkler 基礎上に置かれた無限長 Euler ばりを対象に、初期たわみと軸力変動とが飛び移り座屈挙動に及ぼす影響について、理論的検討を試みる。その際に、文献<sup>(23)</sup>の手法を参考に、摂動法に基づいて飛び移り座屈軸力の近似評価式を導出する。具体的には、まず初期たわみが完全系の分岐座屈モード波形で与えられる場合を対象に、たわみ振幅や軸力変動振幅およびその波長が座屈軸力に及ぼす影響を明らかにする。続いて、初期たわみと軸力変動が定常ランダムな波形で与えられる場合を扱い、座屈軸力とそれらの標準偏差や PSD 特性などとの関係式を導出する。最後に、数値解析を通して導出した摂動解の妥当性について確認する。

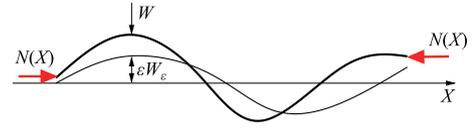


Fig. 1 Initial imperfection and deflection of a beam under axial compression

## 2. 対象とする問題

### 2.1. つり合い式

支持剛性が 3 次関数で与えられた軟化型非線形弾性を有する Winkler 基礎<sup>(11, 23)</sup>上に置かれた無限長 Euler ばりを考える。軸力が空間変動する場合のはりのつり合い式は次式で与えられる。

$$EI \frac{d^4 W}{dX^4} + \frac{d}{dX} \left\{ N(X) \frac{d}{dX} [W(X) + \varepsilon W_\varepsilon(X)] \right\} + k_1 W(X) - k_3 W^3(X) = 0 \quad (1)$$

ここで、Fig.1 に示す様に  $X$  ははり長手方向座標、 $W$  は水平面内たわみ、 $W_\varepsilon$  は初期たわみ波形を与える関数、 $\varepsilon$  はその振幅パラメータ、 $EI$  ははりの曲げ剛性、 $k_1$ 、 $k_3$  は Winkler 基礎の剛性に関する係数である。また、 $N$  ははりに作用する圧縮軸力である。

式 (1) の軸力  $N$  を、次式の様に一定成分と変動成分とに分けて表記する。

$$N(X) = N_0(\nu + \mu g(X)), \quad N_0 = 2\sqrt{k_1 EI} \quad (2)$$

ここで、 $N_0$  は軸力変動の無い完全系の分岐座屈軸力、 $\nu$  は軸力パラメータ、 $g(X)$  は軸力変動成分を与える関数、 $\mu$  はその振幅パラメータである。なお、軸力変動成分は平均値がゼロであり、載荷過程で不変とする。

式 (2) を式 (1) に代入し、さらに以下の様な変数変換を導入する。

$$x = \left( \frac{k_1}{EI} \right)^{1/4} X, \quad w = \sqrt{\frac{k_3}{k_1}} W, \quad w_\varepsilon = \sqrt{\frac{k_3}{k_1}} W_\varepsilon \quad (3)$$

すると次の無次元化されたつり合い方程式を得る。

$$w^{(4)} + 2 \left\{ (\nu + \mu g) w' \right\}' + w - w^3 = -2 \left\{ (\nu + \mu g) \varepsilon w_\varepsilon' \right\}' \approx -2\nu \varepsilon w_\varepsilon'' \quad (4)$$

ここで、 $(\cdot)' = d(\cdot)/dx$ 、 $(\cdot)^{(4)} = d^4(\cdot)/dx^4$  である。また、軸力変動成分と初期たわみ振幅に関する各パラメータ  $\mu$ 、 $\varepsilon$  は微小量とし、右辺における  $\mu \varepsilon$  を含む項は無視した。

### 2.2. 一定軸力の場合の分岐座屈モード

軸力一定 ( $\mu=0$ ) で、且つ初期たわみが無い ( $\varepsilon=0$ ) 完全系の分岐座屈に関する方程式は次式で与えられる。

$$L(w) = 0, \quad L(\cdot) := (\cdot)^{(4)} + 2\nu(\cdot)'' + (\cdot) \quad (5)$$

ここで、 $L(\cdot)$  は式 (5) 第 2 式で定義された微分作用素である。式 (5) において  $w = e^{ikx}$  ( $i^2 = -1$ ) と置くと、軸力パラメータ  $\nu$  と波数  $k$  について次の関係式を得る。

$$\nu = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{k^2} + k^2 \right) \quad (6)$$

式 (6) で  $\nu$  の最小値を与える分岐座屈軸力パラメータは  $\nu_{cr} = 1$  であり、それに対応する分岐座屈モードは波数  $k = 1$  の調和関数で与えられる。

### 3. 初期たわみと軸力が周期変動する場合

本節では、式 (4) の  $w_\varepsilon$  が分岐座屈モード  $\sin x$  で与えられる場合について考える。また軸力変動成分については、次式に示す波数  $\kappa$  の周期関数を対象とする。

$$g(x) = \cos \kappa x \quad (7)$$

式 (4) の解を次の摂動展開より求めるものとする。

$$\begin{aligned} w(x) &= \sum_{m=1}^{\infty} \delta^m w_m(x), & w_m(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} \mu^n w_{mn}(x), \\ \nu \varepsilon &= \sum_{m=1}^{\infty} \delta^m B_m, & B_m &= \sum_{n=0}^{\infty} \mu^n B_{mn}, \\ w_{10}(x) &= \sin x \end{aligned} \quad (8)$$

ここで、 $\delta$  は  $w$  の振幅に関するパラメータ、 $w_{mn}(x)$  と  $B_{mn}$  は以降で求める未知関数と未知係数である。その際に、 $\kappa = 2$  の場合と、それ以外とに分け、各々に対し摂動解を求める。

#### 3.1. $\kappa = 2$ の場合

$w_\varepsilon = \sin x$  の下、式 (7)、(8) を式 (4) に代入する。その結果を  $\delta^m$  ( $m = 1, 2, \dots$ ) の項毎にまとめると、 $\delta$  の項より次式を得る。

$$L(w_1) + 2\mu(\cos 2x \cdot w_1') = 2B_1 \sin x \quad (9)$$

$w_1, B_1$  を式 (8) に従い  $\mu$  についてさらに展開すると、 $\delta\mu^0$  に関する項より次の方程式を得る。

$$L(w_{10}) = 2B_{10} \sin x \quad (10)$$

式 (10) より、係数  $B_{10}$  は次式のとおり定まる。

$$B_{10} = 1 - \nu \quad (11)$$

また  $\delta\mu$  に関する項は次式で与えられる。

$$L(w_{11}) = (2B_{11} + 1) \sin x + 3 \sin 3x \quad (12)$$

式 (12) に対し  $w_{10}$  と他の  $w_{mn}$  との直交性を要求する<sup>(23)</sup> と、 $w_{11}$  と  $B_{11}$  が次式により求められる。

$$w_{11} = \frac{3}{2(41 - 9\nu)} \sin 3x, \quad B_{11} = -\frac{1}{2} \quad (13)$$

次に  $\delta^2$  の項について考える。当該項より次の方程式を得る。

$$L(w_2) + 2\mu(\cos 2x \cdot w_2') = 2B_2 \sin x \quad (14)$$

この式は基本的に式 (9) に等しい。よって、 $w_{20}$  は  $C \cdot w_{10}$  ( $C$  は定数) で与えられ、 $w_{10}$  との直交性より  $C = 0$  を得る。すると結局  $w_2(x) = 0, B_2 = 0$  となる。

続いて  $\delta^3$  の項について考える。 $\delta^3\mu^0$  に関する項より、次の方程式を得る。

$$L(w_{30}) = \left( 2B_{30} + \frac{3}{4} \right) \sin x - \frac{1}{4} \sin 3x \quad (15)$$

$w_{10}$  との直交条件の下、 $w_{30}, B_{30}$  が 3 次式のとおり求められる。

$$w_{30} = \frac{-1}{8(41 - 9\nu)} \sin 3x, \quad B_{30} = -\frac{3}{8} \quad (16)$$

また  $\delta^3\mu$  に関する項より次の方程式を得る。

$$\begin{aligned} L(w_{31}) &= \left( 2B_{31} + \frac{3}{41 - 9\nu} \right) \sin x \\ &+ \frac{3}{4(41 - 9\nu)} (-3 \sin 3x + 2 \sin 5x) \end{aligned} \quad (17)$$

$w_{10}$  との直交条件より次式を得る。

$$\begin{aligned} w_{31} &= -\frac{9}{256(41 - 9\nu)} \sin 3x + \frac{1}{384(41 - 9\nu)} \sin 5x, \\ B_{31} &= -\frac{3}{2(41 - 9\nu)} \end{aligned} \quad (18)$$

式 (11)、(13)、(16) および (18) より、 $\nu\varepsilon$  は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} \nu\varepsilon &= \delta \left( 1 - \frac{\mu}{2} - \nu \right) - \delta^3 \left\{ \frac{3}{8} + \frac{3\mu}{2(41 - 9\nu)} \right\} + \dots \\ &\approx \delta \left( 1 - \frac{\mu}{2} - \nu \right) - \frac{3}{8} \delta^3 \end{aligned} \quad (19)$$

式 (19) において、軸力パラメータ  $\nu$  を変位振幅パラメータ  $\delta$  の関数と見なし  $d\nu/d\delta = 0$  の条件を課すと、飛び移り座屈発生時の軸力パラメータ  $\tilde{\nu}$  と  $\delta$  との関係として次式を得る。

$$\delta = \frac{2\sqrt{2}}{3} \sqrt{1 - \frac{\mu}{2} - \tilde{\nu}} \quad (20)$$

式 (20) を (19) に代入して  $\delta$  を消去すると次式を得る。

$$\tilde{\nu}\varepsilon = \frac{4\sqrt{2}}{9} \left( 1 - \frac{\mu}{2} - \tilde{\nu} \right)^{3/2} \quad (21)$$

これを  $\tilde{\nu}$  について解くと、次の近似式を得る。

$$\begin{aligned} \tilde{\nu} &\approx 1 - \frac{\mu}{2} - \left\{ \frac{9}{4\sqrt{2}} \left( 1 - \frac{\mu}{2} \right) \varepsilon \right\}^{2/3} \\ &\approx 1 - \frac{\mu}{2} - \left( \frac{9\varepsilon}{4\sqrt{2}} \right)^{2/3} \end{aligned} \quad (22)$$

式 (22) において  $\varepsilon = 0$  とおくと分岐座屈軸力を得るが、それが軸力変動振幅  $\mu$  に比例して低下することがわかる。また、初期たわみの存在により座屈形態は飛び移り座屈に移行することとなるが、その際の座屈軸力低下は  $\varepsilon^{2/3}$  に比例しており、僅かな初期たわみの存在により座屈強度が急減少するいわゆる初期不整鋭敏性を有することが確認できる。当該の初期不整鋭敏性については文献 (23, 27) で示されている。

なお、本論文では式 (1) に示した様な 3 次の非線形性を対象とした。一方、我国では道床横抵抗力に対し次の近似式<sup>(28)</sup> が提案されている。

$$f = f_0 \frac{w}{a + |w|} \quad (23)$$

ここで、 $f$  は道床横抵抗力、 $f_0$  はその終局値 (最終道床横抵抗力)、 $a$  は正の定数である。式 (23) の  $f$  はたわみ  $w$  に関し

て奇関数で与えられるが、これは  $w = 0$  の近傍で次式の様に近似できる。

$$f \approx \frac{f_0}{a} \left( w - \frac{1}{a} w|w| \right) \quad (24)$$

式 (24) の様に、非線形項が  $w|w|$  で与えられる場合、初期不整鋭敏性は  $\varepsilon^{1/2}$  で与えられる (2)。

### 3.2. $\kappa \neq 2$ の場合

$\delta\mu^0$  の項より、 $\kappa = 2$  の場合と同じく式 (11) を得る。また、 $\delta\mu$  の項より、次の方程式を得る。

$$L(w_{11}) = 2B_{11} \sin x + (\kappa - 1) \sin(\kappa - 1)x + (\kappa + 1) \sin(\kappa + 1)x \quad (25)$$

$\kappa \neq 2$  の場合、式 (25) 右辺で  $\sin x$  に関する項は第 1 項目のみとなる。したがって、 $w_{11}$  と  $w_{10} = \sin x$  との直交性から  $B_{11} = 0$  を得る。また、 $w_{11}$  は次式で与えられる。

$$w_{11} = \frac{\kappa - 1}{Z(\kappa - 1)} \sin(\kappa - 1)x + \frac{\kappa + 1}{Z(\kappa + 1)} \sin(\kappa + 1)x, \quad (26)$$

$$Z(\kappa) := (\kappa^2 - 1)^2$$

$\delta\mu^2$  の項より、次の方程式を得る。

$$L(w_{12}) = \left\{ 2B_{12} + \frac{(\kappa - 1)^2}{Z(\kappa - 1)} + \frac{(\kappa + 1)^2}{Z(\kappa + 1)} \right\} \sin x$$

$$+ \frac{(2\kappa - 1)(\kappa - 1)^2}{Z(\kappa - 1)} \sin(2\kappa - 1)x \quad (27)$$

$$+ \frac{(2\kappa + 1)(\kappa + 1)^2}{Z(\kappa + 1)} \sin(2\kappa + 1)x$$

式 (27) を解くと、 $w_{12}$ 、 $B_{12}$  は次式で与えられる。

$$w_{12} = \frac{(2\kappa - 1)(\kappa - 1)^2}{Z(\kappa - 1)Z(2\kappa - 1)} \sin(2\kappa - 1)x$$

$$+ \frac{(2\kappa + 1)(\kappa + 1)^2}{Z(\kappa + 1)Z(2\kappa + 1)} \sin(2\kappa + 1)x, \quad (28)$$

$$B_{12} = -\frac{(\kappa - 1)^2}{2Z(\kappa - 1)} - \frac{(\kappa + 1)^2}{2Z(\kappa + 1)}$$

$\delta^2$  に関する項については、 $\kappa = 2$  の場合と同様にゼロとなる。また、 $\delta^3\mu^0$  の項に関する方程式についても式 (15) に一致し、 $w_{30}$ 、 $B_{30}$  は式 (16) で与えられる。

すると、 $\nu\varepsilon$  の近似式は次式により与えられる。

$$\nu\varepsilon \approx \delta \left\{ 1 - \frac{\mu^2}{2} \left[ \frac{(\kappa - 1)^2}{Z(\kappa - 1)} + \frac{(\kappa + 1)^2}{Z(\kappa + 1)} \right] - \nu \right\} - \frac{3}{8} \delta^3 \quad (29)$$

式 (29) より、**3.1** と同様にして飛び移り座屈軸力の近似式を求めると次式を得る。

$$\tilde{v} \approx 1 - \frac{\mu^2}{2} \left\{ \frac{(\kappa - 1)^2}{[(\kappa - 1)^2 - 1]^2} + \frac{(\kappa + 1)^2}{[(\kappa + 1)^2 - 1]^2} \right\} - \left( \frac{9\varepsilon}{4\sqrt{2}} \right)^{2/3} \quad (30)$$

式 (30) より、 $\kappa \neq 2$  の場合の分岐座屈軸力は  $\mu^2$  に比例して低下することがわかる。なお、式 (30) で  $\kappa \rightarrow 2$  とすると、 $\tilde{v}$  は  $-\infty$  を与え、式 (22) を与え得ない。よって、当該式は  $\kappa = 2$  の近傍では適切な近似を与えないものと考えられる。また、右辺 3 項目の初期たわみに対する鋭敏性は式 (22) に一致しており、その効果は軸力変動と独立である。

## 4. 初期たわみと軸力変動とが定常ランダムな場合

### 4.1. たわみの積分方程式

まず、式 (4) におけるたわみの 3 次の項  $w^3$  に対し等価線形化を施し  $\tau^2 w$  と近似する (23)。ここで  $\tau$  は定数であり、その最適値については後程決定する。また、 $w_\varepsilon$  と  $g$  は互いに無相関且つ定常ランダムな波形で与えられ、次式をみたすものとする。

$$E_g(g) = 0, \quad E_g(g^2) = 1, \quad (31)$$

$$E_\varepsilon(w_\varepsilon) = 0, \quad E_\varepsilon(w_\varepsilon^2) = 1$$

ここで、 $E_g(\cdot)$  と  $E_\varepsilon(\cdot)$  は、それぞれ  $g$  と  $w_\varepsilon$  に関する数学的期待値のことである。

式 (4) における  $\mu$  と  $\varepsilon$  を各ランダム波形の標準偏差  $\sigma_g$  と  $\sigma_\varepsilon$  に置き換え、軸力パラメータを  $\nu = 1 - \Delta^2/2$  ( $\Delta \ll 1$ ) と表すと、つり合い式は次の方程式で与えられる。

$$w^{(4)} + (2 - \Delta^2)w'' + 2\sigma_g(g \cdot w')' + (1 - \tau^2)w = -2\nu\sigma_\varepsilon w_\varepsilon'' \quad (32)$$

文献 (23) では軸力変動が考慮されておらず、定常ランダムな成分とたわみ  $w$  との積がつり合い式中に現れない。そのため、つり合い式を直接 Fourier 変換して  $w$  の Fourier 変換を求め、 $w$  の PSD を介してその標準偏差  $\sigma_w$  を評価している。一方、式 (32) の解  $w$  の場合は、 $g$  との積が含まれているため、同様の手続きを採ることができない。そこで、次の積分方程式を介して  $w$  を表現することとする。

$$w(x) = -2\nu\sigma_\varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} w^*(x, \xi) w_\varepsilon''(\xi) d\xi$$

$$- 2\sigma_g \int_{-\infty}^{\infty} w^*(x, \xi) (g(\xi) w'(\xi))' d\xi \quad (33)$$

ここで、 $(\cdot)' = d(\cdot)/d\xi$  であり、 $w^*$  は次式をみたす基本解である。

$$\frac{d^4 w^*}{d\xi^4} + (2 - \Delta^2) \frac{d^2 w^*}{d\xi^2} + (1 - \tau^2) w^* = \delta(\xi - x) \quad (34)$$

なお、 $\delta(\xi - x)$  はデルタ関数である。

### 4.2. たわみの漸近展開

$w(x)$  を  $\sigma_g$  に関して次の様に漸近展開する。

$$w(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \sigma_g^m w_m(x) \quad (35)$$

式 (35) を式 (33) に代入し  $\sigma_g^m$  ( $m = 0, 1, \dots$ ) 毎にまとめると、 $\sigma_g^0$  と  $\sigma_g$  の項よりそれぞれ次式を得る。

$$w_0(x) = -2\nu\sigma_\varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} w^*(x, \xi) w_\varepsilon''(\xi) d\xi, \quad (36)$$

$$w_1(x) = 2 \int_{-\infty}^{\infty} w^*(x, \xi) g(\xi) w_0'(\xi) d\xi$$

式 (35)、(36) より、 $w(x)$  の近似式が次式により与えられる。

$$w(x) \approx -2\nu\sigma_\varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} w^*(x, \xi) w_\varepsilon''(\xi) d\xi$$

$$- 4\nu\sigma_\varepsilon \sigma_g \int_{-\infty}^{\infty} w_g^*(x, \xi) w_\varepsilon''(\xi) d\xi, \quad (37)$$

$$w_g^*(x, \xi) := \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial w^*}{\partial \zeta}(x, \zeta) \frac{\partial w^*}{\partial \zeta}(\zeta, \xi) g(\zeta) d\zeta$$

### 4.3. たわみの PSD の導出

式 (37) の積分区間を  $(-\ell, \ell)$  に設定して求めた関数を次の  $w_\ell$  で定義する.

$$w_\ell(x) := -2\nu\sigma_\varepsilon \int_{-\ell}^{\ell} w^*(x, \xi) w''_\varepsilon(\xi) d\xi - 4\nu\sigma_\varepsilon\sigma_g \int_{-\ell}^{\ell} \hat{w}_g^*(x, \xi) w''_\varepsilon(\xi) d\xi \quad (38)$$

$w_\ell$  の Fourier 変換  $\hat{w}_\ell$  は次式で与えられる.

$$\hat{w}_\ell(k) = -2\nu\sigma_\varepsilon \int_{-\ell}^{\ell} \hat{w}^*(k, \xi) w''_\varepsilon(\xi) d\xi - 4\nu\sigma_\varepsilon\sigma_g \int_{-\ell}^{\ell} \hat{w}_g^*(k, \xi) w''_\varepsilon(\xi) d\xi \quad (39)$$

なお,  $\hat{w}_g^*$  は次式により表すことができる.

$$\hat{w}_g^*(k, \xi) = \frac{-ik}{A(k)} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik\zeta} g(\zeta) \frac{\partial w^*}{\partial \zeta}(\zeta, \xi) d\zeta, \quad (40)$$

$$A(k) := k^4 - (2 - \Delta^2)k^2 + (1 - \tau^2)$$

$w$  の PSD を  $S_w$  と置くと, それは次式より求めることができる.

$$S_w(k) = \lim_{\ell \rightarrow \infty} \frac{1}{2\ell} E_g(|\hat{w}_\ell(k)|^2) \quad (41)$$

また, 式 (39) 右辺第 1 項目の積分は,  $\ell \rightarrow \infty$  の極限において次式で与えられる.

$$\lim_{\ell \rightarrow \infty} \int_{-\ell}^{\ell} \hat{w}^*(k, \xi) w''_\varepsilon(\xi) d\xi = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ik\xi}}{A(k)} w''_\varepsilon(\xi) d\xi = \frac{-k^2}{A(k)} \lim_{\ell \rightarrow \infty} \hat{w}_{\ell\varepsilon}(k), \quad (42)$$

$$\hat{w}_{\ell\varepsilon}(k) := \int_{-\ell}^{\ell} w_\varepsilon(\xi) e^{-ik\xi} d\xi$$

すると, 式 (39) より  $|\hat{w}_\ell|^2$  の  $g$  に関する期待値は次式によって求められる.

$$E_g(|\hat{w}_\ell|^2) = 4\nu^2\sigma_\varepsilon^2 \frac{k^4}{A^2(k)} |\hat{w}_{\ell\varepsilon}(k)|^2 + 16\nu^2\sigma_\varepsilon^2\sigma_g^2 \iint_{-\ell}^{\ell} E_g(\hat{w}_g^*(k, \xi) \hat{w}_g^*(k, x)) w''_\varepsilon(\xi) w''_\varepsilon(x) d\xi dx \quad (43)$$

ここで,  $(\bar{\cdot})$  は複素共役である.

式 (43) において,  $E_g(\hat{w}_g^* \hat{w}_g^*)$  の項は次の様に表記することができる.

$$E_g(\hat{w}_g^*(k, \xi) \hat{w}_g^*(k, x)) = \iint_{-\infty}^{\infty} \frac{k^2}{A^2(k)} e^{-ik(\zeta-\eta)} \frac{\partial w^*}{\partial \zeta}(\zeta, \xi) \frac{\partial w^*}{\partial \eta}(\eta, x) \times E_g(g(\zeta)g(\eta)) d\zeta d\eta \quad (44)$$

ここで,  $E_g(g(\zeta)g(\eta))$  は  $g(x)$  の自己相関関数  $R_g(\zeta - \eta)$  を与える. また  $w^*$  は,  $\hat{w}^*$  の逆 Fourier 変換により次式の様に表すことができる.

$$w^*(x, \xi) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ik(x-\xi)}}{A(k)} dk \quad (45)$$

これらの関係を式 (44) に代入すると, 多少の計算の後, 次式を得る.

$$E_g(\hat{w}_g^*(k, \xi) \hat{w}_g^*(k, x)) = \frac{k^2}{2\pi A^2(k)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\kappa^2}{A^2(\kappa)} S_g(\kappa - k) e^{i\kappa(x-\xi)} d\kappa \quad (46)$$

ここで,  $S_g$  は  $g$  の PSD であり, 次式で与えられる.

$$S_g(k) = \int_{-\infty}^{\infty} R_g(x) e^{-ikx} dx \quad (47)$$

式 (46) を (43) に代入すると,  $E_g(|\hat{w}_\ell|^2)$  は次式により与えられる.

$$E_g(|\hat{w}_\ell|^2) = 4\nu^2\sigma_\varepsilon^2 \frac{k^4}{A^2(k)} |\hat{w}_{\ell\varepsilon}(k)|^2 + 16\nu^2\sigma_\varepsilon^2\sigma_g^2 \frac{k^2}{2\pi A^2(k)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\kappa^6}{A^2(\kappa)} S_g(\kappa - k) |\hat{w}_{\ell\varepsilon}(\kappa)|^2 d\kappa \quad (48)$$

すると式 (41) より, たわみの PSD が次式で与えられる.

$$S_w(k) = 4\nu^2\sigma_\varepsilon^2 \frac{k^4}{A^2(k)} S_\varepsilon(k) + 16\nu^2\sigma_\varepsilon^2\sigma_g^2 \frac{k^2}{2\pi A^2(k)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\kappa^6}{A^2(\kappa)} S_g(\kappa - k) S_\varepsilon(\kappa) d\kappa \quad (49)$$

ここで,  $S_\varepsilon$  は初期たわみ  $w_\varepsilon$  の PSD である.

### 4.4. たわみの分散の評価

たわみの分散  $\sigma_w^2$  を自己相関関数  $R_w$  を介して次式より求める.

$$\sigma_w^2 = R_w(0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} S_w(k) dk = \frac{4\nu^2\sigma_\varepsilon^2}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k^4}{A^2(k)} S_\varepsilon(k) dk + \frac{16\nu^2\sigma_\varepsilon^2\sigma_g^2}{(2\pi)^2} \iint_{-\infty}^{\infty} \frac{k^2}{A^2(k)} \frac{\kappa^6}{A^2(\kappa)} S_g(\kappa - k) S_\varepsilon(\kappa) d\kappa dk \quad (50)$$

式 (50) の具体的計算の前に  $\tau$  の値を求めておく. Winkler 基礎に蓄えられるひずみエネルギーの等価条件より,  $\tau$  の最適値を次の  $w$  に関する期待値で定めるものとする<sup>(23)</sup>.

$$E_w(w^4) = \tau^2 \sigma_w^2 \quad (51)$$

$w$  が分散  $\sigma_w^2$ , 期待値ゼロの正規分布で与えられるものと仮定すると,  $E_w(w^4) = 3\sigma_w^4$  を得る. したがって,  $\tau^2$  の最適値は次式で与えられる.

$$\tau^2 = 3\sigma_w^2 \quad (52)$$

式 (50) 右辺第 1 項目の積分を  $I_1$  と置くと, それは式 (40) の  $A(k)$  に式 (52) を代入することで次式により与えられる.

$$I_1 = 2 \int_0^{\infty} \frac{k^4 S_\varepsilon(k) dk}{\{(k^2 - 1)^2 + \Delta^2(k^2 - 1) + \Delta^2 - 3\sigma_w^2\}^2} \quad (53)$$

ここで,  $k^2 - 1 = s$  と置換すると, 次式を得る.

$$I_1 = \int_{-1}^{\infty} \frac{(s+1)^{3/2} S_\varepsilon(k(s)) ds}{\{s^2 + \Delta^2 s + \Delta^2 - 3\sigma_w^2\}^2} \approx \frac{1}{(\Delta^2 - 3\sigma_w^2)^2} \int_{-1}^{\infty} \frac{(s+1)^{3/2} S_\varepsilon(k(s)) ds}{\left(\frac{s^2}{\Delta^2 - 3\sigma_w^2} + 1\right)^2} \quad (54)$$

ここで、 $0 < \Delta^2 - 3\sigma_w^2 \ll 1$  と仮定すると、 $1/\{s^2/(\Delta^2 - 3\sigma_w^2) + 1\}^2$  は  $s = 0$  の近傍で急激に増大し、それ以外では非常に小さな値をとる。したがって、式 (54) の  $I_1$  はさらに次式により近似評価できる<sup>(23)</sup>。

$$I_1 \approx \frac{S_\varepsilon(1)}{(\Delta^2 - 3\sigma_w^2)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{ds}{\left(\frac{s^2}{\Delta^2 - 3\sigma_w^2} + 1\right)^2} \quad (55)$$

$$= \frac{\pi S_\varepsilon(1)}{2(\Delta^2 - 3\sigma_w^2)^{3/2}}$$

同様の手順で式 (50) 右辺第 2 項目の積分  $I_2$  を近似評価すると次式を得る。

$$I_2 \approx \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \frac{S_\varepsilon(1)}{2(\Delta^2 - 3\sigma_w^2)^3} [S_g(0) + S_g(2)] \quad (56)$$

式 (55), (56) を式 (50) に代入すると、 $\sigma_w^2$  の近似式を得る。

$$\sigma_w^2 \approx \sigma_\varepsilon^2 S_\varepsilon(1) \left\{ \frac{1}{(\Delta^2 - 3\sigma_w^2)^{3/2}} + \frac{\sigma_g^2 [S_g(0) + S_g(2)]}{2(\Delta^2 - 3\sigma_w^2)^3} \right\} \quad (57)$$

ここで、 $\nu^2 \approx 1$  とした。

#### 4.5. 飛び移り座屈軸力パラメータ $\tilde{\nu}$ の導出

式 (57) は次式の様に表すことができる。

$$\sigma_w^2 = \frac{\alpha}{y} + \frac{\alpha\beta}{y^2}, \quad (58)$$

$$y = \{2(1 - \nu) - 3\sigma_w^2\}^{3/2},$$

$$\alpha = \sigma_\varepsilon^2 S_\varepsilon(1), \quad \beta = \frac{1}{2} \sigma_g^2 [S_g(0) + S_g(2)]$$

なお、 $\Delta^2$  を  $2(1 - \nu)$  に戻した。式 (58) を  $y$  について解き  $\beta\sigma_w^2 \ll \alpha$  と仮定すると、次の近似式を得る。

$$y \approx \frac{\alpha}{\sigma_w^2} + \beta \quad (59)$$

以下の計算では、簡単のため  $\sigma_w^2 = p$  と置く。式 (58) 第 2 式と式 (59) より次の関係式を得る。

$$2(1 - \nu) = 3p + \left(\frac{\alpha}{p}\right)^{2/3} + \frac{2}{3}\beta \left(\frac{p}{\alpha}\right)^{1/3} \quad (60)$$

式 (60) を  $p$  で微分し、飛び移り座屈条件 ( $d\nu/dp = 0$ ) を課すと次式を得る。

$$3 - \frac{2}{3}\alpha^{2/3}p^{-5/3} + \frac{2}{9}\beta\alpha^{-1/3}p^{-2/3} = 0 \quad (61)$$

$p$  を次の様に  $\beta$  のべき級数展開で表すものとする。

$$p = p_0 + p_1\beta + \dots \quad (62)$$

ここで、 $p_n$  ( $n = 0, 1, \dots$ ) は展開係数である。式 (62) を (61) に代入し  $p_n$  を求めると、 $p$  に対して次の近似式を得る。

$$p \approx \left(\frac{2}{9}\right)^{3/5} \alpha^{2/5} - \frac{1}{5} \left(\frac{2}{9}\right)^{6/5} \alpha^{-1/5} \beta \quad (63)$$

式 (63) を (60) に代入して  $\nu$  について解くと、以下の飛び移り座屈軸力パラメータ  $\tilde{\nu}$  の近似式が得られる。

$$\tilde{\nu} \approx 1 - 5 \cdot 2^{-7/5} \cdot 3^{-1/5} \alpha^{2/5} - \frac{2}{5} \left(\frac{2}{9}\right) \alpha^{-1/5} \beta \quad (64)$$

$$\approx 1 - 1.52\alpha^{2/5} - 0.296\alpha^{-1/5}\beta$$

式 (58) のとおり、 $\alpha$  と  $\beta$  はそれぞれ  $\sigma_w^2$  と  $\sigma_g^2$  に比例する。よって、式 (64) で  $\beta = 0$  ( $\sigma_g = 0$ ) と置き軸力変動の無い状態に設定すると、座屈荷重は初期たわみの標準偏差  $\sigma_w$  の 4/5 乗に比例し、それに対して僅かな鋭敏性を有することがわかる。さらに  $\alpha$  は  $S_\varepsilon(1)$  に比例しており、座屈軸力低下において波数 1 の初期たわみが支配的となることを示唆している。

なお、ここでの定式過程では  $0 < \beta\sigma_w^2 \ll \alpha$  を前提としているため、 $\beta$  一定の下では  $\sigma_\varepsilon \rightarrow 0$  において右辺 3 項目が評価不能となる。それでも、一定の  $\sigma_\varepsilon$  の下で、座屈強度が軸力変動の分散  $\sigma_g^2$  に比例して低下することが理解できる。また、 $\beta$  は  $S_g(0) + S_g(2)$  にも比例するため、座屈荷重低下はそれに依存する。このことは、軸力変動に波数  $k = 0$  および  $k = 2$  (完全系における分岐座屈モードの 1/2 の波長) の成分が多く含まれる程、座屈荷重がより大きく低下することを示唆している。

#### 5. 分岐座屈軸力の周期変動軸力波長依存性に関する検証

本節以降では数値計算を通して、**3.**, **4.** で導出した座屈軸力評価式の妥当性について検討する。まず、初期たわみが無く、軸力が式 (7) にしたがって周期変動する場合の分岐座屈軸力について調べる。その際に、以下に示す無限長構造の固有値問題を数値的に解く。

##### 5.1. 固有値問題の導出

式 (4) を線形化 ( $w^3$  の項を無視) し、さらに  $\varepsilon = 0$  と置き、式 (7) を代入すると次式を得る。

$$L(w) + 2\mu(w' \cos \kappa x)' = 0 \quad (65)$$

式 (65) の様に  $w$  にかかる係数 (軸力) が周期変動する場合の解を次式で与える<sup>(29)</sup>。

$$w(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} w_n e^{iz_n x}, \quad z_n := n\kappa + \gamma \quad (66)$$

ここで、 $w_n$  は展開係数である。なお、 $0 \leq \gamma < \kappa$  とする。

式 (66) を (65) に代入すると、各  $n$  に対して次の方程式を得る。

$$(z_n^4 - 2\nu z_n^2 + 1)w_n - \mu z_n (z_{n-1}w_{n-1} + z_{n+1}w_{n+1}) = 0, \quad (n \in \mathbb{Z}) \quad (67)$$

この式は、所定の  $\mu$  と波数  $\kappa$  の下で、 $\gamma$  と  $\nu$  を変数に持つ。そこで、 $\gamma$  を上述の範囲内で走査し、各  $\gamma$  に対する最小固有値  $\nu(\gamma)$  を求めた。さらに  $\nu(\gamma)$  の最小値を  $\gamma$  について求め、これを分岐座屈軸力とした。なお、式 (67) は無限次元の固有値問題を与える。以下の解析では固有値の収束性を確認の上、展開項数を  $\pm 20$  項までで打ち切った。

##### 5.2. 解析結果

$\mu = 0.5$  と設定して、軸力の変動波数  $\kappa$  と分岐座屈軸力  $\nu_{cr}$  との関係を求めた結果を Fig.2 に示す。ちなみに、日陰に起因する軸力変動は当該問題の解析結果<sup>(20)</sup> より平均軸力の 25%程度と考えられ、ここでは他の変動要因も考慮してそれに比べて大きめの値に設定している。なお、Fig.2 には  $\varepsilon = 0$  の下で式 (22) ( $\kappa = 2$ ) と式 (30) ( $\kappa = 1$ ) より求めた  $\nu_{cr}$  の値

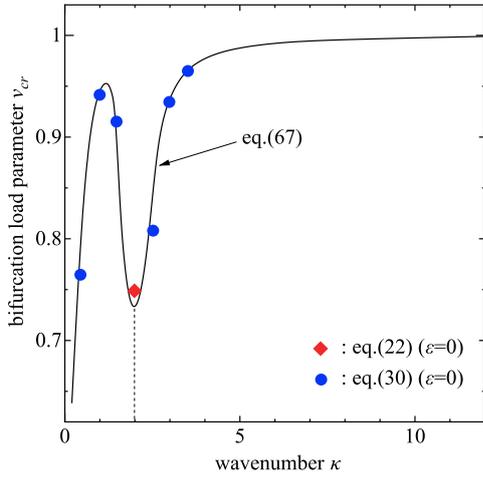


Fig. 2 Relationship between the wavenumber  $\kappa$  and the bifurcation load parameter ( $\mu = 0.5$ )

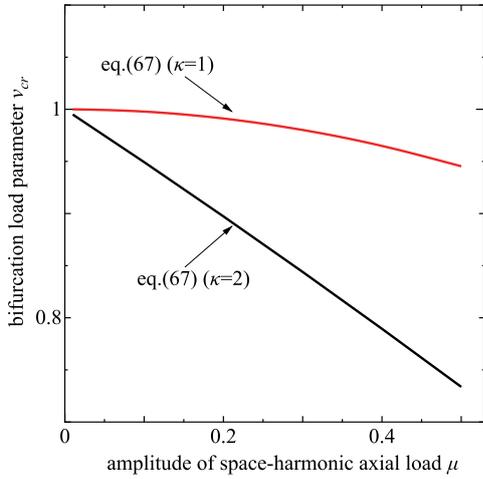


Fig. 3 Relationship between the amplitude of axial load and the bifurcation load parameter

を、 $\kappa = 0.5$  から  $3.5$  までの範囲で  $0.5$  間隔でプロットした。前述のとおり、 $\kappa = 2$  近傍で式 (30) の近似精度が低下するため、 $\kappa = 2.5$  において多少の差異が認められるものの、広い範囲で摂動解と数値解との良好な一致が認められ、摂動解の妥当性が確認できる。

$\kappa = 0$  の近傍で分岐座屈軸力が低下している。これは、変動波長が座屈モード波長に比べ十分に長い場合 (波数  $\kappa$  が十分に小さい場合)、軸力が平均値  $\nu_{cr}$  より高い区間において先行して座屈が発生するためである。

また、 $\kappa = 2$  前後の変動波数において座屈軸力が大きく低下している。式 (22) に示したとおり、 $\kappa = 2$  では座屈軸力パラメータ  $\nu_{cr}$  が  $\mu$  に比例して低下する。一方、 $\kappa \neq 2$  では式 (30) の様に  $\mu^2$  に比例する。そのため、比較的小さな  $\mu$  の下では  $\kappa = 2$  における軸力低下が他に比べ顕著になったと考えられる。そこで、 $\kappa = 1$  と  $\kappa = 2$  の場合を対象に、 $\mu$  と  $\nu_{cr}$  との関係を表 (67) の固有値問題より求めたものを Fig.3 に示す。この図より、 $\kappa = 2$  では  $\nu_{cr}$  の低下が  $\mu$  に対し線形的である一方、 $\kappa = 1$  の場合の低下は 2 次関数的であり、前者の

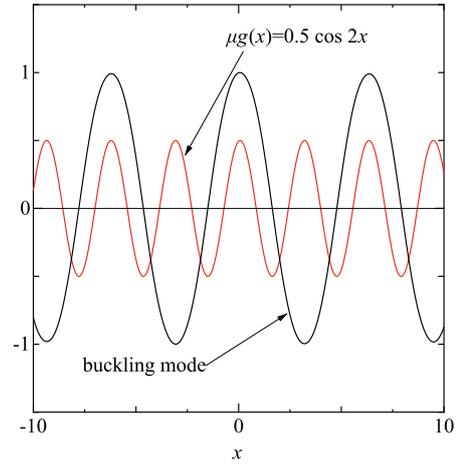


Fig. 4 Buckling mode and space-harmonic component of axial load

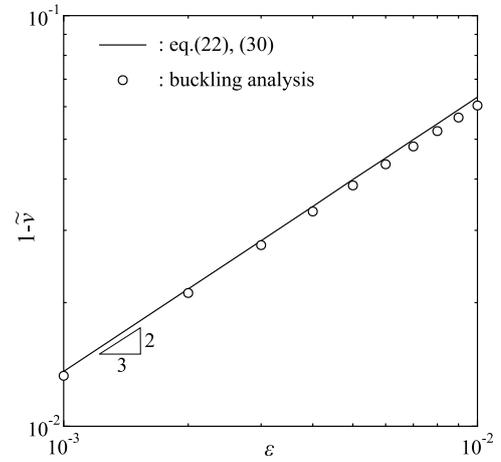


Fig. 5 Relationship between the amplitude of initial deflection  $\varepsilon$  and the buckling load reduction  $1 - \bar{\nu}$

低下量の方が大きいことが確認できる。なお、Fig.2 に示した結果は、4.5. で式 (64) に関連して述べた内容、すなわち軸力変動に波数  $k = 0$  および  $k = 2$  の成分が多く含まれる程、座屈軸力がより大きく低下することと符合している。

分岐座屈軸力が大幅に低下する  $\kappa = 2$  の場合の座屈モード (固有モード) と軸力変動成分  $\mu \cdot g(x) = 0.5 \cos 2x$  とを Fig.4 に示す。座屈モードは、軸力変動の無い完全系のものに近く波長  $2\pi$  (波数  $\kappa = 1$ ) の波形で与えられている。当該モードはスパン長  $\pi$  の両端ヒンジ Winkler ばりの座屈モードに相当する。Fig.4 中に赤線で示した変動軸力成分は、座屈モードのたわみが絶対最大となるスパン中央で最大値をとっており、当該箇所での軸力は  $\nu_{cr} + \mu$  で与えられる。そのため、比較的低い平均軸力  $\nu_{cr}$  の下で座屈を生じ、他の変動波数に比べその値が大きく低下したと解釈することができる。

## 6. Winkler ばりの空間変動が飛び移り座屈軸力に及ぼす影響に関する検証

### 6.1. 解析条件

初期たわみを伴う場合の飛び移り座屈軸力の評価・検証に

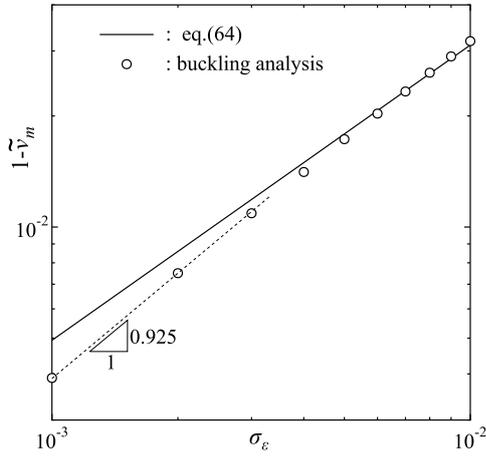


Fig. 6 Relationship between  $\sigma_\varepsilon$  and the mean value of buckling load reduction  $1 - \tilde{\nu}_m$

際し、つり合い式 (4) をはり要素により離散化した。その際に、完全系における分岐座屈モード波長が  $2\pi$  であるのに対し、はりの長さを 200 とし、それを 1000 要素で分割した。また、両端は固定条件とした。つり合い経路を弧長増分法<sup>(30)</sup>により求め、飛び移り座屈点を探索した。

### 6.2. 周期変動する初期たわみに対する飛び移り座屈軸力の鋭敏性

式 (22), (30) より、飛び移り座屈軸力の低下は初期たわみ振幅  $\varepsilon$  の  $2/3$  乗に比例するという結論を得た。このことを確認するため、軸力変動の無い条件 ( $\mu = 0$ ) の下、 $\varepsilon$  と座屈軸力パラメータの低下量  $1 - \tilde{\nu}$  との関係の数値解析より求めた。その結果を Fig. 5 に示す。なお、式 (22), (30) で  $\mu = 0$  として求めたものも実線で示した。両者の比較的良好一致が認められ、座屈軸力の初期たわみに対する鋭敏性も含め、理論式の妥当性が確認できる。

### 6.3. 定常ランダムな不確実性が飛び移り座屈軸力に及ぼす影響

初期たわみと軸力変動をランダムに設定して座屈解析を行った。その際に、初期たわみ  $w_\varepsilon$  と軸力変動波形  $g$  の自己相関関数  $R(x)$  と PSD  $S(k)$  とを次式で設定した。

$$R(x) = e^{-x/d}, \quad S(k) = \frac{2d}{1+k^2d^2} \quad (68)$$

ここで、 $d$  は相関長であり、以下の解析では初期たわみと軸力変動に対してそれぞれ  $d_\varepsilon = 3$  と  $d_g = 6$  と設定した。これらの値は座屈モード波長の  $1/2$  倍と  $1$  倍に概ね相当する。

ランダムな波形分布は次式により生成した。

$$\{\mathbf{v}\} = [\Phi][\Lambda^{1/2}]\{\boldsymbol{\xi}\} \quad (69)$$

ここで、 $\{\mathbf{v}\}$  は初期たわみの節点値ベクトル、または軸力変動成分の要素ベクトルである。また、 $\{\boldsymbol{\xi}\}$  は期待値ゼロ、標準偏差 1 の正規乱数ベクトル、 $[\Phi]$  と  $[\Lambda^{1/2}]$  は、それぞれ次の固有値問題における固有ベクトル  $\{\phi_i\}$  と固有値  $\lambda_i$  の  $1/2$  乗を縦ベクトルおよび対角成分に持つ行列である。

$$[\mathbf{C}]\{\phi_i\} = \lambda_i\{\phi_i\}, \quad c_{ij} = R(|x_i - x_j|) \quad (70)$$

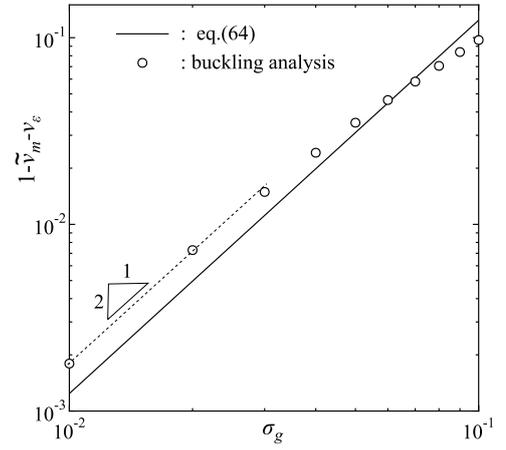


Fig. 7 Relationship between  $\sigma_g$  and the mean value of relative buckling load reduction  $1 - \tilde{\nu}_m - \nu_\varepsilon$

式 (69) に基づきランダムな初期たわみと軸力変動を 100 ケース生成し、飛び移り座屈軸力パラメータの平均値  $\tilde{\nu}_m$  を求めた。なお、式 (64) における  $\tilde{\nu}$  が、その導出過程において何を意味するものであるのかは必ずしも明確ではない。ここでは、それを期待値と解釈して数値解析結果と比較する。軸力変動の無い場合 ( $\sigma_g = 0$ ) における初期たわみの標準偏差  $\sigma_\varepsilon$  と  $1 - \tilde{\nu}_m$  との関係をも求めた結果を Fig. 6 に示す。また、合わせて式 (64) より求めた値も実線で示した。比較的小さい  $\sigma_\varepsilon$  において、数値解より求めた  $1 - \tilde{\nu}_m$  が  $\sigma_\varepsilon$  の  $0.925$  乗に比例しており、理論値である  $4/5=0.8$  乗より幾分か大きくなっている。それでも、 $\sigma_\varepsilon = 10^{-2}$  の付近では、数値解と理論式との比較的良好一致が認められ、式 (64) の妥当性が確認できる。

次に、 $\sigma_\varepsilon = 1 \times 10^{-2}$  に固定して、 $\sigma_g$  を適宜変えて同様の計算を行った。式 (64) で  $\nu_\varepsilon := 1.52\alpha^{2/5}$  とおくと、 $1 - \tilde{\nu}_m - \nu_\varepsilon$  は  $\sigma_\varepsilon$  一定の下で  $\sigma_g^2$  に比例する。そこで、 $1 - \tilde{\nu}_m - \nu_\varepsilon$  を縦軸にとり  $\sigma_g$  との関係をも求めた結果を Fig. 7 に示す。なお、式 (64) より求めた理論値も実線で表示した。前述のとおり、 $\beta\sigma_w^2 \ll \alpha$  を仮定しており、比較的小さい  $\sigma_\varepsilon$  での近似精度が低下するため値自体には多少の差異が認められるものの、比較的小さい  $\sigma_g$  における  $1 - \tilde{\nu}_m - \nu_\varepsilon$  が概ね  $\sigma_g^2$  に比例しており、この範囲において定性的な一致が確認できる。

以上より、初期たわみと軸力変動とがランダムな場合の飛び移り座屈軸力の期待値が、式 (64) により概ね評価可能であることがわかった。

## 7. おわりに

軟化型の非線形支持剛性を有する Winkler 基礎上に置かれた無限長 Euler ばりの座屈特性について検討した。特に、初期たわみと軸力変動とを伴う場合を対象に、摂動法に基づき座屈評価式を導出した。

まず、初期たわみ形状を完全系の分岐座屈モードに設定した場合について、調和関数で与えられた軸力変動に対する飛び移り座屈軸力を求めた。その結果、軸力変動波長が座屈モード波長の  $1/2$  倍となる場合に、分岐座屈軸力が大きく

低下することがわかった。次に、初期たわみと軸力変動とが定常ランダムな波形で与えられる場合について、それらの標準偏差や PSD と飛び移り座屈軸力(期待値)との関係式を求めた。

最後に、数値解析結果に基づき導出した理論式の妥当性について検証した。その結果、理論式が比較的良好な近似評価を与えることが確認できた。

#### 参考文献

- (1) 鉄道総合技術研究所 編: 鉄道構造物等設計標準・同解説 軌道構造, 11章 ロングレール, 丸善出版, 2012.
- (2) 阿部和久, 水野雄太, 紅露一寛: 通り変位波形におけるバラツキが軌道座屈強度の確率特性に及ぼす影響, 鉄道工学シンポジウム論文集, No.24, pp. 167-174, 2020.
- (3) Lim, N.-H., Park, N.-H. and Kang, Y.-J.: Stability of continuous welded rail track, *Computers and Structures*, Vol.81, pp. 2219-2236, 2003.
- (4) 阿部和久, 田中洋介, 西宮裕騎, 紅露一寛: レール温度座屈時の分岐過程に関する一考察, 鉄道力学論文集, No.13, pp. 7-14, 2009.
- (5) Matsunaga, H.: Vibration and buckling of deep beam-columns on two-parameter elastic foundations, *Journal of Sound and Vibration*, Vol.228(2), pp. 359-376, 1999.
- (6) Eisenberger, M. and Clastornik, J.: Vibrations and buckling of a beam on a variable Winkler elastic foundation, *Journal of Sound and Vibration*, Vol.115(2), pp. 233-241, 1987.
- (7) Ghadban, A.A., Al-Rahmani, A.H., Rasheed, H.A. and Albahtiti, M.T.: Buckling of nonprismatic column on varying elastic foundation with arbitrary boundary conditions, *Hindawi, Mathematical Problems in Engineering*, Vol.2017, Article ID 5976098, 2017.
- (8) Clastornik, J., Eisenberger, M., Yankelevsky, D.Z. and Adin, M.A.: Beams on variable Winkler elastic foundation, *Journal of Applied Mechanics*, ASME, Vol.53, pp. 925-928, 1986.
- (9) Huang, Y. and Luo, Q.-Z.: A simple method to determine the critical buckling loads for axially inhomogeneous beams with elastic restraint, *Computers and Mathematics with Applications*, Vol.61, pp. 2510-2517, 2011.
- (10) Mirzabeigy, A., Haghpanahi, M. and Madoliat, R.: A new finite element formulation for buckling and free vibration analysis of Timoshenko beams on variable elastic foundation, *Journal of Solid Mechanics*, Vol.9(2), pp. 276-290, 2017.
- (11) Wadee, M.K., Hunt, G.W. and Whiting, A.I.M.: Asymptotic and Rayleigh-Ritz routes to localized buckling solutions in an elastic instability problem, *Proceedings Royal Society London A*, Vol.453, pp. 2085-2107, 1997.
- (12) Wadee, M.K. and Bassom, A.P.: Characterization of limiting homoclinic behavior in a one-dimensional elastic buckling model, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol.48, pp. 2297-2313, 2000.
- (13) Wadee, M.K., Coman, C.D. and Bassom, A.P.: Solitary wave interaction phenomena in a strut buckling model incorporating restabilization, *Physica D*, Vol.163, pp. 26-48, 2002.
- (14) Coman, C., Bassom, A.P. and Wadee, M.K.: Elastoplastic localized responses in one-dimensional structural models, *Journal of Engineering Mathematics*, Vol.47, pp. 83-100, 2003.
- (15) Pierre, C.: Curve veering and mode localization in a buckling problem, *Journal of Applied Mathematics and Physics (ZAMP)*, Vol.40, pp. 758-761, 1989.
- (16) Coman, C.D.: Inhomogeneities and localized buckling patterns, *IMA Journal of Applied Mathematics*, Vol.71, pp. 133-152, 2006.
- (17) Coman, C.D.: Localized elastic buckling: non-linearities versus inhomogeneities, *IMA Journal of Applied Mathematics*, Vol.75, pp. 461-474, 2010.
- (18) Indeitsev, D.A., Kuklin, T.S. and Michalova, Y.A.: Localization in a Bernoulli-Euler beam on an inhomogeneous elastic foundation, *Vestnik St. Petersburg University. Mathematics*, Vol.48(1), pp. 41-48, 2015.
- (19) Zakeri, J.A., Mohammadzadeh, S. and Barati, M.: New definition of nutral temperature in continuous welded railway track curves, *Periodica Polytechnica Civil Engineering*, Vol.61, No.1, pp. 143-147, 2018.
- (20) 高木柚子, 阿部和久, 紅露一寛: 建物の日陰の移動がレール中立温度に及ぼす影響(シンポジウム講演概要), 第26回応用力学シンポジウム, 11006-10-01, 2023.
- (21) Kish, A. and Samavedam, G.: Risk analysis based CWR track buckling safety evaluation, *The Int. Conf. on Innovations in the Design & Assessment of Railway*, Delft. The Netherlands, National Technical Information Service, 1999.
- (22) Luongo, A.: Mode localization in dynamics and buckling of linear imperfect continuous structures, *Nonlinear Dynamics*, Vol.25, pp. 133-156, 2001.
- (23) Amazigo, J.C., Budiansky, B. and Carrier, G.F.: Asymptotic analyses of the buckling of imperfect

- columns on nonlinear elastic foundations, *International Journal of Solids and Structures*, Vol.6, pp. 1341-1356, 1970.
- (24) Simão, P.D., Coelho, A.M.G. and Wadee, M.A.: Buckling of a column with random initial geometrical imperfections, *Proceedings of the European Conference on Steel and Composite Structures - Eurosteel 2014*, Naples (Italy), September 10th-12th, 2014, CD-Rom paper n. 09-590.
- (25) Abramian, A.K., Vakulenko, S.A., Lukichev, D.V. and van Horssen, W.T.: Dynamics and buckling loads for a vibrating damped Euler-Bernoulli beam connected to an inhomogeneous foundation, *Archive of Applied Mechanics*, Vol.91(4), pp. 1291-1308, 2020.
- (26) 阿部和久, 小坂拓斗, 紅露一寛: 種々の不確実性を考慮した軌道座屈発生件数の期待値解析, 第27回鉄道工学シンポジウム論文集, pp. 183-190, 2023.
- (27) 丸山聖司, 阿部和久, 紅露一寛: 軌道水平変位に関する臨界速度の外乱鋭敏性, 土木学会論文集 A2(応用力学), Vol.70(2), I.971-I.980, 2014.
- (28) 宮井 徹: エネルギー法による軌道座屈の数値解析, 鉄道技術研究報告, No.1271, 1984.
- (29) Abe, K., Chida, Y., Quinay, P.E.B. and Koro, K.: Dynamic instability of a wheel moving on a discretely supported infinite rail, *Journal of Sound and Vibration*, Vol.333(15), pp. 3413-3427, 2014.
- (30) 岩崎英治, 松野純一, 長井正嗣: 弧長法のための一反復解法と弧長自動設定法, 応用力学論文集, Vol.5, pp.207-216, 2002.

## DENSITY BASED SENSITIVITY ANALYSIS OF RAREFIED GAS FLOWS USING THE DISCRETE VELOCITY METHOD

官 凱文<sup>1)</sup>, 山田 崇恭<sup>2)</sup>

Kaiwen GUAN and Takayuki YAMADA

1) 東京大学大学院工学系研究科 (〒 113-8656 文京区弥生 2-11-16, E-mail: k-guan@g.ecc.u-tokyo.ac.jp)

2) 東京大学大学院工学系研究科 (〒 113-8656 文京区弥生 2-11-16, E-mail: t.yamada@mech.t.u-tokyo.ac.jp)

Material interpolation scheme and sensitivity analysis are studied in this research, with the aim to achieve topology optimization of rarefied gas flow structures. Choosing the discrete velocity method as the numerical approach for the Boltzmann equation, material interpolation scheme is developed by correcting the convection flux of the discretized convection equations and re-scaling the relaxation term of the Shakhov gas kinetic model. With the proposed interpolation scheme, material distribution can be effectively modelled using a pseudo design density. A discrete adjoint system is proposed for sensitivity analysis. The governing equation, the Boltzmann equation, in the optimization problem is replaced by the steady state condition of the numerical scheme. The discretized version of the governing equation results in a simple and straightforward way to formulate an adjoint system using the Lagrangian multiplier method. The numerical solution of the adjoint system can be obtained by a similar numerical approach, if the flux Jacobian of the original system is transposed. Numerical examples confirm the validity of the proposed methods, which can serve as the basis for structural optimization algorithms in rarefied flow systems.

**Key Words:** Boltzmann Equation, Adjoint System, Sensitivity Analysis, Rarefied Gas, Topology Optimization

### 1. Introduction

According to the kinetic theory, gas is made up by an enormous number of molecules travelling randomly in space. Each molecule carries momentum and energy, and their random collisions result in dissipation of momentum and energy in the form of shear force and heat flux. Under usual conditions, the shear number of gas molecules guarantees that the collision frequency is extremely high, so that the mean free path (the average distance travelled by molecules between collisions) is very small, and hence negligible compared to the characteristic length of the flow field. In other words, in the macroscopic scale (one that is comparable with the characteristic length of the flow field), gas can be treated as a continuum, where only a few macroscopic quantities (such as density, temperature, and velocity) are required to fully

describe it. The dissipation of momentum and energy via the numerous inter-molecular collisions can be categorically described by constitutive laws such as Newton's law of viscosity and Fourier's law of heat conduction.

However, under what is called the rarefied condition, behavior of gas can be drastically different. By definition, rarefaction refers to the condition where the mean free path  $\lambda$  becomes non-negligible compared to the characteristic length  $L_c$  of the flow field. Or, introducing the non-dimensionalized Knudsen number  $\text{Kn} = \lambda/L_c$ , when  $\text{Kn}$  gets larger than  $10^{-4}$ <sup>(1)</sup>. Under rarefied conditions, the lack of inter-molecular collisions means the velocity distribution of gas molecules deviates from the conventionally assumed equilibrium conditions. As a result, the empirical constitutive conditions will break down, and the flow field will be more susceptible to the conditions of the solid boundaries that enclose it. When  $\text{Kn}$  is sufficiently large, peculiar phenomenon such as

---

2023 年 10 月 8 日受付, 2023 年 10 月 31 日受理

thermal transpiration will occur<sup>(2)</sup>.

The condition of rarefaction usually requires extremely low pressure (for large  $\lambda$ ) or very small spatial scales (for small  $L_c$ ). Although rarely encountered in daily life, rarefied gas are commonly found in several cutting-edge engineering fields, such as vacuum technology, space technology, and micro-electro-mechanical systems (MEMS). Accurate modelling and numerical simulation of rarefied gas flows are, therefore, of fundamental significance to the design and developments of various products. Examples include micro actuators, gas sensors, and space nozzles<sup>(4)</sup>. However, the optimal design of these fascinating devices have long been an open question. This is primarily due to the mathematical and computational barriers associated with the governing equation, the Boltzmann equation. As is mentioned, rarefied gas behaves unconventionally, and thus the Navier-Stokes-Fourier (NSF) equations cannot be used as the governing equation. The Boltzmann equation employs a distribution function  $f$  to describe the distribution of gas molecules in terms of both position and velocity, and the equation is closed by considering the changes to  $f$  due to streaming, reflection, and collision of all the molecules. Over the years, several numerical methods have been developed for the Boltzmann equation, such as the direct simulation Monte-Carlo (DSMC)<sup>(5, 6)</sup> the discrete velocity method (DVM)<sup>(7, 8)</sup>, and the lattice Boltzmann method (LBM)<sup>(9, 10)</sup>. However, solving the Boltzmann equation numerically does not fully address the question of optimal design. Theoretically, empirical methods like trial-and-error can be applied, where one chooses from a finite number of candidates according to numerical results<sup>(12)</sup>. But clearly, empirical methods lacks rigorousness, as it cannot rule out the possibilities of better designs that are not tested yet. Apart from that, empirical methods require considerable computational resources, which makes applications to large-scale systems expensive<sup>(11)</sup>. As a result, at the time being, most flow devices in rarefied flow fields have rather simple shapes, consisting mostly of straight lines and arcs<sup>(13)</sup>.

In order to develop optimal design approaches for rarefied gas flows, researchers have turned to topology optimization. The advantages of topology optimization is quite obvious: it preserves the high degree-of-freedom of the original design problem, and ensures global optimality of the obtained result. However, the complexity of Boltzmann equation poses a challenge to conduct material sensitivity analysis. From the available literature, Sato et al. used a direct extension of the Boltzmann equation to describe material distribution, and design sensitivity is obtained using the adjoint variable method and the Lagrangian multiplier method<sup>(14)</sup>. How-

ever, the complexity of the Boltzmann equation, or the substituted Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) equation, results in cumbersome derivation and numerical treatment of the adjoint system. As is reported, optimization of a 2D system using  $100 \times 100$  square meshes takes around 40 hours.

Guan et al. used direct simulation Monte-Carlo (DSMC) to calculate the rarefied flow field, and proposed a material interpolation scheme based on the DSMC algorithm using a pseudo design density<sup>(16)</sup>. For sensitivity analysis, a discretize-then-optimize (DTO) approach due to Caflisch<sup>(15)</sup> is used. This approach focuses on the dependencies of the numerical variables in the simulation, and bypasses the tedious treatment of the continuous adjoint system as is used by Sato et al. Nevertheless, the DTO approach in sensitivity analysis could require storage of all the intermediate variables during the simulation, which incurs extreme memory usage in practical terms.

In this paper, we would like to present an efficient sensitivity analysis approach for rarefied gas flows, which addresses the drawbacks of the above-mentioned methods. The structure of this paper is as follows. In Section 2, a brief review of the discrete velocity method (DVM) is provided, which is a deterministic method for the Boltzmann equation. In Section 3, a new material interpolation scheme is proposed. The proposed interpolation scheme is based on the DVM algorithm, and directly captures the presence of solid by modifying the convection fluxes. In Section 4, design sensitivity is derived based on a discrete adjoint system. It will be shown that the proposed approach reduces memory cost compared to the DTO approach, and its computational cost is comparable to the forward DVM process. Finally, in Section 5, several numerical examples are provided to validate the proposed interpolation scheme and sensitivity.

## 2. Review of the Boltzmann equation and DVM

### 2.1. The Boltzmann equation

Neglecting external force, the single-species rarefied gas flow is governed by the Boltzmann equation

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f = W[f]. \quad (1)$$

In Eqn. (1),  $f$  is the distribution function of the gas molecules.  $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$  represents the probability density of finding a molecule around position  $\mathbf{x}$  with velocity  $\mathbf{v}$  at time  $t$ . On the right hand side (RHS),  $W[f]$  is the collision integral, which describes the rate of change in  $f$  due to the collisions between molecules. The general expression for  $W[f]$  is

$$W[f] = \int_{\mathbf{R}^3} \int_{\mathcal{S}^2} q(\mathbf{v} - \mathbf{v}_1, \sigma) (f^* f_1^* - f f_1) d\sigma d\mathbf{v}_1, \quad (2)$$

where  $\mathcal{S}^2$  is the unit sphere,  $q(\mathbf{v} - \mathbf{v}_1, \sigma)$  is the collision section that characterizes the likelihood of collision between

molecules with velocity  $\mathbf{v}$  and  $\mathbf{v}_1$  at reflection angle indicated by  $\sigma$ , and  $f_1, f^*, f_1^*$  are short-hand notations for the  $f$  at pre-collision and post-collision velocity points. The details of Eqn. (2) can be found in reference<sup>(17)</sup>.

## 2.2. DVM

In order to solve Eqn. (1), DVM first introduces a simplification of the collision integral  $W$ . The Shakhov gas-kinetic equation is often used, where

$$W[f] = \frac{1}{\tau}(f^{\text{sh}} - f). \quad (3)$$

In Eqn. (3),  $\tau = \mu/p$  is a characteristic relaxation time, where  $\mu$  is viscosity and  $p$  is pressure.  $f^{\text{sh}}$  is a target relaxation state given through the Maxwellian distribution  $f^{\text{ma}}$  by

$$f^{\text{sh}} = f^{\text{ma}} \left[ 1 + (1 - \text{Pr}) \frac{\mathbf{Q} \cdot \mathbf{c}}{5pR_0T} \left( \frac{\mathbf{c}^2}{R_0T} - 5 \right) \right], \quad (4)$$

where  $\mathbf{c} = \mathbf{v} - \mathbf{V}$  is the peculiar velocity, Pr is the Prandtl number,  $R_0$  is specific gas constant,  $\mathbf{V}, \mathbf{Q}, T$  are the velocity, heat flux, and temperature of the flow, respectively. The expression for  $f^{\text{ma}}$  is

$$f^{\text{ma}}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \frac{\rho}{(2\pi R_0T)^{3/2}} \exp\left(-\frac{\mathbf{c}^2}{2R_0T}\right), \quad (5)$$

where  $\rho$  is density of gas.

Using the Shakhov model, Eqn. (1) is simplified to

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_x f = \frac{1}{\tau}(f^{\text{sh}} - f). \quad (6)$$

DVM uses discretized values of  $f$  over both the physical domain and the velocity domain to solve Eqn. (6) numerically. Let  $\{\hat{v}_1, \hat{v}_2, \dots, \hat{v}_{N_v}\}$  be a set of  $N_v$  fixed velocity points, Eqn. (6) is discretized in velocity domain as

$$\frac{\partial \hat{f}_k}{\partial t} + \hat{v}_k \cdot \nabla_x \hat{f}_k = \frac{1}{\tau}(\hat{f}_k^{\text{sh}} - \hat{f}_k) \quad (7)$$

for  $1 \leq k \leq N_v$ , where  $\hat{f}_k^{\text{sh}}$  stands for  $f^{\text{sh}}(\mathbf{x}, \hat{v}_k, t)$  and  $\hat{f}_k$  stands for  $f(\mathbf{x}, \hat{v}_k, t)$ . Note that, if the RHS of Eqn. (7) is treated as an external source, Eqn. (7) represents a system of convection equations, each with fixed velocity  $\hat{v}_k$ . The system of convection equations can be solved efficiently via many of the established methods in computational fluid mechanics. In this paper, we use the same finite volume method (FVM) spatial discretization for all the  $N_k$  equations.

### 2.2.1. Macroscopic quantities

For computation of  $f^{\text{sh}}$  and for evaluation of the flow field, macroscopic quantities such as density, velocity, temperature, etc. are usually required. These quantities can be obtained as moments of the distribution function  $f$ .

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int_{\mathbf{R}^3} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}, \quad (8)$$

$$\mathbf{V}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\rho} \int_{\mathbf{R}^3} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \mathbf{v} d\mathbf{v}, \quad (9)$$

$$p(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{3} \int_{\mathbf{R}^3} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) (\mathbf{v} - \mathbf{V})^2 d\mathbf{v}, \quad (10)$$

$$\mathbf{Q}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{R}^3} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) (\mathbf{v} - \mathbf{V})(\mathbf{v} - \mathbf{V})^2 d\mathbf{v}. \quad (11)$$

In DVM, the integrals in Eqn. (8) to Eqn. (11) should be replaced by numerical quadrature. In this paper, 24-point and 50-point Gauss-Hermite quadrature are used. Temperature can be obtained by the equation of state

$$T = \frac{p}{\rho R_0}, \quad (12)$$

and relaxation time can be obtained by

$$\tau = \frac{\mu}{p} = \frac{\mu_0(T/T_0)^\omega}{p}, \quad (13)$$

where  $\mu_0$  is a reference value of  $\mu$  at temperature  $T_0$ , and  $\omega$  is a gas-specific constant. Once the macroscopic quantities are obtained,  $f^{\text{sh}}$  can be explicitly calculated.

### 2.2.2. Boundary condition

For a computational domain  $\mathcal{C}$  of rarefied flow, its boundary can be divided into two types: open and closed. Open boundaries are those where fluid is present on both sides, such as flow inlets/outlets, and far-field flows. For open boundaries, boundary conditions can be determined according to established results in CFD. For closed boundaries, gas molecules are reflected on the solid surfaces. The exact boundary conditions are given in terms of reflection kernels  $R_{\text{ref}}(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_r)$ , which states the probability density of a molecule getting reflected to velocity  $\mathbf{v}_r$  when it hits the surface with velocity  $\mathbf{v}_i$ . In DVM computation, solid boundaries are treated as extra source (or sink) of  $f$ .

### 2.2.3. Time marching scheme

In rarefied gas flows, turbulence is hardly present, and the focus is mainly on the steady state flow field. Therefore, an LUSGS-based implicit time marching scheme, as is described in reference<sup>(18)</sup> is used, which drastically speeds up convergence.

## 3. Topology optimization and material interpolation

### 3.1. Topology optimization

In topology optimization, we consider the problem to find the optimal structure that minimizes/maximizes a given objective function. The key idea is to replace the structure optimization problem by a material distribution problem, namely, for a characteristic function  $\chi$ , we let

$$\chi(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \mathbf{x} \in \mathcal{F}, \\ 0 & \mathbf{x} \in \mathcal{D} \setminus \mathcal{F}, \end{cases} \quad (14)$$

where  $\mathcal{D}$  is the design domain, and  $\mathcal{F}$  is fluid domain. However, as  $\chi$  can take either 1 or 0 for  $\mathbf{x} \in \mathcal{D}$ , infinitely small structures are not prohibited, resulting the optimization problem being ill-posed. One solution is to use a normalized density  $\alpha$  instead of  $\chi$  as the design variable, where  $\alpha$  is in  $\mathcal{L}^\infty(\mathcal{D}; [0, 1])$ , Lebesgue integrable functions defined over  $\mathcal{D}$  with value between 0 and 1. Using the pseudo design density can increase the regularity of the obtained structures<sup>(19)</sup>.

However, introduction of  $\alpha$  brings a new problem. As  $\alpha$  can take values between 0 and 1, some intermediate state between solid and fluid is introduced. Therefore, the computational domain, which consists of pure fluid initially, will have to be extended to a domain of mixed fluid and solid.

### 3.2. Material interpolation in DVM

In reference<sup>(14)</sup>, extension of the rarefied flow is achieved by extension of the Boltzmann equation. It is noted that the fixed solid can be treated as some porous media with varying permeability. A numerical scheme is then developed to solve the extended Boltzmann equation.

In this paper, we consider a more straightforward approach, where we directly construct an extension to the conventional DVM algorithm. Following the FVM spatial discretization, we let  $\vec{\alpha}$  denote the discretized representation of design variable  $\alpha$  in  $N_c$  computational cells. Namely,  $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{N_c})'$ , where  $(\cdot)'$  denotes transposition. We state that the following properties should be satisfied by the extension:

- The result of extended DVM calculation should change continuously with  $\vec{\alpha}$ .
- For a given  $\vec{\alpha}$  whose elements are either 0 and 1, result of the extended DVM shall be the same as conventional DVM, where the computational domain is set to the union of all cells where  $\alpha = 1$ , and identical boundary conditions are applied.

Shifting the focus from the Boltzmann equation to DVM bypasses the cumbersome derivation processes, and allows us to control or fine-tune the material interpolation scheme directly. In the following subsections, we present the detailed description of our extended DVM scheme.

#### 3.2.1. Modification in convection flux

The DVM discretization transforms the Boltzmann equation into a system of convection equations (7). Using FVM spatial discretization to solve the convection equations involves evaluating the surface fluxes at the boundaries of the computational cells. Without loss of generality, we write the flux as  $\phi_k$  for the convection equation featuring  $\hat{v}_k$ . The detailed expression of  $\phi_k$  shall depend on the flux reconstruction scheme one chooses, for instance, first-order upwind, Van-Leer, essentially non-oscillation (ENO), etc. In conventional DVM, the computational domain consists purely of fluid, hence  $\phi_k$  that leaves the upwind cell flows entirely into the downwind cell. This ensures conservation of the FVM scheme. However, the the extension of DVM, our computational domain may include a mixture of different materials, as is indicated by the value of  $\alpha$  stored in each computational cell. In order to model the transfer from fluid ( $\alpha = 1$ ) to solid ( $\alpha = 0$ ), we suggest the following correction of convec-

tion flux, using the value of  $\alpha$  across the cell boundary. Still, we let  $\phi_k$  represent the flux obtained according to standard DVM,  $\alpha_{\text{up}}$  be the value of  $\alpha$  in the upwind cell, and  $\alpha_{\text{down}}$  be the value of  $\alpha$  in the downwind cell. The corrected scheme is described as follows.

- The flux that leaves the upwind cell becomes  $\alpha_{\text{up}}\phi_k$ .
- The flux that enters the downwind cell becomes  $\alpha_{\text{up}}\alpha_{\text{down}}\phi_k$ .
- In order to preserve conservation, the difference between the two fluxes,  $\alpha_{\text{up}}(1 - \alpha_{\text{down}})\phi_k$ , shall be fed to a local reflection kernel  $R_{\text{rff}}^{\text{local}}$ , which describes post-reflection conditions, if solid is present in the computational cell.

Note that, in this extended scheme, when  $\alpha_{\text{up}} = 0$ , the net flux that leaves the cell must be zero, which is in accordance with the idea that solid does not emit molecules into gas. On the other hand, when  $\alpha_{\text{down}} = 0$ , the flux enters the downwind cell must be zero, which means solid does not absorb molecules from gas. In that case,  $\alpha_{\text{up}} = \max(\alpha_{\text{up}} - \alpha_{\text{down}}, 0)$ , which means all the flux that leaves the upwind cells shall be reflected.

Also note that, the proposed scheme does not depend on the actual expressions of  $\phi_k$  and  $R_{\text{local}}$ , and only depends on  $\alpha_{\text{up}}$  and  $\alpha_{\text{down}}$ . This ensures the versatility, namely, this extension in convection flux can be applied to any flux reconstruction scheme and any reflection boundary condition.

#### 3.2.2. Modification in relaxation time

In DVM, we use implicit time scheme to update the flow field. According to reference<sup>(18)</sup>, the convection fluxes, as well as the  $-\frac{1}{\tau}f$  term on the RHS of Eqn. (3) are treated implicitly, while the Shakhov state  $\frac{1}{\tau}f^{\text{sh}}$  is treated as a constant source term in every iteration. This is because  $f^{\text{sh}}$  depends on all the velocity components in one computational cell. If a full implicit scheme is used,  $f^{\text{sh}}$  will have to be re-calculated after the update of every single velocity component, which is too expensive in computational terms. It can be shown that, when Kn is sufficiently large ( $\text{Kn} > 1$ ), treating  $\frac{1}{\tau}f^{\text{sh}}$  explicitly will not slow down convergence significantly, as convection still dominates the development of flow field. However, in the extended DVM scheme,  $\alpha$  restricts the effective convective fluxes between computational cells. As a result, when  $\alpha$  takes a non-zero small value, the magnitude of convective change will likely be overshadowed by the magnitude of relaxation change, which can be thought of as a local drop in Kn for the computational cell. Consequently, explicit treatment of  $\frac{1}{\tau}f^{\text{sh}}$  cannot effectively update the flow field, and the speed of convergence could be drastically impaired.

In order to fix this local decrease in Kn and restore the computational efficiency, we suggest the relaxation term strength to be equally scaled by local value of  $\alpha$ . Namely, the collision integral  $W$  shall be modelled by

$$W[f] = \frac{\alpha}{\tau}(f^{\text{sh}} - f). \quad (15)$$

Using the modified relaxation model ensures that the magnitude of convection and relaxation remain balanced according to a global Kn, so that the rate of convergence of the extended DVM will be at the same level compared to conventional DVM.

It may cause some confusion that for  $\alpha = 0$ , the relaxation term vanishes for solid regions, which is opposite to the model in reference<sup>(14)</sup>, where solid is treated as regions where inter-molecular collisions are extremely strong. Note that, in our proposed method, despite relaxation is effectively non-existent for solid, the velocity distribution in solid region has zero effect on its neighbouring cells due to the correction in convection fluxes. The presence of solid (or cells where  $\alpha = 0$ ) is manifested by the additional reflection fluxes created at the cell boundaries, whose intensity depends entirely on the incident flux from outside the solid region. And since the effective convection flux from the upwind cell to the downwind is corrected by a factor  $\alpha_{\text{up}}\alpha_{\text{down}}$ , the influence of a computational cell to the entire computational domain is limited by the local value of  $\alpha$ . Together with modification of macroscopic flow quantities in the objective function, which will be introduced below, modifying  $\tau$  according to  $\alpha$  will not cause ill effects to the global flow field, even if  $0 < \alpha < 1$ .

### 3.2.3. Modification in objective function

In order to increase the convexity of the optimization problem, we suggest to add a penalty term in the final results of DVM calculation. Let  $\hat{\rho}, \hat{V}, \hat{p}, \hat{Q}$  be the density, velocity, pressure, and heat flux calculated from numerical quadrature, as is done in convectional DVM. In the extended DVM, we suggest using  $\hat{\rho}^*, \hat{V}^*, \hat{p}^*, \hat{Q}^*$  as substitutions. The definitions are

$$\hat{\rho}^* = \alpha^\beta \hat{\rho} + (1 - \alpha^\beta)\rho_0, \quad (16)$$

$$\hat{V}^* = \alpha^\beta \hat{V} + (1 - \alpha^\beta)\mathbf{V}_0, \quad (17)$$

$$\hat{p}^* = \alpha^\beta \hat{p} + (1 - \alpha^\beta)p_0, \quad (18)$$

$$\hat{Q}^* = \alpha^\beta \hat{Q} + (1 - \alpha^\beta)\mathbf{Q}_0, \quad (19)$$

where  $\rho_0, \mathbf{V}_0, p_0, \mathbf{Q}_0$  are constant values, representing the desired density, velocity, pressure, and heat flux of the flow field when solid is present. For steady solid,  $\mathbf{V}_0 = \mathbf{Q}_0 = 0$ . Gas density and pressure are not properly defined for a pure solid region, we suggest using the initial values in DVM calculation  $\rho_0 = \rho_{\text{ini}}, p_0 = p_{\text{ini}}$ . The exponent  $\beta \geq 0$  controls the level of penalization.

## 4. Sensitivity analysis via discrete adjoint system

In topology optimization, the key step, sensitivity analysis, is dedicated to evaluate the change of the objective functional due to changes in the design variable. The conventional sensitivity analysis approach is to use the Lagrangian multiplier method with adjoint variables. Like is done in reference<sup>(14)</sup>, a system of adjoint equations, with proper boundary conditions, should be derived based on the Boltzmann equation. After that, a separate numerical scheme is developed to solve for the adjoint variables numerically. This optimize-then-discretize (OTD) approach, as is discussed in reference<sup>(15)</sup>, requires rigorous yet tedious derivations, which is particularly the case for the Boltzmann equation. In reference<sup>(16)</sup>, an alternative discretize-then-optimize (DTO) approach is used, where the focus is shifted to the numerical variables. The DTO approach bypasses the derivation, and simplifies the formulation significantly. However, simply tracking the dependencies of the numerical variables from their initial values to the steady state solution incurs seriously high memory usage and lacks computational efficiency. In the following subsections, we shall introduce a discrete adjoint system based on the discretized version of the Boltzmann equation through the proposed extension of DVM.

### 4.1. Symbolic expressions for the extended DVM

In extended DVM, we can write the discrete values  $\hat{f}_k$  in one state vector  $\vec{f} \in \mathbb{R}^{N_c N_v}$ ,

$$\vec{f} = (\vec{f}_1, \vec{f}_2, \dots, \vec{f}_{N_c})', \quad (20)$$

where each  $\vec{f}_i \in \mathbb{R}^{N_v}$  represents the discretized  $\hat{f}_k$  ( $1 \leq k \leq N_v$ ) in the computational cell indexed  $i$ ,

$$\hat{f}_i = (\hat{f}_{1,i}, \hat{f}_{2,i}, \dots, \hat{f}_{N_v,i})'. \quad (21)$$

The extended DVM updates the state vector  $\vec{f}$  at every time step until the flow field reaches steady state. The steady state can be identified as the zero of a residual operator  $\vec{R}(\vec{f}) \in \mathbb{R}^{N_c N_v}$ .  $\vec{R}$  takes the current discretized value  $\vec{f}$  as input, and returns the rate of change with respect to time for every component. The detailed expressions of  $\vec{R}$  should depend on the FVM discretization of the computational domain, the flux reconstruction scheme for the convection equations, and  $\vec{\alpha}$ . Therefore, the steady state of the rarefied flow field, as is dictated by

$$\mathbf{v} \cdot \nabla_x f = W[f] \quad (22)$$

can be rewritten in discrete form as

$$\vec{R}(\vec{f}; \vec{\alpha}) = 0. \quad (23)$$

Note that, the boundary conditions of Eqn. (22) are automatically included in Eqn. (23) by proper definition of  $\vec{R}$ .

## 4.2. Discrete optimization problem

Following the discretized governing equation, we consider the model optimization problem for rarefied flow field.

$$\inf_{\vec{\alpha}} K = K(\vec{f}; \vec{\alpha}), \quad (24)$$

subject to

$$\vec{R}(\vec{f}; \vec{\alpha}) = 0. \quad (25)$$

$K$  is a objective functional to be minimized, and is defined over the state vector  $\vec{f}$  and the pseudo design density  $\vec{\alpha}$ . Note that the expression of  $K$  is very general, as all the macroscopic flow quantities can be obtained from the discrete velocity distribution function via proper quadrature. Equation (25) uses the discretized expression of steady state.

## 4.3. Discrete adjoint system

Design sensitivity is obtained using the augmented Lagrangian multiplier method with adjoint variables. We define the Lagrangian  $J$  as

$$J = K(\vec{f}; \vec{\alpha}) - \vec{\Phi} \cdot \vec{R}(\vec{f}; \vec{\alpha}) \quad (26)$$

In  $J$ ,  $\vec{\Phi} \in \mathbb{R}^{N_c N_v}$  is the vector of adjoint variables. According to first-order optimal conditions, we derive the adjoint equations by stating  $\frac{\partial J}{\partial \vec{f}} = 0$ , namely,

$$\frac{\partial K}{\partial \vec{f}} - \left( \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{f}} \right)' \vec{\Phi} = 0. \quad (27)$$

Note that,  $\frac{\partial K}{\partial \vec{f}}$  is the gradient of  $K$  with respect to  $\vec{f}$ , which is a vector in  $\mathbb{R}^{N_c N_v}$ .  $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{f}}$  is the Jacobian of flow residual  $\vec{R}$  with respect to  $\vec{f}$ , which is an  $N_c N_v \times N_c N_v$  square matrix. For known  $\vec{f}$  and  $\vec{\alpha}$ ,  $\frac{\partial K}{\partial \vec{f}}$  and  $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{f}}$  can be explicitly formulated. Therefore, symbolically speaking, Eqn. (27) is simply a system of linear equations. Once  $\vec{\Phi}$  is numerically solved, the sensitivity  $\vec{H}$  is obtained by

$$\vec{H} = \frac{\partial J}{\partial \vec{\alpha}} = \frac{\partial K}{\partial \vec{\alpha}} - \left( \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{\alpha}} \right)' \vec{\Phi}. \quad (28)$$

Similar to Eqn. (27),  $\frac{\partial K}{\partial \vec{\alpha}}$  and  $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{\alpha}}$  are gradient and Jacobian which can be explicitly evaluated given  $\vec{f}$  and  $\vec{\alpha}$ .

## 4.4. The transposed flux Jacobian

The main challenge of sensitivity analysis lies in Eqn. (27), where we need to find the inverse of the transposed flux Jacobian  $\left( \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{f}} \right)'$ . Let  $\mathcal{B}$  denote the original flux Jacobian  $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{f}}$ . Note that, due to the structure of  $\vec{f}$ ,  $\mathcal{B}$  can be written in the form of a  $N_c \times N_c$  block matrix. Each block  $\mathbf{B}_{i,j}$  is a  $N_v \times N_v$  sub-matrix, which corresponds to the Jacobian of flow residual in cell  $j$  with respect to the state vector in cell

$i$ . Note that, due to the locality of the FVM discretization, most of  $\mathbf{B}_{i,j}$  will be zero.  $\mathbf{B}_{i,j}$  is non-zero only when  $i = j$  or when  $i, j$  are adjacent computational cells. Therefore, the transposed system  $\mathcal{B}'$  is also a sparse matrix, which can be solved using the LUSGS technique with similar efficiency.

## 4.5. Discussion regarding the adjoint variables

The sensitivity obtained via the discrete adjoint system is closely related to one that obtained from a finite-difference approach. Consider the objective functional  $K(\vec{f}, \vec{\alpha})$ , we would like to obtain its rate of change with respect to perturbations in  $\vec{\alpha}$ , which is to consider the total derivative

$$\frac{dK}{d\vec{\alpha}} = \frac{\partial K}{\partial \vec{f}} \frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{\alpha}} + \frac{\partial K}{\partial \vec{\alpha}}. \quad (29)$$

For given objective functional  $K$  and known values of  $\vec{f}$  and  $\vec{\alpha}$ , the two gradients  $\frac{\partial K}{\partial \vec{f}}$  and  $\frac{\partial K}{\partial \vec{\alpha}}$  can be explicitly evaluated. However, the remaining term  $\frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{\alpha}}$ , is less obvious.  $\vec{f}$  and  $\vec{\alpha}$  are related by the state equation (25), which dictates that zero flow residual should be attained by  $\vec{f}$  under given  $\vec{\alpha}$ . Therefore, for a small change in  $\vec{\alpha}$  to  $\vec{\alpha} + \Delta \vec{\alpha}$ , the current steady state  $\vec{f}$  must change to  $\vec{f} + \Delta \vec{f}$ , such that their induced changes in  $\vec{R}$  cancel out. Namely,

$$\begin{aligned} & \vec{R}(\vec{f} + \Delta \vec{f}; \vec{\alpha} + \Delta \vec{\alpha}) \\ &= \vec{R}(\vec{f}; \vec{\alpha}) + \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{f}} \Delta \vec{f} + \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{\alpha}} \Delta \vec{\alpha} + \mathcal{O}[(\max(|\Delta \vec{f}|, |\Delta \vec{\alpha}|))] \\ &= 0. \end{aligned} \quad (30)$$

Note that the original steady state satisfies  $\vec{R}(\vec{f}; \vec{\alpha}) = 0$ , neglecting higher order terms, we have

$$\frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{\alpha}} = - \left( \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{f}} \right)^{-1} \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{\alpha}}. \quad (31)$$

Substituting Eqn. (31) into Eqn. (29), we get an alternative expression for sensitivity

$$\frac{dK}{d\vec{\alpha}} = - \frac{\partial K}{\partial \vec{f}} \left( \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{f}} \right)^{-1} \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{\alpha}} + \frac{\partial K}{\partial \vec{\alpha}}. \quad (32)$$

Note that, the inverse  $\left( \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{f}} \right)^{-1}$  is not necessarily sparse, and would take up too much memory to store when  $N_c N_v$  is large. One possible solution is to use an iterative approach to calculate the result of Eqn. (31). However, note that  $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{\alpha}}$  is an  $N_c N_v \times N_c$  matrix. When  $N_c$  is large, this approach is still considerably expensive compared to finding the steady state flow field in DVM. One more feasible approach is to evaluate  $\frac{\partial K}{\partial \vec{f}} \left( \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{f}} \right)^{-1}$  first. Note that the transpose rule states that

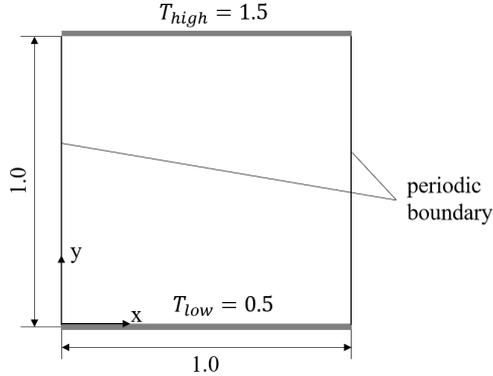
$$\left[ \frac{\partial K}{\partial \vec{f}} \left( \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{f}} \right)^{-1} \right]' = \left[ \left( \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{f}} \right)^{-1} \right]' \left( \frac{\partial K}{\partial \vec{f}} \right)' \quad (33)$$

The solution of Eqn. (33) is exactly the adjoint variables  $\vec{\Phi}$ .

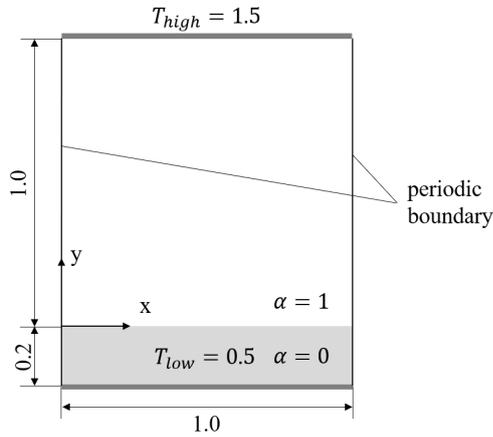
## 5. Numerical examples

### 5.1. Material interpolation

We use the following flow fields to demonstrate the validity of the proposed material interpolation scheme.



(a) Benchmark case.



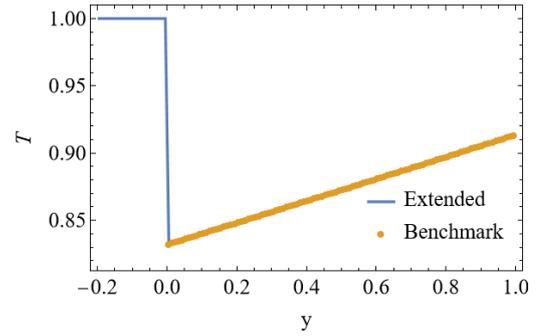
(b) Extended case.

Fig. 1: Computational domain of the plane Fourier flow.

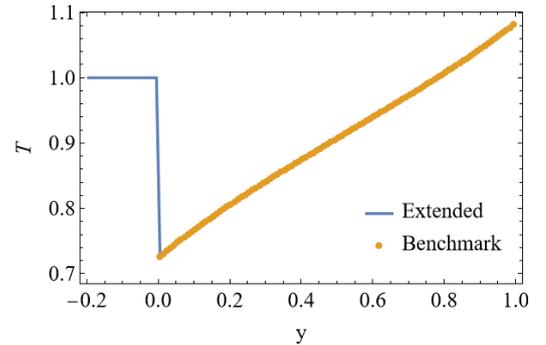
#### 5.1.1. Plane Fourier flow

In plane Fourier flow, rarefied gas is placed between two infinitely large parallel plates. The plates are stationary, but kept at different temperatures. The lower plate has  $T_{low} = 0.5$ , and the higher plate has  $T_{high} = 1.5$ , which are non-dimensionalized against reference temperature  $T_0 = 273$  K. The separation between the plates is 1 m, which is also the characteristic length of the flow field. Diffuse reflection boundary conditions are set at the gas/solid interfaces. We choose Argon as the working gas, and consider cases where a uniform initial density  $\rho_0$  results in  $Kn = 10.0, 1.0, 0.1$ , respectively.

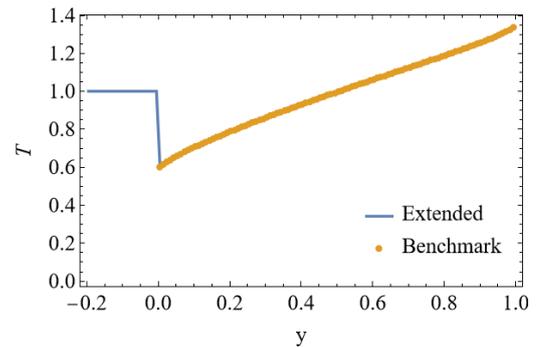
As a benchmark case, we first calculate the flow field using standard DVM procedure. Due to the symmetry of the problem, we use 100 uniform-spaced computational cells to discretize the domain. The velocity domain is normalized by the reference speed  $v_0 = \sqrt{2R_0T_0}$ , and discretized using 50



(a)  $Kn = 10.0$



(b)  $Kn = 1.0$



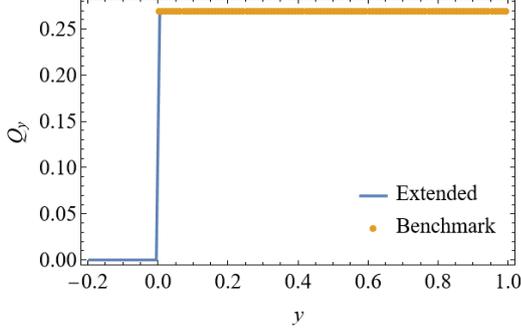
(c)  $Kn = 0.1$

Fig. 2: Temperature distribution in the plane Fourier flow at different  $Kn$ .

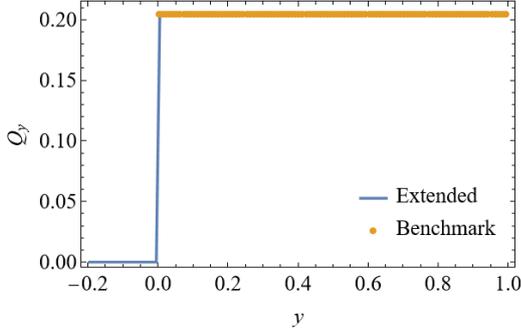
Gauss-Hermite quadrature nodes in each spatial direction, resulting  $N_v = 2500$  for the 2D case. For the discretized convection equations, first-order upwind scheme is used to reconstruct the surface flux.

To test the proposed material interpolation scheme, we consider an extended computational domain, where the separation between plates is increased to 1.2 m, and the number of uniform computational cells is increased to 120. In order to maintain the characteristic length, the lower 1/6 of the computational domain is assigned  $\alpha = 0$ , and the rest 5/6 is assigned  $\alpha = 1$ . Illustration of the computational domains is included in Fig. 1. Fig. 2 and Fig. 3 show the distribution of temperature and heat flux (normalized against  $Q_0 = \rho_0 v_0^3$ ). In the flow region where  $\alpha = 1$ , the extended DVM gives identical results compared to the benchmark cases. In the

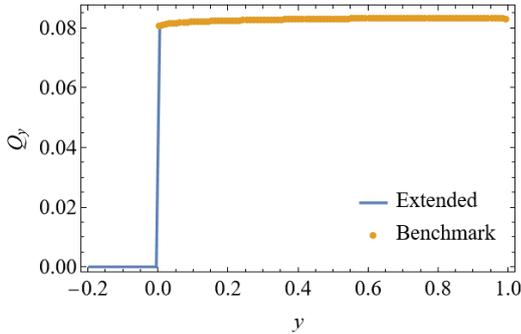
extended region where  $\alpha = 0$ , due to the modification scheme introduced in Section 3.2.3, macroscopic quantities actually do not depend on DVM results. Flow temperature and heat flux are simply forced to be 1.0 and 0.0, respectively, which are prescribed values to represent the presence of solid. Of course, the choice of representation of solid is a rather arbitrary one, for instance, one can use 0.5 to represent solid temperature in this plane Fourier flow.



(a)  $\text{Kn} = 10.0$



(b)  $\text{Kn} = 1.0$



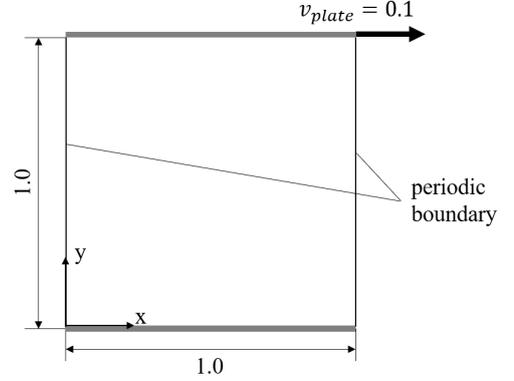
(c)  $\text{Kn} = 0.1$

Fig. 3: Heat flux distribution in the plane Fourier flow at different  $\text{Kn}$ .

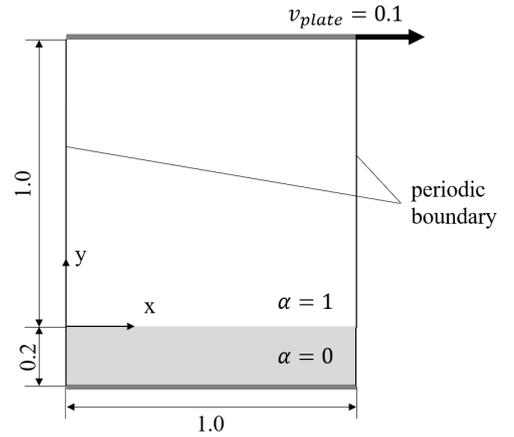
### 5.1.2. Plane Couette flow

The setup of plane Couette flow is similar to that of the plane Fourier flow, as is shown in Fig. 4. Rarefied Argon is placed between two infinitely large parallel plates separated by 1 m. Both plates are kept at  $T = 1.0$ , but the upper plate moves at  $v_{\text{plate}} = 0.1$  (normalized against  $v_0$ ). The solid surfaces are treated as diffuse reflectors. We use the same discretization scheme as the Fourier flow, which is 50

Gauss-Hermite points in each spatial direction, and  $N_v = 2500$ . Three cases are considered where  $\text{Kn} = 10.0, 1.0, 0.1$ , respectively. Again, we consider a benchmark case and an extended case, where the separation is increased to 1.2 m, and the lower  $1/6$  of the computational domain is marked by  $\alpha = 0$ .



(a) Benchmark case.



(b) Extended case.

Fig. 4: Computational domain of the plane Couette flow.

Fig. 5 and Fig. 6 show the distribution of  $x$ -velocity (normalized against  $v_0$ ) and shear stress (normalized against  $\rho_0 v_0^2$ ). Note that in the flow region where  $\alpha = 1$ , the extended DVM gives identical results compared to the benchmark cases. In regions where  $\alpha = 0$ , like the case of plane Fourier flow, the final velocity and shear stress are effectively independent of DVM results. Their values are both set to 0 due to the modification scheme in final macroscopic quantities.

### 5.1.3. Cavity with inlet and outlet

We consider a 2D cavity with an inlet and an outlet, as is shown in Fig. 7. At the inlet, gas density and pressure are fixed at unit value. At the outlet, vacuum condition is imposed, which means no molecules can come in. Knudsen number is set to  $\text{Kn} = 1.0$ . The computational domain is divided into two regions  $\mathcal{C}_1$  (white color) and  $\mathcal{C}_2$  (gray color).

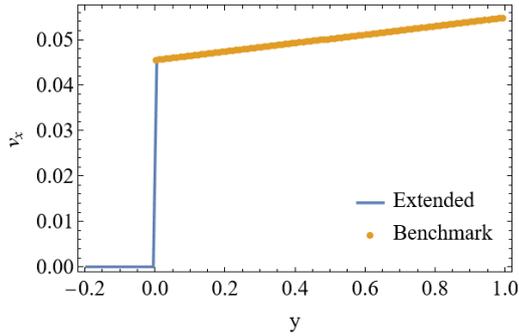
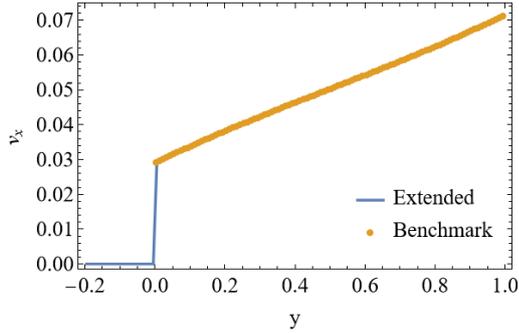
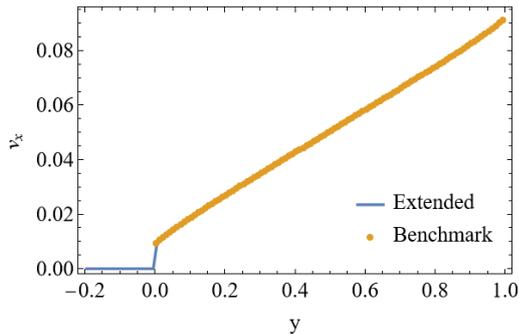
(a)  $\text{Kn} = 10.0$ (b)  $\text{Kn} = 1.0$ (c)  $\text{Kn} = 0.1$ 

Fig. 5:  $x$ -velocity distribution in the plane Couette flow at different  $\text{Kn}$ .

In  $\mathcal{C}_1$ , we set  $\alpha = 1$ . In  $\mathcal{C}_2$ , we consider three cases where  $\alpha = 0, 0.5$  and  $1$ . The distribution of flow velocity is shown in Fig. 10. It can be seen that as  $\alpha$  in  $\mathcal{C}_2$  increases from  $0$  to  $1$ , the velocity in  $\mathcal{C}_2$  gradually increases, until it merges with  $\mathcal{C}_1$  as a whole. The physical domain is discretized by  $100 \times 100$  uniform square cells, and the velocity domain is discretized by the same 2500 Gauss-Hermite points in 2D as in previous cases.

## 5.2. Sensitivity from discrete adjoint system

We use the same 2D cavity problem to demonstrate the validity of design sensitivity obtained from the discrete adjoint system. The discretization schemes in both physical and velocity domains are kept identical. Consider the objective functional  $K$  defined as the flow rate at the inlet. Namely,  $K$  is the average of flow velocity in the  $x$ -direction at  $\Gamma_{\text{in}}$ . In discrete terms,  $K$  is obtained by the average of

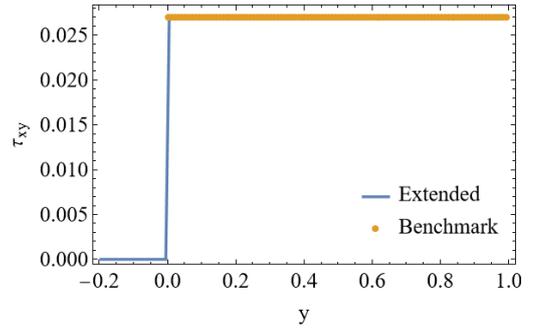
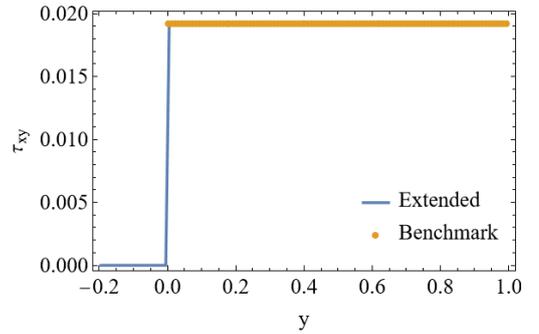
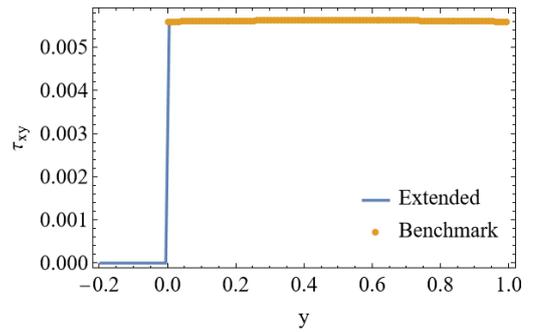
(a)  $\text{Kn} = 10.0$ (b)  $\text{Kn} = 1.0$ (c)  $\text{Kn} = 0.1$ 

Fig. 6: Shear stress distribution in the plane Couette flow at different  $\text{Kn}$ .

$x$ -velocity among all the cells at  $\Gamma_{\text{in}}$ , which are obtained according to Eqn. (17). We consider the case where  $\alpha = 1$  in the computational domain, which means the cavity is filled with rarefied gas. Letting  $\beta = 0$ , we can solve the adjoint equation for  $\Phi$ , and obtain  $\vec{H}$  in every computational cell. The results are shown in Fig. 8.

A comparison of  $\vec{H}$  with its finite difference counterpart  $\vec{H}_{\text{FD}}$  is provided in Fig. 9, where the absolute value of the difference is shown. We can see that the results are in good agreement. The definition of the  $i$ -th element of  $\vec{H}_{\text{FD}}$  is

$$H_{\text{FD},i} = \frac{K(\vec{\alpha} + \epsilon \vec{e}_i) - K(\vec{\alpha})}{\epsilon}, \quad (34)$$

where  $\vec{e}_i$  is the  $i$ -th unit vector, and  $\epsilon$  is a small value, chosen as  $10^{-4}$  in this example.  $\vec{H}_{\text{FD}}$  can be interpreted as a finite difference approximation of the design sensitivity. It is simply the ratio between the change of objective functional

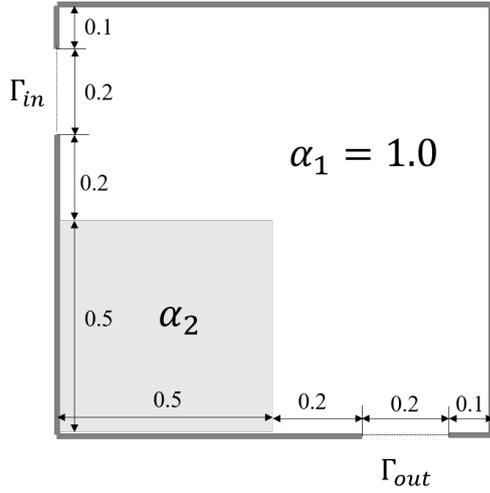


Fig. 7: Computational domain of the cavity flow.

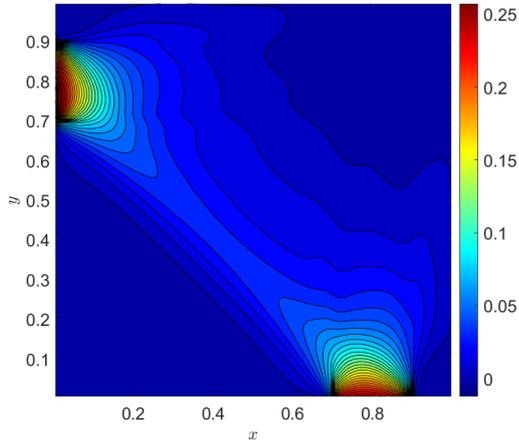


Fig. 8: Sensitivity distribution in the computational domain

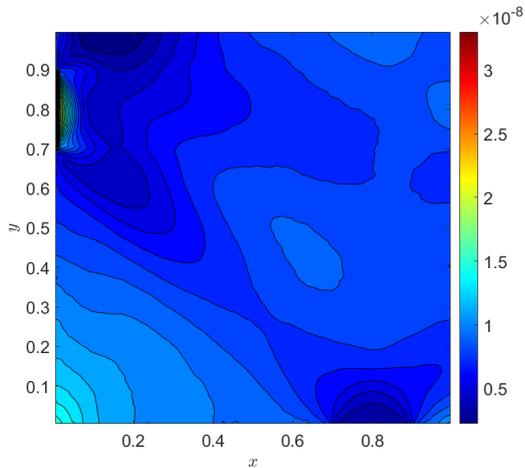


Fig. 9: Error distribution in the computational domain

$K$  and the change in design variable  $\bar{\alpha}$ .

## 6. Conclusion

In this research, material interpolation scheme and sensitivity analysis method is developed for topology optimization of rarefied gas flows. The main results are listed as follows.

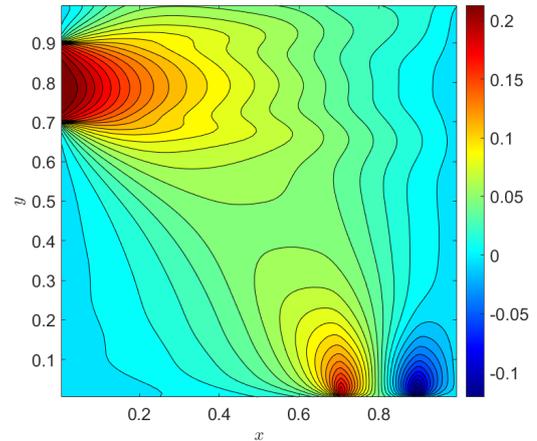
1. Based on the DVM for rarefied gas flows, a material interpolation scheme is proposed, which allows parametrization of solid/fluid distribution in the design domain using a pseudo density. The proposed scheme can be applied for any reflection boundary condition, and does not impair the computational efficiency of standard DVM.
2. A discrete adjoint system is formulated based on functional representation of the extended DVM algorithm and the Lagrangian multiplier method. The adjoint system can be numerically solved by transposing the flux Jacobian.
3. The proposed interpolation scheme and sensitivity analysis method is validated by numerical examples.

The proposed method may serve as the basis for structural optimization of rarefied gas flows.

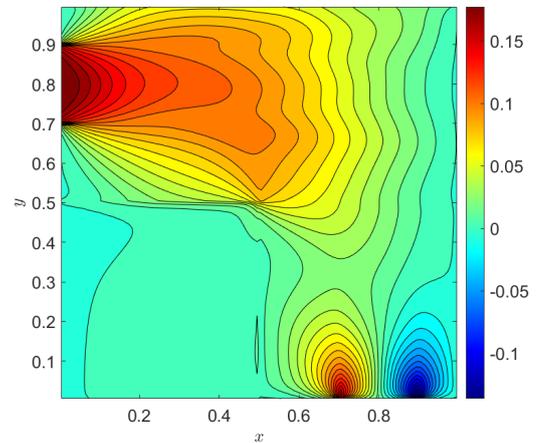
## 参考文献

- (1) Sharipov, F.: Rarefied gas dynamics: fundamentals for research and practice, (2015).
- (2) Takaishi, T and Sensui, Y.: Thermal transpiration effect of hydrogen, rare gases and methane, Transactions of the Faraday Society, **59**(1963), pp. 2503–2514.
- (3) Aristov V.V., Shakhov E.M., Titarev V.A., and Zabelok S.A: Comparative study for rarefied gas flow into vacuum through a short circular pipe, Vacuum, **103** (2014), pp. 5–8.
- (4) Wang Y., Liu S., Zhuo C., and Zhong C.: Investigation of nonlinear squeeze-film damping involving rarefied gas effect in micro-electro-mechanical systems, Computers and Mathematics with Applications, **114**(2022), pp. 188–209.
- (5) Oran, Elaine S., Oh, C.K. and Cybyk, B.Z.: Direct simulation Monte Carlo: recent advances and applications, Annual Review of Fluid Mechanics, **30**(1998), pp. 403–441.
- (6) Alexander, Francis J. and Garcia, Alejandro L.: The direct simulation Monte Carlo method, Computers in Physics, **11**(1997), pp. 588–593.
- (7) Broadwell, James E.: Study of rarefied shear flow by the discrete velocity method, Journal of Fluid Mechanics, **19**(1964), pp. 401–414.

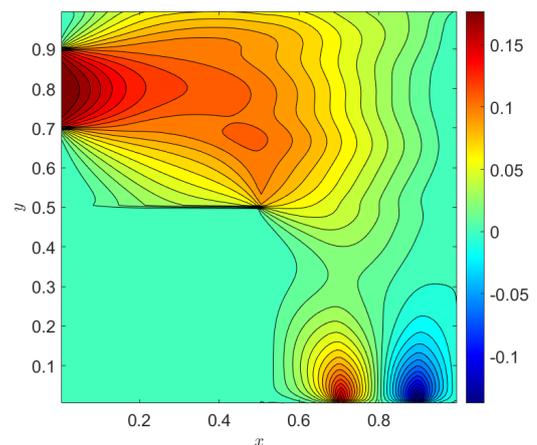
- (8) Yang, LM, Shu, C., Yang, WM., Chen, Z., and Dong, H: An improved discrete velocity method (DVM) for efficient simulation of flows in all flow regimes, *Physics of Fluids*, **30**(2018)
- (9) Shokouhmand, H., Isfahani, AH Meghdadi: An improved thermal lattice Boltzmann model for rarefied gas flows in wide range of Knudsen number, *International communications in heat and mass transfer*, **38**(2011), pp. 1463–1469.
- (10) Zhang Y., Qin R., and Emerson, David R: Lattice Boltzmann simulation of rarefied gas flows in microchannels, *Physical review E*, **71**(2005), pp. 047702.
- (11) Hassan A., Ehsan R, and Stefan S.: A comprehensive review on micro- and nano-scale gas flow effects: Slip-jump phenomena, Knudsen paradox, thermally-driven flows, and Knudsen pumps, *Physics Reports*, **997**(2023), pp. 1–60.
- (12) Bond D.M., Wheatley V., and Goldsworthy M.: Numerical investigation into the performance of alternative Knudsen pump designs, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **93** (2016), pp. 1038–1058.
- (13) Kugimoto K., Hirota Y., Yamauchi T., Yamaguchi H. and Niimi T.: Design and demonstration of Knudsen heat pump without moving parts free from electricity, *Applied Energy*, **250**(2019), pp. 1260–1269.
- (14) Sato A., Yamada T., Izui K., Nishiwaki S., and Takata S.: A topology optimization method in rarefied gas flow problems using the Boltzmann equation *Journal of Computational Physics*, **395**(2019), pp. 60-84.
- (15) Caffisch R., Silantyev D., and Yang Y.: Adjoint DSMC for nonlinear Boltzmann equation constrained optimization, *Journal of Computational Physics*, **439**(2021) pp. 110404.
- (16) Guan K., Matsushima K, Noguchi Y., and Yamada T.: Topology optimization for rarefied gas flow problems using density method and adjoint IP-DSMC, *Journal of Computational Physics*, **474**(2023), pp. 111788.
- (17) Bird, G. A.: *Molecular Gas Dynamics And The Direct Simulation Of Gas Flows*, (1994).
- (18) Zhu L., Pi X., Su W., Li Z.H., Zhang Y., and Wu L.: General synthetic iterative scheme for nonlinear gas kinetic simulation of multi-scale rarefied gas flows, *Journal of Computational Physics*, **430** (2021) pp. 110091.
- (19) Bendsøe, M.P. and Sigmund, O.: Material interpolation schemes in topology optimization, *Archive of Applied Mechanics*, **69**(1999) pp. 635–654.



(a)  $\alpha_2 = 1.0$



(b)  $\alpha_2 = 0.5$



(c)  $\alpha_2 = 0$

Fig. 10:  $x$ -velocity distribution in the cavity when the bottom-left corner is filled with different  $\alpha_2$ .



# 物質パラメータ比が比較的大きな transmission 問題における 2次元 Helmholtz 方程式の高速直接解法に適する積分方程式の考察

## CONSIDERATION OF INTEGRAL EQUATIONS FOR THE FAST DIRECT SOLVER OF THE TWO DIMENSIONAL HELMHOLTZ TRANSMISSION PROBLEMS WITH RELATIVELY HIGH CONTRAST MATERIAL PARAMETER RATIO

松本 安弘<sup>1)</sup>

Yasuhiro MATSUMOTO

1) 東京工業大学学術国際情報センター (〒152-8550 東京都目黒区大岡山 2-12-1-I8-21, E-mail: matsumoto@gsic.titech.ac.jp)

We focused on the transmission problems of the 2D Helmholtz equations and investigated the applicability of the fast direct solver of boundary element method when there is a high contrast material parameter ratio between the interior and exterior domains. For this study, we have proposed a modified version of the Burton-Miller integral equation, which is expected to compute proxy-based interpolation with high accuracy since it has well-suited arrangement of integral operators. A proposed fast direct solver outperforms the conventional method in computational speed. However its numerical accuracy is inferior, and the reasons behind it could not be provided in this study. Additionally, through our numerical experiments, we have highlighted that there might not be any advantages in utilizing the PMCWHT integral equation within the framework of fast direct solvers.

**Key Words:** Fast direct solver, Skeletonization, Proxy method, Boundary integral equation, Helmholtz equation

### 1. 序論

物理現象の数値シミュレーション手法は物理や工学を支える重要な技術であり、手法の適用領域の拡大や効率化は重要な課題である。その数値シミュレーション手法の1つに境界要素法と反復法とを組み合わせた数値解法<sup>(1)</sup>がある。境界要素法は電磁波動散乱問題などの無限領域を含む物理現象のシミュレートにおいて優れた手法であるが、反復法と組み合わせるとその性質上、常に高速なわけではなく問題の条件によっては膨大な計算時間を要する。そのような例としては、前処理法による反復法の収束の加速が難しい場合や、離散化後に得られる線型方程式が同一の係数行列に対して多数の右辺を有する場合は該当する。これらの問題条件であっても高速に求解できるようにするために、反復解法に依存しない高速「直接」解法と境界要素法とを組み合わせた解法が目目されており、様々な手法が<sup>(2, 3, 4)</sup>が提案されている。本研究では実装が簡易な一方で高速である skeletonization<sup>(3)</sup>と呼ばれる手法を用いた高速直接境界要素法を考える。

高速直接境界要素法は発展途上の手法であり、効率や精度

を損なうことなく適用する方法が判明している問題に限られていることが課題である。特に、普遍的な境界条件の1つである transmission 問題における高速直接境界要素法の検討は十分ではない。ここに transmission 問題とは、例えばガラス玉のような透過性の散乱体に入射した光等が反射や屈折等され形成される場を求める問題である。

著者らの研究グループでは高速直接境界要素法を transmission 問題へ適用拡大する方法を検討してきた。skeletonization 法では解法の中で必要となる補間行列の計算を  $O(N^2)$  から  $O(N)$  ( $N$  は未知数の数) へ加速するために proxy 法<sup>(3)</sup>を用いる。ただし transmission 問題の積分方程式においては、proxy 法により複数の積分作用素を1つの補間行列で同時に近似する必要があるため、proxy 法を適切に実行できる作用素配置を持つ積分方程式の適用が重要である。この観点から、散乱体境界の内側と外側の積分作用素が分離されており、proxy 法を破綻なくできる multi-trace 積分方程式を用いることにより、skeletonization を transmission 問題へ拡張する方法を示した<sup>(5)</sup>。その後、multi-trace 積分方程式よりも未知数の数が少ない Burton-Miller の積分方程式を用いた効率のよい手法

を提案し、計算時間の短縮を確認した<sup>(6)</sup>。しかし、Burton-Millerの積分方程式は multi-trace 積分方程式と異なり、散乱体境界の内側と外側の積分作用素が高速直接解法の観点で完全には分離されていない。そのため内外の物質パラメータのコントラスト比が大きき場合には、proxy法の精度の悪化や計算効率の低下が生じる恐れがある。

本研究では2次元 Helmholtz 方程式の transmission 問題を対象とし、対応する積分方程式の1つである Burton-Millerの積分方程式を変形し、散乱体境界の内側と外側の積分作用素を(高速直接解法の観点で)分離した定式化を示す。この変形型 Burton-Millerの積分方程式に基づく高速直接境界要素法を実装し、これまでに提案した手法と数値解の精度等を比較し、比較的高コントラストな物質パラメータの計算条件における適用性を検証する。また通常の Burton-Millerの積分方程式の高速直接境界要素法で用いた proxy法の適用方法<sup>(6)</sup>を広く用いられている PMCHWT 定式化の積分方程式に素朴に応用した場合の解法の性能を合わせて検証し、高速直接解法においては PMCHWT 定式化以外の積分方程式の方が優れた性能を持つことを数値実験により指摘する。

## 2. 定式化

### 2.1. 2次元 Helmholtz 方程式の transmission 問題

2次元 Helmholtz 方程式の2領域 transmission 問題は次の通り定式化される。Fig 1のように、2次元の無限領域( $x = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2$ )の中に滑らかな境界 $\Gamma$ を持つ有界領域の散乱体 $\Omega^-$ を考え、その外部を $\Omega^+$ とする。このとき、 $\Omega^+$ 、 $\Omega^-$ において Helmholtz 方程式

$$\Delta u(x) + (k^+)^2 u(x) = 0, \quad \text{in } \Omega^+$$

$$\Delta u(x) + (k^-)^2 u(x) = 0, \quad \text{in } \Omega^-$$

を満たす解 $u$ を、境界 $\Gamma$ 上での境界条件

$$u^+(x) = u^-(x), \quad \text{on } \Gamma \quad (1)$$

$$q^+(x) = q^-(x), \quad \text{on } \Gamma \quad (2)$$

および、 $\Omega^+$ での散乱波 $u^s = u - u^I$ に対する放射条件のもとで求める問題を考える。ここに、 $u^I$ は入射波であり、 $q^\pm$ は、

$$q^+(x) = \frac{1}{\varepsilon^+} \frac{\partial u^+}{\partial n}(x)$$

$$q^-(x) = \frac{1}{\varepsilon^-} \frac{\partial u^-}{\partial n}(x)$$

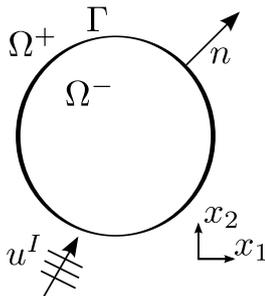


Fig. 1: Domain of transmission problem.

であり、 $\Omega^\pm$ において $k^\pm = \omega\sqrt{\varepsilon^\pm\mu^\pm}$ は波数、 $\omega$ は周波数、 $\varepsilon^\pm$ は比誘電率、 $\mu^\pm$ は比透磁率であり、 $u^\pm$ はそれぞれ $\Omega^\pm$ から $\Gamma$ への $u$ の極限值であり、 $n$ は $\Gamma$ から $\Omega^+$ に向けた単位法線ベクトルとする。

なお本研究では比誘電率と比透磁率はそれぞれの領域にわたって一様であるとした、

### 2.2. 対応する境界積分方程式

節2.1に記述した問題に対応する積分方程式である、multi-trace 積分方程式、Burton-Millerの積分方程式、変形型 Burton-Millerの積分方程式、PMCHWT 定式化の積分方程式を示す。なお本研究では積分方程式は区分一定要素を用いた選点法により離散化した。

#### 2.2.1. multi-trace 積分方程式

multi-trace 積分方程式は、Hiptmair and Hanckes<sup>(7)</sup>により提案された transmission 問題に対応する積分方程式であり、行列表示すると

$$\begin{pmatrix} \mathcal{D}^+ & -\varepsilon^+ \mathcal{S}^+ & -\frac{I}{2} & \\ \frac{1}{\varepsilon^+} \mathcal{N}^+ & -\mathcal{D}^{*+} & & -\frac{I}{2} \\ \frac{I}{2} & & \mathcal{D}^- & -\varepsilon^- \mathcal{S}^- \\ & \frac{I}{2} & \frac{1}{\varepsilon^-} \mathcal{N}^- & -\mathcal{D}^{*-} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^+(x) \\ q^+(x) \\ u^-(x) \\ q^-(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -u^I(x) \\ -\frac{1}{\varepsilon^+} \frac{\partial u^I}{\partial n}(x) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3)$$

のように表される。ここに、 $\mathcal{S}^\pm$ 、 $\mathcal{D}^\pm$ 、 $\mathcal{D}^{*\pm}$ 、 $\mathcal{N}^\pm$ は、それぞれ

$$\begin{aligned} \mathcal{S}^\pm v(x) &= \int_{\Gamma} G^\pm(x-y)v(y) dS_y \\ \mathcal{D}^\pm v(x) &= \int_{\Gamma} \frac{\partial G^\pm(x-y)}{\partial n_y} v(y) dS_y \\ \mathcal{D}^{*\pm} v(x) &= \int_{\Gamma} \frac{\partial G^\pm(x-y)}{\partial n_x} v(y) dS_y \\ \mathcal{N}^\pm v(x) &= \text{p.f.} \int_{\Gamma} \frac{\partial^2 G^\pm(x-y)}{\partial n_x \partial n_y} v(y) dS_y \end{aligned} \quad (4)$$

で定義される層ポテンシャル、 $I$ は恒等作用素であり、 $\frac{\partial}{\partial n_x}$ 、 $\frac{\partial}{\partial n_y}$ はそれぞれ境界 $\Gamma$ 上の $x \in \mathbb{R}^2$ 、 $y \in \mathbb{R}^2$ における法線微分を表し、 $G^\pm$ は

$$G^\pm(x-y) = \frac{i}{4} H_0^{(1)}(k^\pm |x-y|)$$

で表される波数 $k^\pm$ の2次元 Helmholtz 方程式の基本解である。ここに、 $H_m^{(1)}$ は $m$ 次の第1種 Hankel 関数であり、 $i$ は虚数単位である。また、式(4)の積分は発散積分の有限部分の意味である。

skeletonization 法では、行列表示された積分作用素の1行もしくは1列に1つの補間行列を対応させて係数行列の低ランク近似を行う。multi-trace 積分方程式は式(3)の通り、波数の異なる内外の積分作用素が(高速直接解法の観点で)行と列とが分離されている定式化になっており、 $\varepsilon^\pm$ のコント

ラスト比が比較的大きな場合でも, proxy 法で補間行列を破綻なく計算でき, 高速直接境界要素法で得られる数値解の精度が良いと想定される.

なお「積分作用素が行と列とで分離されている」ことはより正確に記述すると「積分作用素を並べた行列の任意の行または列に含まれる作用素は,  $\Gamma$  の内部もしくは外部の波数のどちらかのみから構成されている」ことを意味する. 本論文の以降の部分では, 積分作用素の行と列とでの分離という表現は上記の意味で用いる.

### 2.2.2. Burton-Miller の積分方程式

Burton-Miller の積分方程式は散乱体の外側における解の積分表現に Burton-Miller 法<sup>(8)</sup>を用い, 散乱体の内側における解の積分表現に Green 公式を用い, それぞれを境界  $\Gamma$  へ極限移行し境界条件 (1)-(2) により連立して得られる境界積分方程式である. 行列表示すると

$$\begin{pmatrix} (\mathcal{D}^+ - \frac{I}{2}) + \alpha \mathcal{N}^+ & -\varepsilon^+(S^+ + \alpha(\mathcal{D}^{*+} + \frac{I}{2})) \\ (\mathcal{D}^- + \frac{I}{2}) & -\varepsilon^- S^- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(x) \\ q(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -u^I(x) - \alpha \frac{\partial u^I(x)}{\partial n} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5)$$

となる. ここに  $\alpha$  は Burton-Miller 法の結合定数であり, 本研究では  $i/k^+$  とした. 三澤ら<sup>(9)</sup> は Burton-Miller の積分方程式は定式化により導入される (複素周波数の) 見かけの固有値分布の性質がよいことを指摘しており, 実数周波数において精度の良い解が得られると期待される.

一方で高速直接解法の観点からは, 式 (5) は行方向には外側と内側の積分作用素が分離できているが, 列方向には内外の積分作用素が並んで配置されているため,  $\varepsilon^-/\varepsilon^+$  の比が大きな場合には proxy 法で計算する補間行列がより多くのランクを必要とし計算効率が低下するか, 計算効率の優先によりランクを小さくすると計算精度が悪化するなど proxy 法が破綻する恐れがある.

### 2.2.3. 変形型 Burton-Miller の積分方程式

Burton-Miller の積分方程式 (5) を変形し, 内外の積分作用素の (高速直接解法の観点での) 分離を試みる. 散乱体の内側において境界  $\Gamma$  上の二重層ポテンシャル密度  $\phi$  によって解  $u(x)$  が

$$u(x) = S^- \phi(x) \quad (x \in \Omega^-) \quad (6)$$

と構成できると仮定し, 境界  $\Gamma$  に極限移行した式およびその法線微分

$$u(x) = S^- \phi(x) \quad (7)$$

$$q(x) = (\mathcal{D}^{*-} + \frac{I}{2})\phi(x) \quad (8)$$

を考える. Green 公式に基づく解の積分表現ではなく式 (7)-(8) を用いることが修正点である. 散乱体の外側では通常の Burton-Miller の積分方程式と同様に Burton-Miller 法に基づ

く解の積分表現を  $\Gamma$  に極限移行した

$$\begin{aligned} \left( (\mathcal{D}^+ - \frac{I}{2}) + \alpha \mathcal{N}^+ \right) u(x) + \left( -\varepsilon^+(S^+ + \alpha(\mathcal{D}^{*+} + \frac{I}{2})) \right) q(x) \\ = -u^I(x) - \alpha \frac{\partial u^I(x)}{\partial n} \end{aligned} \quad (9)$$

を用いる. 式 (7)-(9) を境界条件 (1)-(2) により連立することにより変形型 Burton-Miller の積分方程式が得られる. これを行列表示すると

$$\begin{pmatrix} (\mathcal{D}^+ - \frac{I}{2}) + \alpha \mathcal{N}^+ & -\varepsilon^+(S^+ + \alpha(\mathcal{D}^{*+} + \frac{I}{2})) \\ -I & S^- \\ & -I & \frac{1}{\varepsilon^-}(\mathcal{D}^{*-} + \frac{I}{2}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(x) \\ q(x) \\ \phi(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -u^I(x) - \alpha \frac{\partial u^I(x)}{\partial n} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (10)$$

となる. 変形型 Burton-Miller の積分方程式は通常の Burton-Miller の積分方程式と同様, 実数周波数に見かけの固有値はないと考えられる.

式 (10) の左辺から, 行, 列ともに内外の積分作用素の配置が分離できていることがわかる. このため  $\varepsilon^-/\varepsilon^+$  が大きな場合にも multi-trace 積分方程式 (3) と同様に proxy 法を破綻なく実施でき, 通常の Burton-Miller の積分方程式 (5) よりも数値解の精度等で有利であると想定される.

なお一重層ポテンシャル密度  $\phi$  ではなく二重層ポテンシャル密度を用いて解の積分表現を仮定しても変形型 Burton-Miller の積分方程式は定式化可能である. しかしその場合超特異性を持つ二重層ポテンシャルの法線微分  $\mathcal{N}^-$  を計算する必要が生じるため, 本研究では一重層ポテンシャル密度  $\phi$  を用いた.

### 2.2.4. PMCHWT 定式化の積分方程式

PMCHWT 定式化 (Poggio-Miller-Chang-Harrington-Wu-Tsai) の積分方程式<sup>(10)</sup> は transmission 問題に広く用いられている定式化であり, 行列表示すると

$$\begin{pmatrix} \mathcal{D}^+ + \mathcal{D}^- & -(\varepsilon^+ S^+ + \varepsilon^- S^-) \\ \frac{1}{\varepsilon^+} \mathcal{N}^+ + \frac{1}{\varepsilon^-} \mathcal{N}^- & -(\mathcal{D}^{*+} + \mathcal{D}^{*-}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(x) \\ q(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -u^I(x) \\ -\frac{1}{\varepsilon^+} \frac{\partial u^I(x)}{\partial n} \end{pmatrix} \quad (11)$$

となる. この式は 1 つの行, 列の中に波数の異なる内外の積分作用素が分離できていないだけでなく, 内外の積分作用素の和も存在するため, proxy 法を用いた補間行列の計算が適切に実行できないと想定される.

skeletonization のアルゴリズムの中で PMCHWT 定式化の積分方程式の内外の積分作用素を分離する修正を行った場合解法が破綻する<sup>(5)</sup>が, 補間行列のランクが非常に大きくなる可能性を無視すれば, 通常の Burton-Miller の積分方程式 (5) の場合の補間行列の計算法<sup>(6)</sup>を素朴に応用することで skeletonization の実行そのものは可能と考えられる. 本研究ではこの考えに基づき実装した PMCHWT 定式化に基づく高速直接境界要素法を比較対象として用いる.

### 2.3. skeletonization 法

高速直接解法の1つである skeletonization 法の概要について述べる。それぞれの積分方程式を離散化した線型方程式を代表して

$$Ax = f$$

と表すこととする。ここに  $A \in \mathbb{C}^{N \times N}$ ,  $x \in \mathbb{C}^N$ ,  $f \in \mathbb{C}^N$ ,  $N$  は未知数の数である。境界  $\Gamma$  を  $p$  個のセグメントに分割し、1つのセグメントに含まれる選点に対応する未知数の数を  $n$  とすると、 $N = p \times n$  となる。このとき係数行列  $A$  の非対角部分を何らかの行列分解等で構造的に低ランク近似することにより

$$Dx + URVx = f$$

と分解できると仮定する。ここに  $D \in \mathbb{C}^{N \times N}$ ,  $U \in \mathbb{C}^{N \times K}$ ,  $V \in \mathbb{C}^{K \times N}$  はそれぞれそれぞれ  $n \times n$ ,  $n \times k$ ,  $k \times n$  の大きさの対角ブロックのみにエントリを有する行列であり、 $K = p \times k$  ( $k \ll n$ ) である。また  $R \in \mathbb{C}^{K \times K}$  は非対角ブロックのみにエントリを有する行列であり、それぞれの非対角ブロックの大きさはすべて  $k \times k$  である。このときに  $D$ ,  $R$ ,  $VD^{-1}U$  にそれぞれ逆行列が存在するならば線型方程式を圧縮し

$$\tilde{A}y + Ry = \tilde{f} \quad (12)$$

のように変形できる。ここに  $\tilde{A} = (VD^{-1}U)^{-1}$ ,  $y = Vx$ ,  $\tilde{f} = \tilde{A}VD^{-1}f$  である。なお  $R$  の逆行列はエントリを有する(非対角)ブロック行列ごとにも存在する必要がある。

上記の低ランク近似は補間分解<sup>(11)</sup>などにより実行でき、補間分解に基づく高速直接解法は skeletonization と呼ばれる。補間分解を用いると  $U, V$  は補間行列となり、 $R$  を補間してもとの係数行列  $A$  の非対角部分を復元する。

もし行列  $R$  がさらに

$$R = D' + U'R'V'$$

と  $A$  と同様の構造で低ランク近似できるときには、圧縮された線型方程式 (12) は再度圧縮できる。低ランク近似に補間分解を用いた場合には  $R$  は基本解がもつ遠くの境界要素同士の相互作用は滑らかであるという性質を保っているため、再帰的な線型方程式の圧縮が可能である。再帰的な圧縮により十分線型方程式 (12) のサイズが小さくなったとき、LU 分解等により  $y$  を求め、 $y$  を

$$x = (D^{-1} - D^{-1}U\tilde{A}VD^{-1})f + D^{-1}U\tilde{A}y$$

により再帰的にもとの解  $x$  へ復元する。

なお上記の定式化は Martinsson and Rokhlin<sup>(3)</sup> が提案したアルゴリズムそのものではなく、Gillman ら<sup>(12)</sup> が与えた解法の(別の方法による)証明過程に現れる式であり、本研究では上記の定式化を用いて数値計算を実施した。

### 2.4. 各定式化における proxy 法を用いた補間行列の計算法

節 2.3 で必要となる補間行列  $U, V$  の計算のため、係数行列  $A$  の非対角ブロックを(行ブロック, 列ブロックごとに)素

朴に補間分解すると、これには  $O(N^2)$  の計算量が必要である。skeletonization 法全体を  $O(N)$  で実行するために、 $U, V$  の計算を  $O(N)$  に加速する proxy 法<sup>(3)</sup> が用いられる。

proxy 法とは注目する境界セグメントと遠方の境界要素との相互作用を局所的な相互作用を用いて代用する手法である。局所的な相互作用の計算に用いる局所的な仮想境界(とその内部の注目するセグメントの近傍要素を) proxy 境界と呼ぶ。proxy 境界とその内部の境界要素との相互作用の評価方法には任意性がある。本研究では文献<sup>(13)</sup>で用いた手法と同様の考え方で評価し、その要点は次の通りである。

- 行列表示した積分方程式(例えば(3))の係数行列の1つの行, 列ごとに同じ波数の積分作用素のみが含まれるときは次の方法で評価する。
  - 補間行列  $U$  を計算するときには対応する波数の基本解  $G^\pm$  を用いて相互作用を評価する。
  - 補間行列  $V$  を計算するときには対応する波数の層ポテンシャル  $S^\pm$  の離散化版を用いて相互作用を評価する。
  - 上記の相互作用の評価は配置された積分作用素の種類に応じて法線微分を伴って評価する。法線微分の要否判断は考える層ポテンシャルの評価に高速多重極法を用いるとしたら、局所展開や多重極モーメントの計算に法線微分が必要かどうかにより判断する。ただし境界形状が直線に近い場合における補間行列の精度向上のため、 $D^\pm$  や  $D^{*\pm}$  の使用が自然な場合でも  $N^\pm$  を用いる<sup>(5)</sup>。同様に基本解の観測点もしくはソース点における法線微分が必要な場合には観測点とソース点の双方で法線微分して評価する。
  - 上記に該当しないときは行・列に配置された層ポテンシャルをそのまま評価する。

上記の考え方で評価した proxy 境界と注目する境界セグメントとの相互作用を主に列ピボット付き QR 分解により低ランク近似することで補間行列  $U, V$  は計算される。

なお transmission 問題では積分方程式を行列表示した際の行・列ごとにそれぞれ別の補間行列  $U \cdot V$  が必要となる。そのため物質パラメータのコントラスト比が大きな場合には、境界  $\Gamma$  の外側の層ポテンシャルと内側の層ポテンシャルの計算に使用する基本解の波数が異なるため、行・列ごとに同等の精度の補間行列とするために必要なランクも異なると考えられる。そこで本研究では補間行列の計算に用いる補間分解、つまり列ピボット付き QR 分解を通じた低ランク近似時に動的にランクを決定し、積分方程式を行列表示した際の行・列ごとに異なるランクの補間行列を用いることとした。例えば multi-trace 積分方程式(3)の係数行列部は4行×4列となっており、 $j$  番目の行・列の補間行列を  $U_j, V_j$  と表記すると、 $U_1$  のランクと  $U_2, U_3, U_4$  のランクはそれぞれ別にとることができる。ただし式(12)の  $\tilde{A} ((VD^{-1}U)^{-1})$  の逆行列

が存在する必要があるため、同じ  $j$  番目の  $U_j$  のランクと  $V_j$  のランクは等しくなるようにした。また、一度決定した  $j$  番目の  $U_j, V_j$  のランクは同一の圧縮階層では別の境界セグメントに対する補間行列の計算時にも用いた。

動的なランクの決定方法は次の通りである。列ピボット付き QR 分解により計算された三角行列の対角成分の最大値  $r_{\max}$  に対して、三角行列の  $j$  番目の対角成分  $r_j$  との比が  $|r_j|/r_{\max} > \epsilon$  を満たす  $r_j$  の数を補間行列のランクとした。ここに  $\epsilon$  は事前に設定した列ピボット付き QR 分解の許容誤差である ( $\epsilon$  は補間分解の誤差を間接的にコントロールするものであることに注意)。

この動的なランク決定は何らかの意味で精度を合わせた上で定式化ごとの性能を比較することを動機として導入した。実際、過去に実施した計算<sup>(13)</sup>では事前に決めた固定ランクに基づき補間行列  $U_j \cdot V_j$  を計算していたが、物質パラメータ比が大きな場合には Burton-Miller の積分方程式を用いた場合の数値計算精度が multi-trace 積分方程式を用いた場合のそれよりも悪化が激しい場合があった。しかしこのとき Burton-Miller の積分方程式を用いた場合の方が数値計算時間は短かった。そのため列ピボット付き QR 分解の許容誤差に基づき補間行列のランクを  $j$  番目の行・列ごとに動的に決定することにより、skeletonization の数値計算時間を積分方程式の定式化ごとにより正当に比較できるようにした。

### 3. 数値実験

それぞれの積分方程式を用いて実装した高速直接境界要素法の性能を特に  $\epsilon^-/\epsilon^+$  が比較的大きな場合に注目して検証する。検証対象は本論文で新たに提案する変形型 Burton-Miller の積分方程式 (10)(以降 modi. BM と呼称) および、既往の通常の Burton-Miller の積分方程式 (5)(以降 BM と呼称), multi-trace 積分方程式 (3)(以降 multi-trace と呼称), PMCHWT 定式化の積分方程式 (11)(以降 naive PMCHWT と呼称) それぞれの高速直接境界要素法と、通常の Burton-Miller 積分方程式に高速直接解法を用いない LU 分解による解法 (以降 non fast BM と呼称) である。

各数値実験に共通する計算条件は次の通りである。

- 境界形状は半径 2, 原点中心の正円。
- 入射波は  $u^I = e^{ik^+(x_1 \sin 1 - x_2 \cos 1)}$  で表される平面波。
- $\omega = 10, \epsilon^+ = 1, \mu^\pm = 1$ 。
- 比較対象の参照解は平面波を円周上で Bessel 関数を用いて級数展開し、各次数の Bessel 関数入射波に対する解析解を重ね合わせ構成した。級数展開には 60 次の Bessel 関数まで用いた。

また共通する計算環境は次の通りである。

- 筑波大学のスーパーコンピュータ Pegasus システム (CPU: Intel Xeon Platinum 8468, 2.1GHz/48 コア) を用いた。
- 線型代数演算ライブラリとして Eigen<sup>(14)</sup> を用いた。

- それぞれの数値計算にはプロセッサとして CPU 1 コアのみを使用し、MPI, OpenMP 等による並列化および Eigen 内部の CPU コア並列実行機能は使用していないが、Eigen 内部の SIMD 演算機能は用いた。

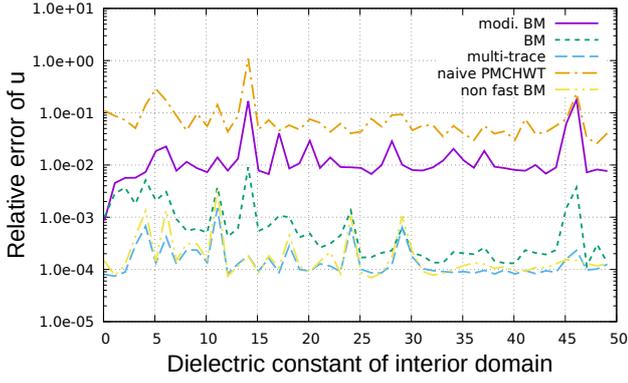
なお数値解の相対精度および計算時間は境界値の計算に関するものであり、内点計算は行っていない。また問題のサイズは定式化ごとに異なる未知数の数ではなく、選点法による離散化後の選点の数により議論する。

#### 3.1. 物質パラメータのコントラスト比を広範囲に変化させたときの計算結果

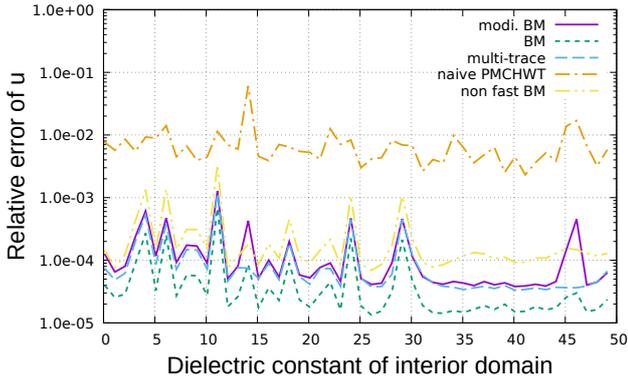
物質パラメータのコントラスト比の変化に対する各積分方程式を用いた高速直接解法の応答を俯瞰できるように、内側領域の比誘電率  $\epsilon^-$  を 0.1 から 50 付近まで変化させ計算を実施した。選点の数は高速直接解法を用いた場合は 12800, 用いない場合 (non fast BM) は計算時間の都合から 3200 とした。また補間分解時の列ピボット付き QR 分解の許容誤差  $\epsilon$  は  $10^{-8}$  と  $10^{-12}$  の 2 通りとした。

Fig. 2(a) に  $\epsilon = 10^{-8}$  としたときの参照解に対する各解法の数値解の  $u$  部分の相対誤差, Fig. 2(b) に  $\epsilon = 10^{-12}$  としたときの参照解に対する各解法の数値解の  $u$  部分の相対誤差をそれぞれ示す。相対誤差は離散化に用いた選点上でそれぞれ参照解の値を計算した参照解ベクトル  $u_{\text{ref}}$  と数値解ベクトル  $u$  との間の Euclid ノルム相対誤差として求めた。これ以降の計算を含め、 $q$  の相対誤差は  $u$  のそれと傾向が同じであったため図を省略した。なお、高速化なしの場合の各積分方程式の精度は今回の計算条件では  $\text{BM} > \text{modi. BM} = \text{multi-trace} > \text{PMCHWT}$  の順であったことを参考として付記しておく。これらの transmission 問題に対応した各積分方程式の (複素) 固有値に影響を受けない波数での精度を包括的に比較議論した文献は著者の知る限りでは見当たらない。Fig. 2(a), 2(b) から、各高速直接解法は  $\epsilon$  を  $10^{-8}$  から  $10^{-12}$  へ減少させることにより数値解の相対誤差を減少させることができているとわかる。non fast BM は解法の過程で補間分解を実行しないため変化していない。ただし、本研究で新たに提案した modi. BM は想定と異なり、常に BM よりも相対誤差が大きい結果となった。特に  $\epsilon = 10^{-12}$  においては BM は proxy 法を高精度に実行できると想定された multi-trace と modi. BM の双方よりも相対誤差が小さい。現段階ではこの理由を説明する考察ができていないが、補間行列のランクを固定していた過去の計算<sup>(13)</sup>の際の挙動とは異なり、少なくとも本研究の計算条件では BM は列ピボット付き QR 分解の許容精度を調整し補間行列のランクを動的に決定することで、物質パラメータのコントラスト比が大きな場合でも数値解の精度を維持することができた。

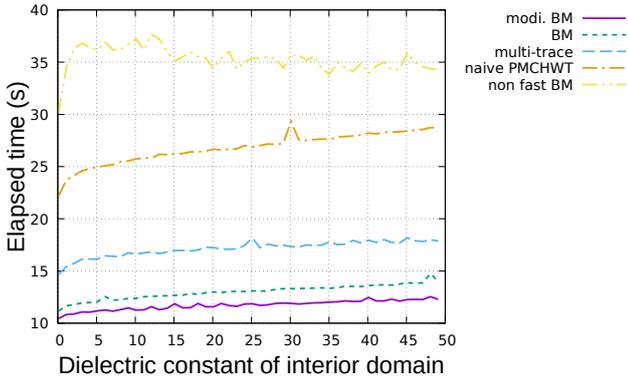
Fig. 2(c) に示す  $\epsilon = 10^{-12}$  のときの計算時間をみると、各高速直接解法の計算速度は  $\text{modi. BM} > \text{BM} > \text{multi-trace} > \text{PMCHWT}$  の順であることがわかる。BM よりも modi. BM の方が計算速度が速い理由は、補間行列の計算時に proxy 法で評価する相互作用の計算および列ピボット QR 分解の計算



(a) Relative error for  $\epsilon = 10^{-8}$ .



(b) Relative error for  $\epsilon = 10^{-12}$ .



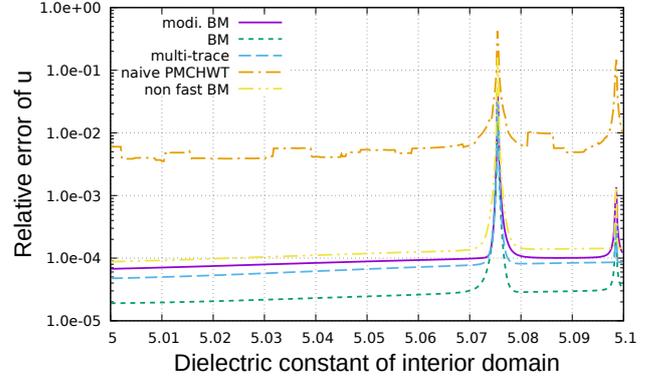
(c) Elapsed time for  $\epsilon = 10^{-12}$ .

Fig. 2:  $\epsilon^-$  vs. relative error or elapsed time over  $\epsilon^- = 0.1$  to about  $\epsilon^- = 50$ . Plot intervals are 1. Number of collocation points is 12800 excluding non fast BM. Number of collocation points of non fast BM is 3200.

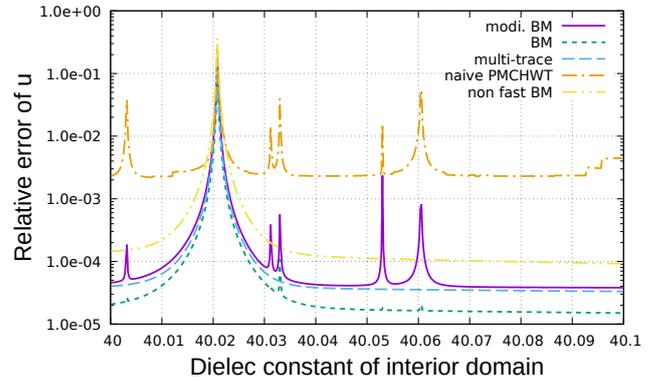
が少なく済むためである。また高速直接解法の計算速度は  $\epsilon^-$  の増加に伴って増加していることがわかる。これは  $\epsilon^-$  の増加に伴い、動的に決定する(内側領域に対応する)補間行列のランクが増加したためである。このとき、proxy法を高精度に実行できる積分作用素配置を有すると考えられる modi. BM(と multi-trace)は、BMに比較し物質パラメータのコントラストの増大に伴う計算時間の増加がわずかではあるが緩やかになっており、計算時間の意味では今回提案した modi. BMのBMに対する優位性が確認できる。

なお naive PMCHWTは他の手法に数値解の相対誤差が1桁から2桁程度劣り、 $\epsilon$ を  $10^{-8}$ から  $10^{-12}$ に変更したときの相対誤差の改善も小さかった。これは想定通り proxy法により適切に補間行列を計算することができていないためと考えられる。さらに、Fig. 2(c)からわかる通り常に他の積分方程式を用いた解法より計算時間も長い。

### 3.2. コントラスト比の微小な変化に対する計算結果



(a)  $\epsilon^- = 5.0$  to  $\epsilon^- = 5.1$ .



(b)  $\epsilon^- = 40.0$  to  $\epsilon^- = 40.1$ .

Fig. 3: Relative error of  $u$  over narrow ranges of  $\epsilon^-$ . Plot intervals are 0.0002. Number of collocation points is 12800 excluding non fast BM. Number of collocation points of non fast BM is 3200.

物質パラメータのコントラスト比を微小に変化させたときの各積分方程式を用いた高速直接解法の応答を調べた。コントラスト比の微小な変化に対して各手法の数値解が non fast BMと同等の滑らかさで推移するか検証するため、内側領域の比誘電率  $\epsilon^-$  が5付近と40付近のときの数値計算を実施した。この数値実験により、物質パラメータの微小な変化に対して skeletonization法の結果が急に变化していないかを確認することができ、解法の信頼性に関する情報が得られる。選点の数は前節と同様に高速直接解法を用いた場合は12800、用いない場合(non fast BM)は計算時間の都合から3200とした。また補間分解時の列ピボット付きQR分解の許容誤差は  $\epsilon = 10^{-12}$ のみとした。

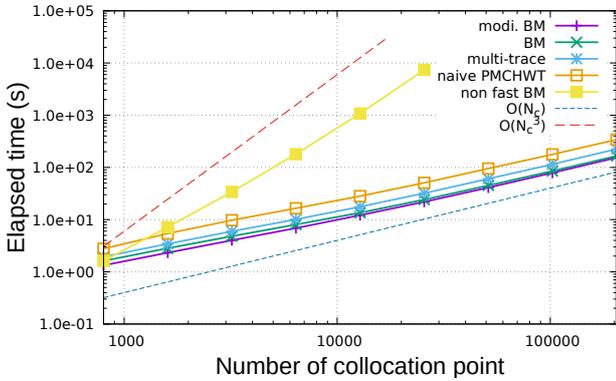
Fig. 3(a)に  $\epsilon^- = 5$ 付近における数値解の  $u$ 部分の相対誤

差を示す。modi. BM, BM, multi-trace は高速解法なしの non fast BM と同等の数値解の推移となっている。一方で naive PMCHWT は例えば  $\varepsilon^- = 5.01$  付近で数値解の相対誤差の推移が滑らかではなく、その他の箇所でもところどころで不連続的に推移している。また  $\varepsilon^- = 5.07$  から  $5.08$  等における相対誤差の悪化は、積分方程式の周波数に関する非ゼロの小さな虚部を持つ複素固有値の影響と考えられる<sup>(15)</sup>。

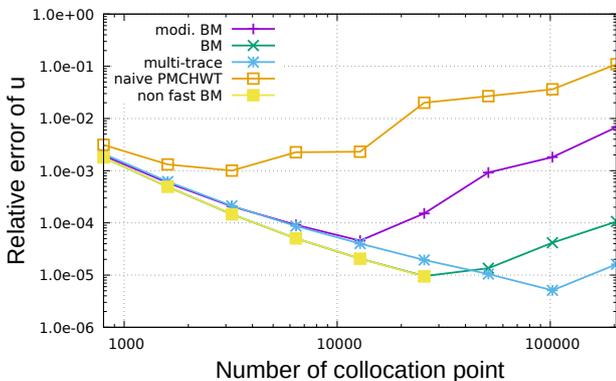
次に Fig. 3(b) に  $\varepsilon^- = 40$  付近における数値解の  $u$  部分の相対誤差を示す。  $\varepsilon^- = 5$  のときと異なり、non fast BM と同様に数値解の相対誤差が滑らかに推移するのは multi-trace のみであった。modi. BM, BM, naive PMCHWT は  $\varepsilon^- = 40.003$  や  $40.032$  付近で相対誤差が悪化した。この悪化は non fast BM には見られないため、proxy 法による近似評価が原因であると考えられる。また、naive PMCHWT は  $\varepsilon^- = 40.09$  から  $40.1$  にかけて相対誤差の推移が滑らかではない(不連続的になっている)箇所がある。

### 3.3. 時間複雑性の検証

最後に、提案手法の高速解法としての性能を確認する。内側領域の比誘電率を  $\varepsilon^- = 40$  とし、補間分解時の列ピボット付き QR 分解の許容誤差は  $\epsilon = 10^{-12}$  のみとした。選点の数  $N_c$  を変化させたときの計算時間の推移を Fig. 4(a) に、数値解  $u$  の相対誤差の推移を Fig. 4(b) にそれぞれ示す。non fast BM の数値計算は計算時間の都合から  $N = 25600$  までとした。



(a)  $N_c$  (number of collocation point) vs. Elapsed time.



(b)  $N_c$  (number of collocation point) vs. relative error of  $u$ .

Fig. 4: Elapsed time and relative error with  $\varepsilon^- = 40$ .

Fig. 4(a) から、提案手法である modi. BM を含むすべての高速直接解法が  $O(N_c)$  程度の時間複雑性の計算性能を示したことがわかる。計算速度は常に modi. BM > BM > multi-trace > PMCHWT の順であり、modi. BM が最も速かった。modi. BM が未知数の数がより少ない BM よりも高速な理由は前述と同様に補間行列の計算時に proxy 法で評価する相互作用の計算および列ピボット QR 分解の計算が少なくて済むためである。各高速直接解法は  $O(N_c)$  よりも小さな時間複雑性を示しているように見えるが、これは Eigen が線型代数演算の実行時に AVX2 などの SIMD 演算命令を内部で使用し、CPU の 1 コアをより効率的に用いたためと考えられる。

比較対象として用いた non fast BM は  $O(N_c^2)$  と  $O(N_c^3)$  の中間の時間複雑性の計算性能に見えるが、これは解法の計算時間が  $O(N_c^2)$  の離散化された層ポテンシャルの積分評価と、 $O(N_c^3)$  の LU 分解の合計となっており、 $N_c$  が小さいときには層ポテンシャルの積分評価の方が計算時間を要するためである。

一方、Fig. 4(b) から、提案手法である modi. BM は想定と反し BM よりも数値解の相対誤差が大きいことがわかる。 $N_c = 25600$  までは BM は modi. BM や multi-trace よりも数値解の相対誤差が小さく、ほぼ non fast BM と同等の精度であった。

しかしながら各高速直接解法は  $N_c$  を大きくするに従い、数値解の相対誤差を小さくできなくなる箇所が存在する。例えば modi. BM では  $N_c = 25600$  以降の相対誤差が増加している。multi-trace は最も大きな  $N_c$  まで精度を維持できているものの、 $N_c = 204800$  以降は悪化した。これは補間分解を用いると式 (12) における  $R$  を構成する補間点の位置が境界セグメント端部に偏るためであり、多階層に線型方程式を圧縮する際にその偏りが顕著になり、もとの行列を復元するために必要な情報が欠落してしまうためであると考えられる。数値解の悪化原因は補間分解アルゴリズムだけでなく、 $N_c$  を圧縮階層数を増やすことにより増加させるという本節で用いた実装も補間点の偏りをより助長する原因の 1 つである。この改善には例えば木構造におけるリーフェルに含まれる要素数を増加させ、線型方程式を圧縮する level の数を減らすことなどの対策が実行可能であるが、根本的には補間点の選定法の改善が必要と考えられる。

本節の計算においても、naive PMCHWT は計算時間の意味でも数値計算精度の意味でも他の高速直接解法に劣っており、本研究で実施した数値計算すべてで有用性を見出すことができなかった。

## 4. 得られた知見の総括と今後の課題

本研究では 2 次元 Helmholtz 方程式の transmission 問題を対象とし、内外の物質パラメータのコントラスト比が大きな場合の高速直接境界要素法の適用性を検証した。検証にあたり、積分作用素の配置が高速直接解法に必要な proxy 法の観点で性質がよく、proxy 法による補間を高精度に実行できると推定される変形型 Burton-Miller の積分方程式を新たに

提案した.

新たに提案した変形型 Burton-Miller の積分方程式を用いた高速直接解法は, 計算速度で通常の Burton-Miller の積分方程式を用いた高速直接解法を上回ったものの, 数値解の精度では通常の Burton-Miller の積分方程式を用いた高速直接解法に当初の想定と異なり劣った. ただし提案手法は multi-trace 積分方程式を用いた高速直接解法と同程度の数値解の精度は有しており, 適用そのものに問題はないと考えられる. 本研究では通常の Burton-Miller の積分方程式を用いた高速直接解法の数値計算精度に提案手法および multi-trace 積分方程式を用いた高速直接解法の数値計算精度が劣る理由を説明できておらず, また要素数を増加させたときの計算精度の低下も問題であり, proxy 法の適用方法や補間点の選定法等にまだ課題があると推定される.

また本研究では, 広く用いられる PMCWHT 定式化の積分方程式は高速直接解法では他の積分方程式を用いた手法よりも計算時間と数値解の精度の双方で劣ることを数値実験により指摘した.

さらに multi-trace 積分方程式を用いた高速直接解法は, 物質パラメータを微小に変化させたときに数値解が proxy 法の影響を最も受けにくいことを数値的に確かめた.

今後, より広い分野に高速直接解法を適用可能とするためには, 各種問題における proxy 法の適用方法の考察を進めることが必要である. 実際 proxy 法は経験的な手法であり, その最適な適用方法は明らかになっていない. 一方, 今回用いた skeletonization 以外にも効率がよいとされる高速直接解法は存在する. その1つである randomized SVD<sup>(16)</sup>に基づく ULV 分解型の高速直接解法<sup>(4)</sup>を用いた場合における変形型 Burton-Miller の積分方程式と通常版のそれとの数値解精度の比較なども意義があると考えられる. また海外の研究グループ (例えば<sup>(17, 18)</sup> など) が skeletonization 法で transmission 問題を解く際によく用いる Rokhlin-Muller 型の間接型積分方程式<sup>(19)</sup>の適用性も調べる必要があると考える. なぜなら Rokhlin-Muller 型の間接型積分方程式は PMCHWT 定式化の積分方程式と同様, 波数の異なる積分作用素の和の計算が必要であり, proxy 法を効率よく実行できない可能性があるためである.

## 謝辞

本研究は JSPS 科研費 JP23K19972 の助成を受けた.

## 参考文献

- (1) Naoshi Nishimura. Fast multipole accelerated boundary integral equation methods. *Applied mechanics reviews*, Vol. 55, No. 4, pp. 299–324, 2002.
- (2) Timothy Paul Pals. Multipole for scattering computations: Spectral discretization, stabilization, fast solvers. *Ph.D. thesis of University of California Santa Barbara*, 2004.
- (3) Per-Gunnar Martinsson and Vladimir Rokhlin. A fast direct solver for boundary integral equations in two dimensions. *Journal of Computational Physics*, Vol. 205, No. 1, pp. 1–23, 2005.
- (4) Shiv Chandrasekaran, Ming Gu, and Timothy Pals. A fast ULV decomposition solver for hierarchically semiseparable representations. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, Vol. 28, No. 3, pp. 603–622, 2006.
- (5) 松本安弘, 西村直志. 2次元 Helmholtz 方程式の transmission 境界値問題の高速直接解法について. 計算数理工学論文集, Vol. 16, pp. 97–102, 2016.
- (6) 松本安弘, 西村直志. 2次元 Helmholtz 方程式の1周期 transmission 問題に対する Burton-Miller の定式化を用いた高速直接解法. 計算数理工学論文集, Vol. 19, pp. 73–78, 2019.
- (7) Ralf Hiptmair and Carlos Jerez-Hanckes. Multiple traces boundary integral formulation for helmholtz transmission problems. *Advances in Computational Mathematics*, Vol. 37, No. 1, pp. 39–91, 2012.
- (8) AJ Burton and GF Miller. The application of integral equation methods to the numerical solution of some exterior boundary-value problems. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, Vol. 323, No. 1553, pp. 201–210, 1971.
- (9) 三澤亮太, 西村直志. 見かけの複素固有値の分布に基づいた2次元 Helmholtz 方程式の transmission 問題における単一境界積分方程式法の考察. 計算数理工学論文集, Vol. 16, pp. 73–78, 2016.
- (10) Weng Cho Chew, Eric Michielssen, JM Song, and Jian-Ming Jin. *Fast and efficient algorithms in computational electromagnetics*. Artech House, Inc., 2001.
- (11) Hongwei Cheng, Zydrunas Gimbutas, Per-Gunnar Martinsson, and Vladimir Rokhlin. On the compression of low rank matrices. *SIAM Journal on Scientific Computing*, Vol. 26, No. 4, pp. 1389–1404, 2005.
- (12) Adrianna Gillman, Patrick M Young, and Per-Gunnar Martinsson. A direct solver with  $O(N)$  complexity for integral equations on one-dimensional domains. *Frontiers of Mathematics in China*, Vol. 7, pp. 217–247, 2012.
- (13) 松本安弘. 周期波動 transmission 問題に対する境界要素法の高速直接解法. 京都大学博士論文, 2020.
- (14) Gaël Guennebaud, Benoît Jacob, et al. Eigen v3. <http://eigen.tuxfamily.org>, 2010.
- (15) Ryota Misawa, Kazuki Niino, and Naoshi Nishimura. Boundary integral equations for calculating complex

- eigenvalues of transmission problems. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, Vol. 77, No. 2, pp. 770–788, 2017.
- (16) Nathan Halko, Per-Gunnar Martinsson, and Joel A Tropp. Finding structure with randomness: Probabilistic algorithms for constructing approximate matrix decompositions. *SIAM review*, Vol. 53, No. 2, pp. 217–288, 2011.
- (17) Leslie Greengard, Kenneth L Ho, and June-Yub Lee. A fast direct solver for scattering from periodic structures with multiple material interfaces in two dimensions. *Journal of Computational Physics*, Vol. 258, pp. 738–751, 2014.
- (18) Adrianna Gillman and Alex Barnett. A fast direct solver for quasi-periodic scattering problems. *Journal of Computational Physics*, Vol. 248, pp. 309–322, 2013.
- (19) Vladimir Rokhlin. Solution of acoustic scattering problems by means of second kind integral equations. *Wave Motion*, Vol. 5, No. 3, pp. 257–272, 1983.



# A generalized exact volume constraint method for the topology optimization based on the nonlinear reaction-diffusion equation

Yi CUI<sup>1)</sup>, Sungmin YOON<sup>3)</sup>, Shaojie GUI<sup>2)</sup>, Toru TAKAHASHI<sup>4)</sup>, Toshiro MATSUMOTO<sup>5)</sup>

1) Nagoya University	(〒 464-8603	Furo-cho, Chikusa-ku, Nagoya,	E-mail: yi.cui@mae.nagoya-u.ac.jp)
2) Nagoya University	(〒 464-8603	Furo-cho, Chikusa-ku, Nagoya,	E-mail: yoon.sungmin.v8@f.mail.nagoya-u.ac.jp)
3) Nagoya University	(〒 464-8603	Furo-cho, Chikusa-ku, Nagoya,	E-mail: gu.shaojie.e7@f.mail.nagoya-u.ac.jp)
4) Nagoya University	(〒 464-8603	Furo-cho, Chikusa-ku, Nagoya,	E-mail: toru.takahashi@mae.nagoya-u.ac.jp)
5) Nagoya University	(〒 464-8603	Furo-cho, Chikusa-ku, Nagoya,	E-mail: t.matsumoto@nuem.nagoya-u.ac.jp)

From an intuitive perspective, exact boundary representation emerges as the most favorable approach for topology optimization of structural systems based on the finite element method (FEM). Under exact boundary representation, the material domain can be precisely defined, granting the flexibility to impose arbitrary boundary conditions on newly generated boundaries throughout the optimization process. This newfound capability is achieved through the recently introduced exact volume constraint method, which effectively addresses the convergence challenges associated with exact boundary representation. However, one key consideration that has not yet been explored is the potential nonlinearity of the reaction-diffusion equation governing the evolution of the level set function. Consequently, the primary objective of this study is to expand upon the proposed topology optimization methodology, which incorporates exact boundary representation, to account for nonlinear aspects of the reaction-diffusion equation. Subsequently, we will conduct a comparative analysis of the results obtained using various proportional constants denoted as  $K$  in relation to the level set function  $\phi$ .

**Key Words:** Exact boundary representation, Volume constraint, Topology optimization, Topological derivative, Finite element method

## 1. Introduction

In the realm of modern manufacturing processes, structural topology optimization has assumed a pivotal role, courtesy of the relentless advancement in computer technology. The SIMP (Solid Isotropic Material with Penalization) method, a well-entrenched approach in topology optimization<sup>(1,2)</sup>, employs density distribution to interpolate material constants. In its numerical implementation, a nonzero lower bound for Young's modulus is prescribed to avert singularities when solving the stress equilibrium equation. To mitigate the limitations stemming from the pronounced grayscale issues inherent to the original SIMP method, Yamada et al. introduced the level-set method, particularly one based on solving the Reaction Diffusion Equation (RDE)<sup>(3)</sup>. This approach has subsequently gained traction as an appealing alternative for addressing a spectrum of topology optimization challenges<sup>(4,5,6,7,8,10)</sup>. Notably, topol-

ogy optimizations involving updated body-fitted meshes<sup>(6,7,8)</sup> have demonstrated success by adopting variations of the augmented Lagrangian method for volume-constrained problems. Nonetheless, in the aforementioned studies, it remains essential to employ mesh structures within the void domain, coupled with the imposition of a nonzero lower bound, to circumvent singularity issues in solving the stress equilibrium equation. As we have demonstrated and compared in the appendix of our recent work<sup>(10)</sup>, this approach can indeed achieve convergence, even when utilizing the conventional (inexact) volume constraint method. This stability is attributed to the presence of a nonzero lower bound within the void domain, akin to the SIMP method, which serves to stabilize the optimization process. In stark contrast to the prevailing body-fitted remeshing paradigm, the attainment of exact boundary representation (where no mesh is assigned within the void domain) has remained an elusive goal. Additionally, it is worth noting that the widely adopted topological derivative<sup>(12)</sup> for sensitivity analysis should ideally be

coupled with exact boundary representation, given its premise of hole insertion rather than density distribution. The challenge of achieving exact boundary representation likely stems from the adoption of the conventional (inexact) volume constraint method<sup>(13, 14, 15)</sup>. In contrast, the recently proposed exact method for volume constraint<sup>(10)</sup> has enabled such convergence under the exact boundary representation. However, in the prior work<sup>(10)</sup>, the feasibility of achieving exact boundary representation while considering a nonlinear RDE has yet to be investigated. On the other hand, there have already been a handful of well-established works on RDE-based topology optimization<sup>(11, 3)</sup> by applying conventional volume constraint methods. Therefore, the primary objective of this study is to extend the proposed topology optimization methodology with exact boundary representation to accommodate the nonlinear RDE, and subsequently, compare the outcomes obtained with different proportional constants  $K$  as a function of the level set function  $\phi$ .

## 2. Methodology

To perform the structural topology optimization, first we define the level-set function  $\phi$ . The following level set function  $\phi$  is introduced to represent the material domain  $\Omega$ , the material boundary  $\partial\Omega$  and the complementary void domain  $D\setminus\Omega$ :

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

A characteristic function as defined below is necessary in performing the volume integration.

$$\chi_\phi = H(\phi) = \begin{cases} 0 & \text{if } \phi < 0, \\ 1 & \text{if } \phi \geq 0. \end{cases} \quad (2)$$

The minimum compliance problem by considering the level set function  $\phi(\mathbf{x}) \in [-1, 1]$  as a spatial function inside the design domain can be formulated as follows:

$$\inf_{\phi} F(\phi) = l(\mathbf{u}), \quad (3)$$

$$\text{subject to } a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = l(\mathbf{v}), \quad (4)$$

$$\text{and } G(\phi) = \int_D \chi_\phi \, d\Omega - V_{\text{req}} \leq 0. \quad (5)$$

The weak form of the governing equation reads

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) := \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) : \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}) \, d\Omega, \quad (6)$$

$$l(\mathbf{v}) := \int_{\Gamma_N} \mathbf{t} \cdot \mathbf{v} \, d\Gamma. \quad (7)$$

Here  $D$  is the design domain,  $V_{\text{req}}$  is the volume constraint,  $\mathbf{u}$  is the displacement,  $\mathbf{v}$  is the virtual displacement,  $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})$  is the corresponding total strain,  $\mathbb{C}$  is the fourth-order elasticity tensor and the vector  $\mathbf{t}$  is the given external boundary load. Since the boundary

representation becomes exact, the same weak form is based on the reconstructed material domain  $\Omega$ :

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) : \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}) \, d\Omega = \int_{\Gamma_N} \mathbf{t} \cdot \mathbf{v} \, d\Gamma. \quad (8)$$

Once  $K$  depends on  $\phi$ , the nonlinear boundary value problem to update the level set function is as follow.

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi}{\partial t} = K(\phi)(-\bar{\mathcal{T}} + \Lambda + \tau \nabla^2 \phi) & \text{in } D, \\ \frac{\partial \phi}{\partial n} = 0 & \text{on } \partial D \setminus \partial \Gamma_N, \\ \phi = 1 & \text{on } \partial \Gamma_N. \end{cases} \quad (9)$$

Here  $t$  is the fictitious time,  $K(\phi)$  is the coefficient of proportionality,  $\tau$  is a regularization parameter for the fictitious interface energy, and  $\mathcal{T}$  stands for the topological derivative and can be expressed as:

$$\mathcal{T} = -\boldsymbol{\sigma} : \mathbb{P} : \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (10)$$

The normalized topological derivative can be expressed as:

$$\begin{cases} \bar{\mathcal{T}} = C_0 \mathcal{T}, \\ C_0 = \frac{\int_D d\Omega}{2 \int_D |\mathcal{T}| d\Omega}. \end{cases} \quad (11)$$

The polarization tensor  $\mathbb{P}$  for the plane stress case can be found, for example, in Lopes et al.<sup>(12)</sup>

$$\mathbb{P} = \frac{1}{1 + \nu} \left( 2\mathbb{I} - \frac{1 - 3\nu}{2(1 - \nu)} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} \right). \quad (12)$$

Verification has been made by comparing the above topological derivative with the corresponding result from the direct FEM calculation. During the numerical implementation, it is the normalized topological derivative  $\bar{\mathcal{T}}$  that has been used.

Our finite element analysis has been carried out by FreeFEM++,<sup>(16, 17)</sup> and it is an open-source software package that requires formulating the weak form of governing equation to carry out the finite element simulation. As for the remeshing process, the open-source software package Mmg has been employed. For illustration, the design domain  $D$ , the material domain  $\Omega$  and the void domain  $D\setminus\Omega$  are shown in Fig. 1, alongside the geometry and boundary conditions.

### 2.1. The augmented Lagrangian method for volume-constrained problems<sup>(13, 14, 15, 18)</sup>

For the nonlinear RDE, the Augmented Lagrangian for volume-constrained problems, as referred as the conventional (inexact) method, for the current step  $t_{n+1} = t + \Delta t$ , is formulated as:

$$\Lambda_{n+1} = \begin{cases} \frac{1}{V} (q_n + r_n G_n) & \text{if } G_n \geq -\frac{q_n}{r_n} \\ 0 & \text{if } G_n < -\frac{q_n}{r_n} \end{cases} \quad (13)$$

The positive scalar  $q$  is the Lagrange multiplier for the inequality constraint,  $r$  is the penalty parameter, and  $\eta$  is a normalization factor introduced to stabilize the results of sensitivity analysis. It should be

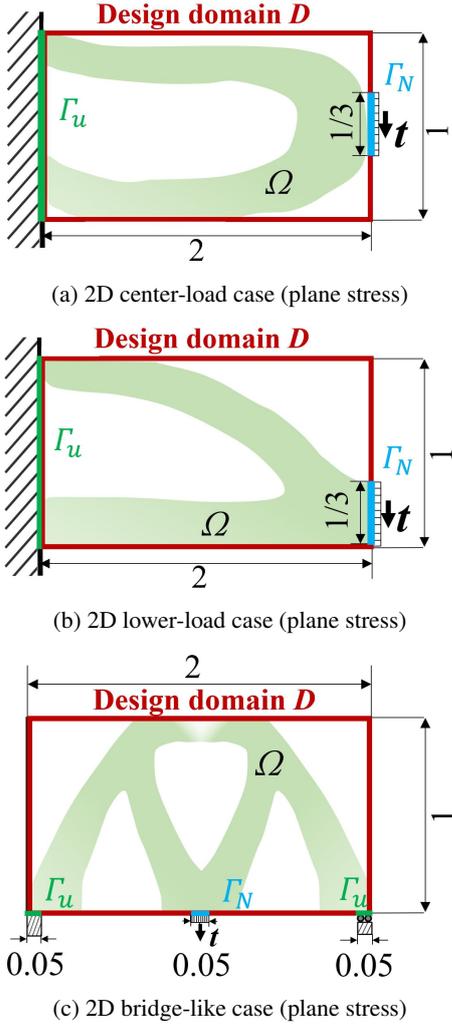


Fig. 1: The schematic of 2D minimum compliance problems. The magnitude of the boundary traction is 10 kPa. The Young modulus is 70 GPa, and the Poisson ratio is 0.33. For the level set function,  $\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0$  on  $\partial D \setminus \Gamma_N$  and  $\phi = 1$  on  $\Gamma_N$

noted that all above parameters are from the previous optimization step  $t_n$ :

$$G_n = \int_D \chi(\phi_n) d\Omega - V_{\text{req}}. \quad (14)$$

Only after knowing the current  $\Lambda_{n+1}$  (and hence  $\phi_{n+1}$ ) can all other parameters be updated as follows to be used in the next optimization step. Given the initial values of the two parameters and the constant  $\gamma$  are  $q_1 = 0$ ,  $r_1 = 0.1$  or  $0.2$  and  $\gamma = 1.025$ , they are updated in the optimization process by:

$$\begin{cases} q_{n+1} = q_n + r_n \max(G_n, -q_n/r_n), \\ r_{n+1} = \gamma r_n. \end{cases} \quad (15)$$

## 2.2. The exact volume constraint method<sup>(10)</sup>

In contrast to the inexact method, our proposed exact volume constraint method is virtually parameter-free. The pivotal idea of

the exact volume constraint method is to split the original RDE into two terms by letting:

$$\phi = \phi^* + \Lambda \hat{\phi}. \quad (16)$$

Once split,  $\phi^*$  within the interval from  $t$  to  $t + \Delta t$  is governed by:

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi^*}{\partial t} = K(\phi|_t)(-\bar{T} + \tau \nabla^2 \phi^*) & \text{in } D, \\ \frac{\partial \phi^*}{\partial n} = 0 & \text{on } \partial D \setminus \partial \Gamma_N, \\ \phi^* = 1 & \text{on } \partial \Gamma_N, \\ \phi^*|_t = \phi|_t. \end{cases} \quad (17)$$

By subtracting Eq. (17) from the original RDE Eq. (9), after the elimination of  $\Lambda$ ,  $\hat{\phi}$  satisfies the following initial boundary value problem:<sup>(10)</sup>

$$\begin{cases} \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial t} = K(\phi|_t)(1 + \tau \nabla^2 \hat{\phi}) & \text{in } D, \\ \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial n} = 0 & \text{on } \partial D \setminus \partial \Gamma_N, \\ \hat{\phi} = 0 & \text{on } \partial \Gamma_N, \\ \hat{\phi}|_t = 0. \end{cases} \quad (18)$$

Given that  $K(\phi|_t)$  remains unchanged from time  $t$  to  $t + \Delta t$ , the division of  $\phi$  into two terms with their respective governing equations remains unaffected. The volume constraint can then be viewed as an implicit equation for  $\Lambda$ :

$$g(\Lambda) = \int_D \chi_{\phi(\Lambda)} d\Omega - V_{\text{req}} = 0. \quad (19)$$

For Eq. (19), Newton-Raphson iteration is needed to find  $\Lambda^{(10)}$ . In the beginning of the optimization loop, as required to calculate the volume integration, a smoothed Heaviside function capable of converging to the rigorous Heaviside function has been adopted. Instead of an invariantly smoothed Heaviside function, a stepwise one is adopted:

$$H(\phi) = \frac{1}{2} \tanh(k\phi) + \frac{1}{2}. \quad (20)$$

In the numerical implementation, we simply let  $k = n^q + 1$  ( $q = 0.5$ ) at the  $n$ th time step. Besides, all other conditions, such as the use of the smoothed Heaviside function have been made identical in the comparison between the two volume constraint methods. The flowchart to implement the topology optimization by updating  $\phi$  without (Loop 1) and with (Loop 2) the reconstruction of the domain  $\Omega$  is shown in Fig. 2. The level set function from using the coarse mesh in Loop 1 has been interpolated onto the fine mesh in Loop 2. The introduction of Loop 1 aims to reduce the remeshing cost. For both loops, a convergence criterion below is adopted for  $\phi$  (0.01 for loop 1 and 0.02 for loop 2):

$$\|\phi|_{t+\Delta t} - \phi|_t\|_{L^\infty} < \epsilon_\phi. \quad (21)$$

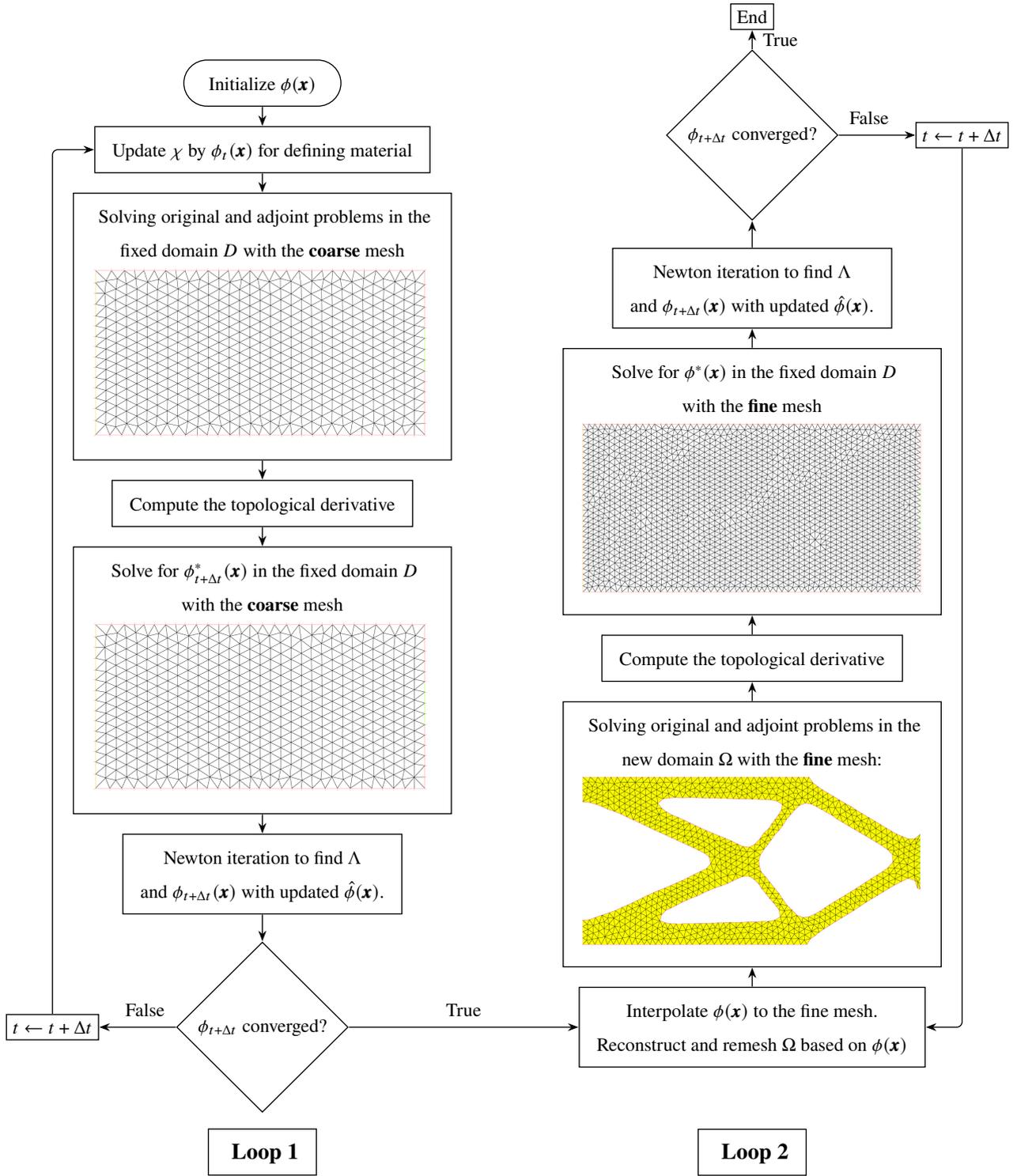


Fig.2: Flowchart of the two-loop approach. For stress analysis, Loop 1 (left) adopts a fixed mesh, while Loop 2 (right) reconstructs and remesh the material domain. The difference from <sup>(10)</sup> is that the RDE for  $\hat{\phi}$  needs to be solved per each optimization step.

### 3. Results and discussions

In this section, we will examine and discuss the results of topology optimization, comparing the outcomes obtained through both the inexact and the exact volume constraint methods introduced in the preceding section. For all cases, the initial structure is a uniformly distributed characteristic function  $\chi$ .

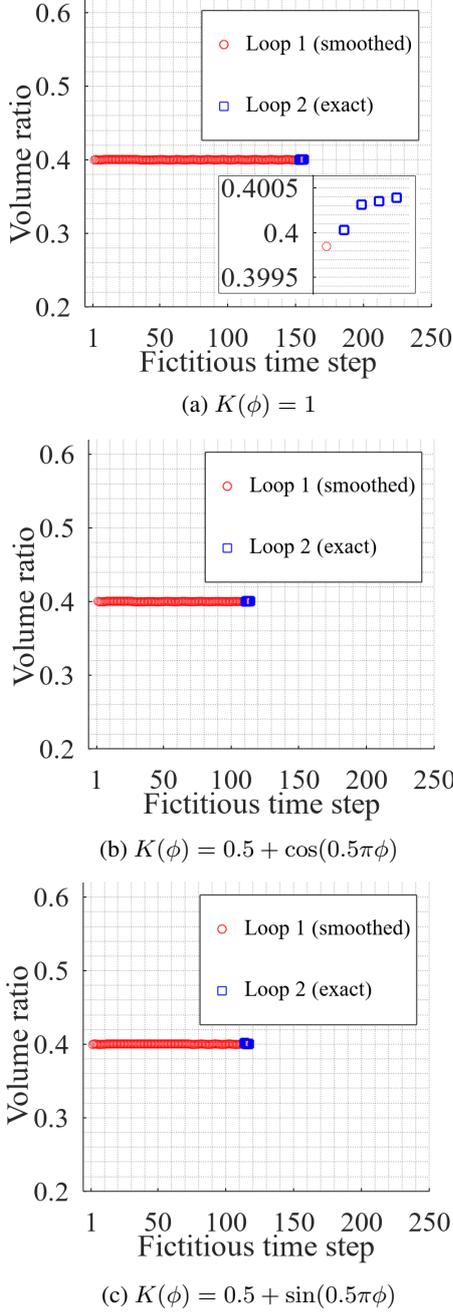


Fig. 3: Volume ratio by using the exact volume constraint method for the center-load case considering three different  $K(\phi)$

For the center-load case, as depicted in Fig. 3, the exact volume constraint method consistently maintains the material volume ratio within the design domain at precisely 0.4, meeting the specified relative error tolerance of 0.001 during Loop 1. It's important to note that the material volume ratio in Loop 1 includes a certain degree

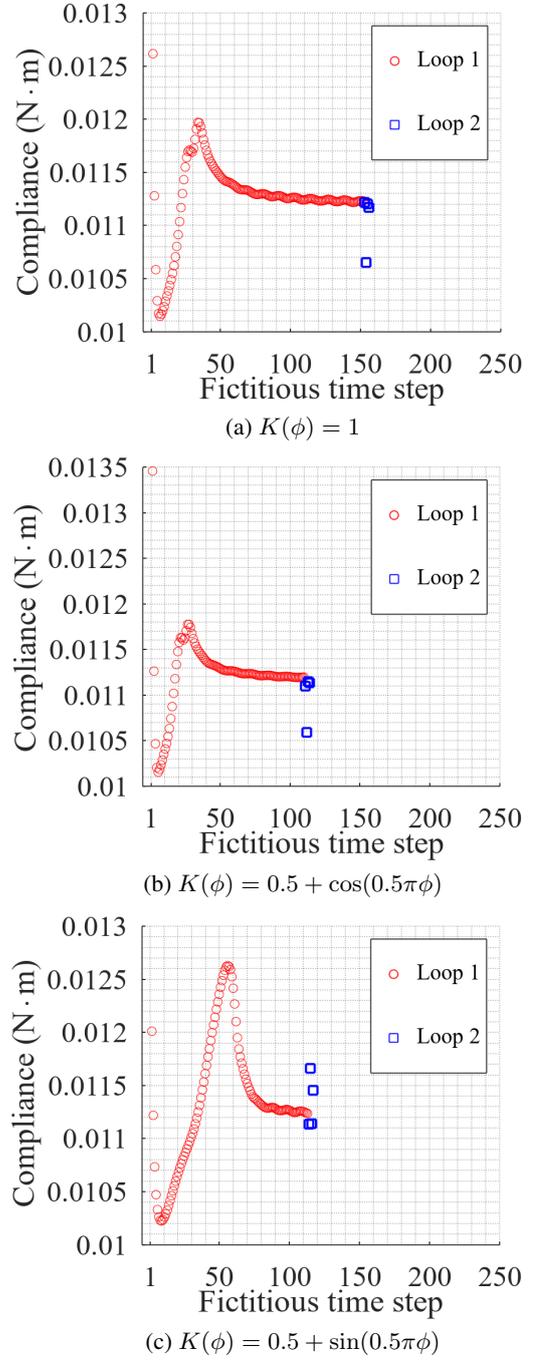


Fig. 4: Structural compliance by using the exact volume constraint method for the center-load case considering three different  $K(\phi)$

of grayscale, which neither represents material nor void. During Loop 2, the grayscale is eliminated through material domain reconstruction and remeshing, resulting in an exact material volume ratio. The remeshing process only marginally increases the actual relative error tolerance compared to Loop 1. This demonstrates the validity of our proposed exact volume constraint method for nonlinear RDE, even though the governing equation for  $\hat{\phi}$  must be solved for each optimization step. Regarding the structural compliance in Fig. 4, the initially low value before step 50 is attributed to the significant grayscale presence. Among different  $K(\phi)$  values, the convergence is slowest when  $K = 1$ , while the other two converge

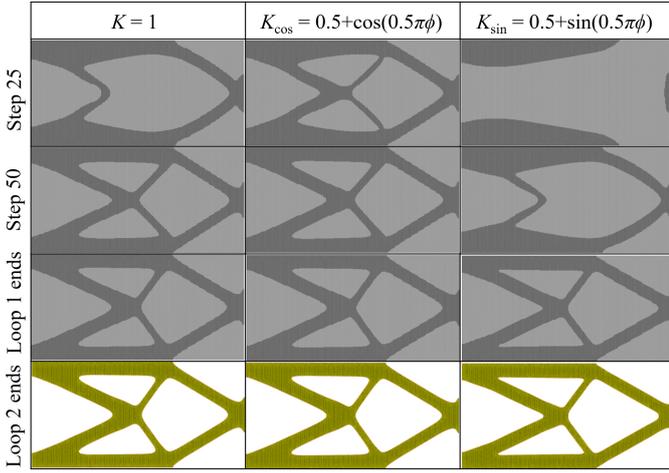


Fig. 5: Structural change during optimization by using the exact volume constraint method for the center-load case considering three different  $K(\phi)$

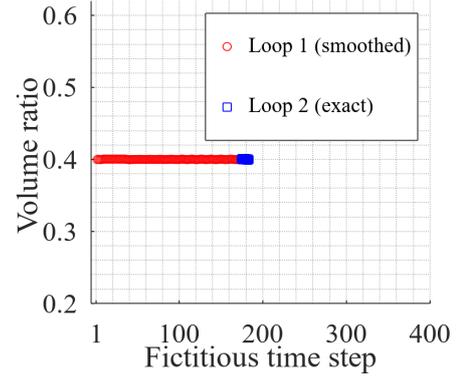
at a similar rate. For the structural changes during optimization in Fig. 5, when  $K = 1$  and  $K(\phi) = 0.5 + \cos(0.5\pi\phi)$ , the structure at step 50 closely resembles the final converged structure in Loop 1. However, the emergence of the structure is slowest when using  $K(\phi) = 0.5 + \sin(0.5\pi\phi)$ . Comparing the final optimized structures, the upper and lower triangular openings in the case of  $K(\phi) = 0.5 + \sin(0.5\pi\phi)$  are noticeably wider than those in the other two cases.

The lower-load case, as depicted in Fig. 6, demonstrates that our proposed exact method for volume constraint is valid regardless of the boundary conditions. Regarding structural compliance in Fig. 7, the initially low value before step 50 can be attributed to the significant grayscale presence. Among the different  $K(\phi)$  values,  $K(\phi) = 0.5 + \cos(0.5\pi\phi)$  results in faster convergence, while  $K(\phi) = 0.5 + \sin(0.5\pi\phi)$  results in the slowest convergence.

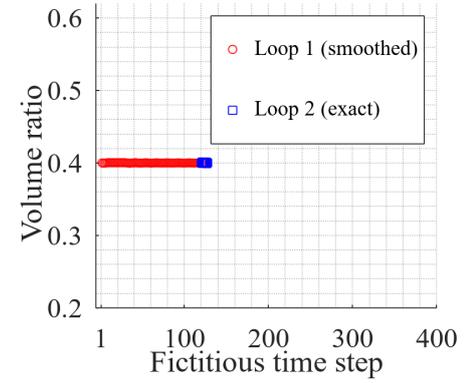
In the context of structural changes during optimization in Fig. 8, both  $K = 1$  and  $K(\phi) = 0.5 + \cos(0.5\pi\phi)$  lead to a structure at step 50 that closely resembles the final converged structure in Loop 1. Conversely, the emergence of the structure is slowest when using  $K(\phi) = 0.5 + \sin(0.5\pi\phi)$ . When comparing the final optimized structures, the upper triangular opening in the case of  $K(\phi) = 0.5 + \sin(0.5\pi\phi)$  is notably wider than in the other two cases. Additionally, in Fig. 8, more holes are visible in the case of  $K(\phi) = 0.5 + \sin(0.5\pi\phi)$ .

The bridge-like case, as depicted in Fig. 9, once again demonstrates that our proposed exact method for volume constraint is valid regardless of the boundary condition. Regarding structural compliance in Fig. 10, the initially low value before step 50 can be attributed to the significant grayscale presence. Among different  $K(\phi)$  values,  $K(\phi) = 0.5 + \cos(0.5\pi\phi)$  results in fastest convergence, while  $K(\phi) = 0.5 + \sin(0.5\pi\phi)$  results in the slowest convergence. When considering structural changes during optimization in Fig. 11, the slowest emergence of the structure occurs when using

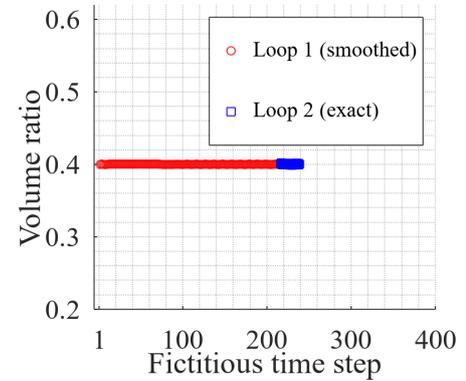
$K(\phi) = 0.5 + \sin(0.5\pi\phi)$ , and its final optimization result slightly differs from the other two.



(a)  $K(\phi) = 1$



(b)  $K(\phi) = 0.5 + \cos(0.5\pi\phi)$

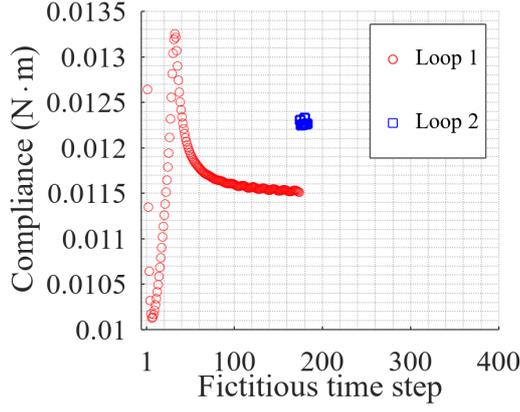


(c)  $K(\phi) = 0.5 + \sin(0.5\pi\phi)$

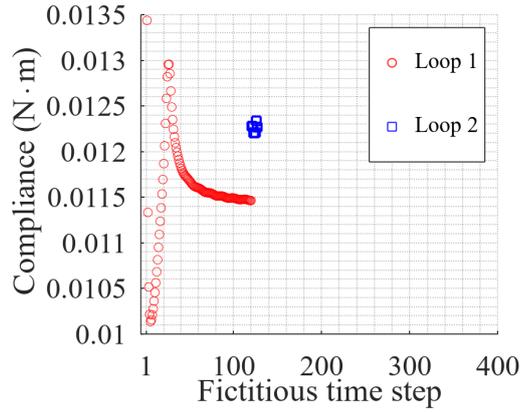
Fig. 6: Volume ratio by using the exact volume constraint method for the lower-load case considering three different  $K(\phi)$

The results obtained using the conventional volume constraint method, referred to as the 'inexact method,' will be examined hereafter. The center-load case, as observed in Fig. 12, highlights a problem with the inexact method for volume constraint during Loop 2, where achieving convergence during the reconstruction and remeshing of the material domain becomes challenging. In Loop 2, both  $K(\phi) = 0.5 + \cos(0.5\pi\phi)$  and  $K(\phi) = 0.5 + \sin(0.5\pi\phi)$  exhibit significant fluctuations in both Fig. 12 and Fig. 13.

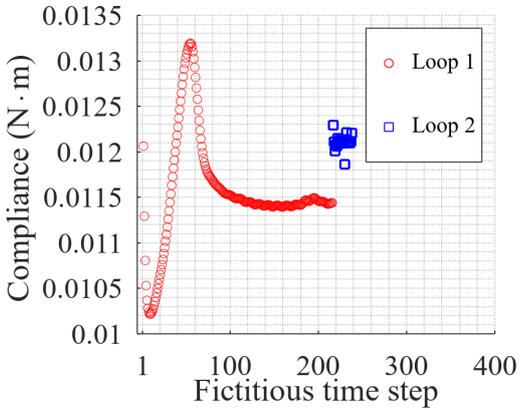
When considering structural changes during optimization in Fig.



(a)  $K(\phi) = 1$



(b)  $K(\phi) = 0.5 + \cos(0.5\pi\phi)$



(c)  $K(\phi) = 0.5 + \sin(0.5\pi\phi)$

Fig. 7: Structural compliance by using the exact volume constraint method for the lower-load case considering three different  $K(\phi)$ .

14, the slowest emergence of the structure occurs when using  $K(\phi) = 0.5 + \sin(0.5\pi\phi)$ , and regardless of the choice of  $K(\phi) = 0.5 + \cos(0.5\pi\phi)$ , convergence remains elusive during Loop 2. This difficulty in achieving convergence during Loop 2 is inherent to the inexact method for volume constraint, as it operates as an explicit forward time-stepping method and faces challenges when dealing with void domains without mesh.

The lower-load case, as observed in Fig. 15, highlights a problem

with the inexact method for volume constraint during Loop 2, where achieving convergence during the reconstruction and remeshing of the material domain becomes challenging. In Loop 2, both  $K(\phi) = 0.5 + \cos(0.5\pi\phi)$  and  $K(\phi) = 0.5 + \sin(0.5\pi\phi)$  exhibit significant fluctuations in both Fig. 15 and Fig. 13. When considering structural changes during optimization in Fig. 17, the slowest emergence of the structure occurs when using  $K(\phi) = 0.5 + \sin(0.5\pi\phi)$ , and regardless of the choice of  $K(\phi) = 0.5 + \cos(0.5\pi\phi)$ , convergence remains elusive during Loop 2.

The bridge-load case, as observed in Fig. 18, once again, shows that the inexact method for volume constraint can be problematic during Loop 2. In Loop 2, both  $K(\phi) = 1$  and  $K(\phi) = 0.5 + \cos(0.5\pi\phi)$  exhibit significant fluctuations in both Fig. 18 and Fig. 19. When considering structural changes during optimization in Fig. 20, the slowest emergence of the structure occurs when using  $K(\phi) = 0.5 + \sin(0.5\pi\phi)$ , and regardless of the choice of  $K(\phi) = 0.5 + \cos(0.5\pi\phi)$ , convergence remains elusive during Loop 2. This difficulty in achieving convergence during Loop 2 is inherent to the inexact method for volume constraint, as it operates as an explicit forward time-stepping method and faces challenges when dealing with void domains without mesh.

#### 4. Conclusions

In the context of topology optimization using the exact volume constraint method, we conducted a more extensive investigation considering nonlinear RDE. Our findings indicate that the exact volume constraint remains valid regardless of the choice of  $K(\phi)$ , and the differences among different  $K(\phi)$  options are negligible. The disparity between the FEM mesh used for stress equilibrium and that employed for the reaction-diffusion equation (RDE) of the level set function may be responsible for the convergence issue. As the inexact volume constraint method operates similarly to an explicit time-stepping scheme, instability accumulates within the optimization loop. In this regard, the new exact volume constraint method can stabilize the overall optimization process and is thus more likely to achieve convergence.

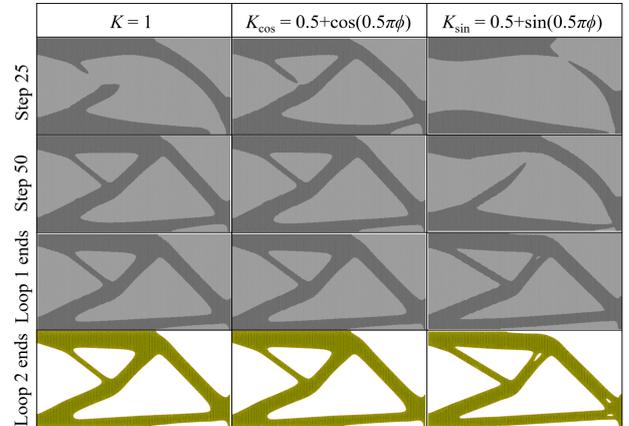
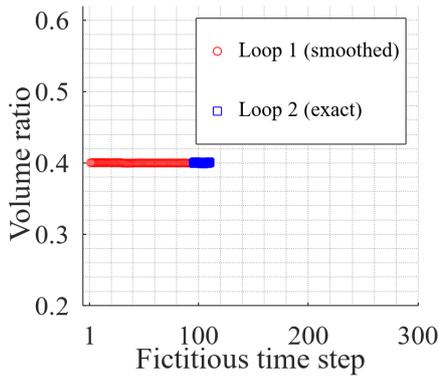
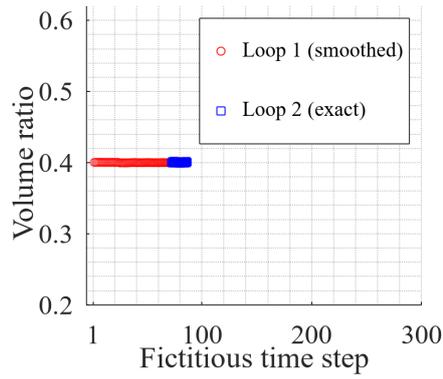


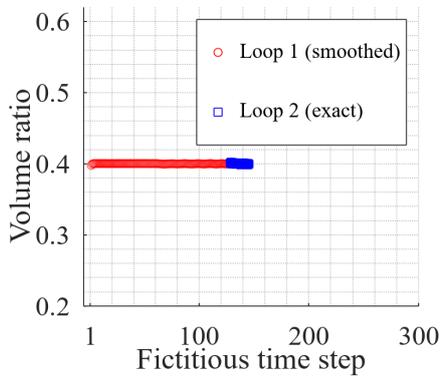
Fig. 8: Structural change by the exact volume constraint method for the lower-load case.



(a)  $K(\phi) = 1$

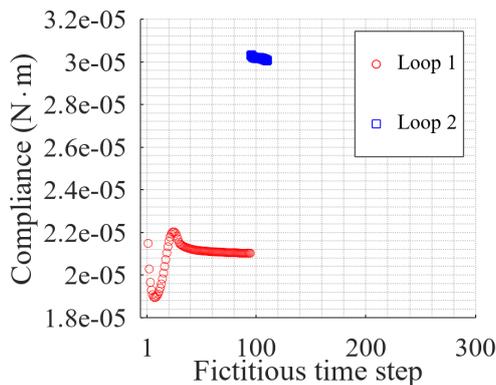


(b)  $K(\phi) = 0.5 + \cos(0.5\pi\phi)$

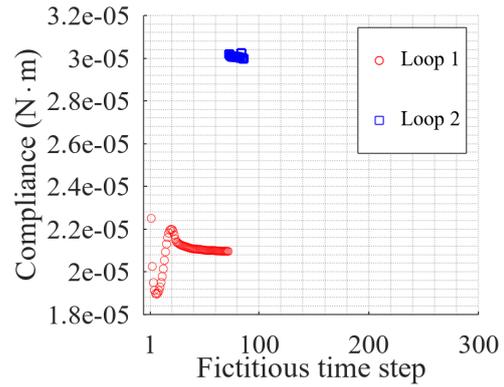


(c)  $K(\phi) = 0.5 + \sin(0.5\pi\phi)$

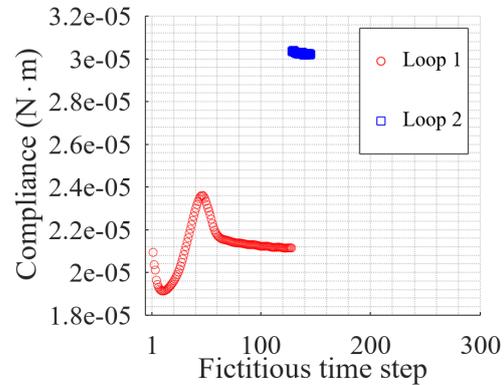
Fig. 9: Volume ratio by the exact volume constraint method for the bridge-like case.



(a)  $K(\phi) = 1$



(b)  $K(\phi) = 0.5 + \cos(0.5\pi\phi)$



(c)  $K(\phi) = 0.5 + \sin(0.5\pi\phi)$

Fig. 10: Structural compliance by using the exact volume constraint method for the bridge-like case considering three different  $K(\phi)$ .

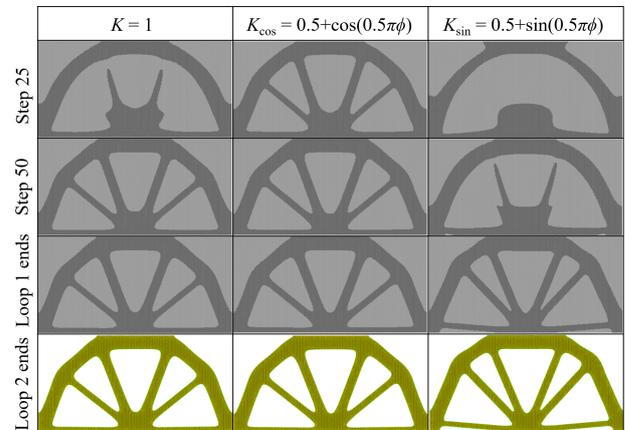
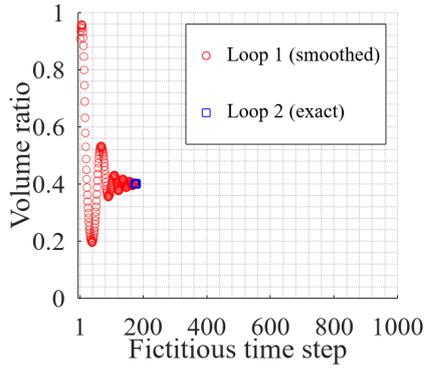
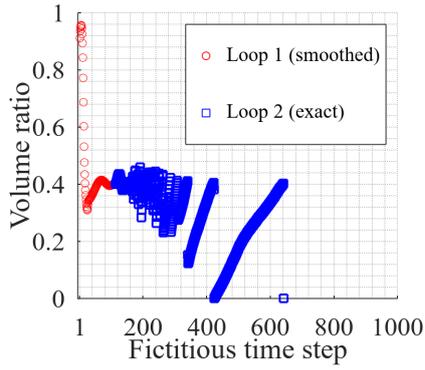


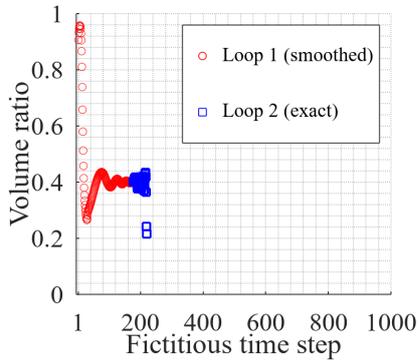
Fig. 11: Structural change during optimization by using the exact volume constraint method for the bridge-like case considering three different  $K(\phi)$



(a)  $K(\phi) = 1$

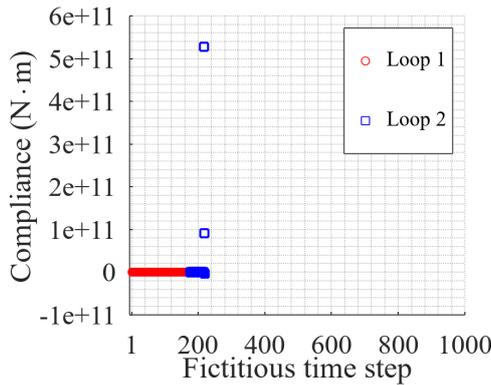


(b)  $K(\phi) = 0.5 + \cos(0.5\pi\phi)$

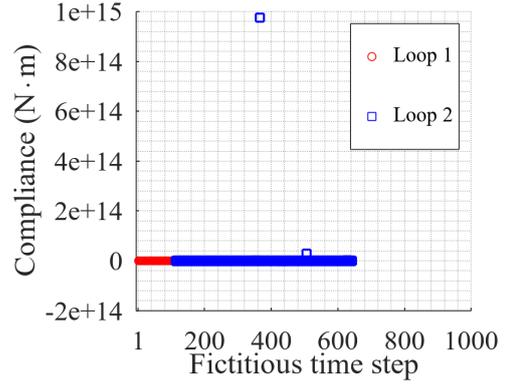


(c)  $K(\phi) = 0.5 + \sin(0.5\pi\phi)$

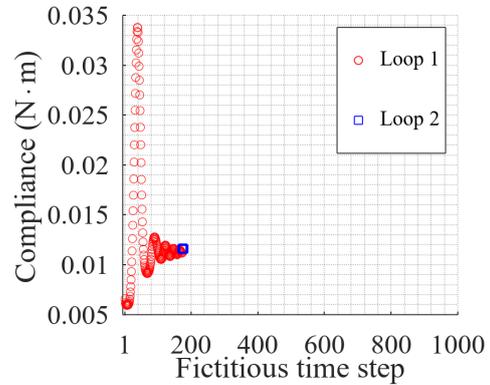
Fig. 12: Volume ratio by using the inexact volume constraint method for the center-load case considering three different  $K(\phi)$



(a)  $K(\phi) = 1$



(b)  $K(\phi) = 0.5 + \cos(0.5\pi\phi)$



(c)  $K(\phi) = 0.5 + \sin(0.5\pi\phi)$

Fig. 13: Structural compliance by using the inexact volume constraint method for the center-load case considering three different  $K(\phi)$

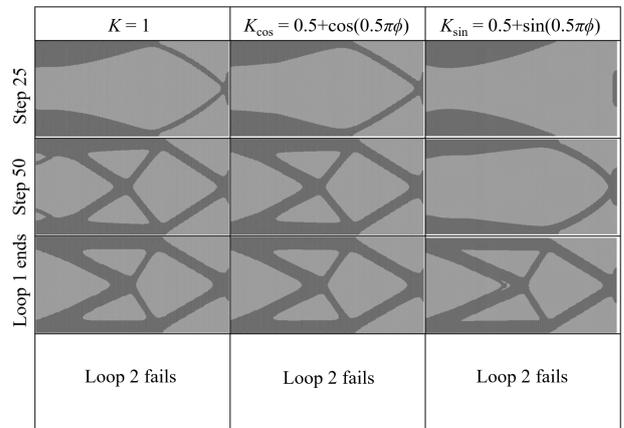
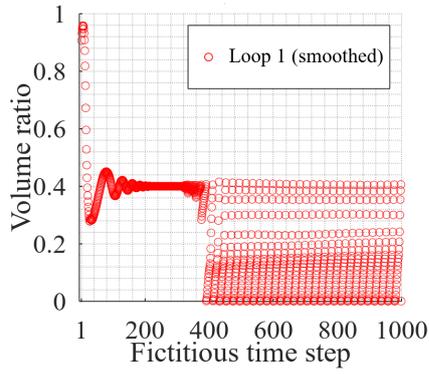
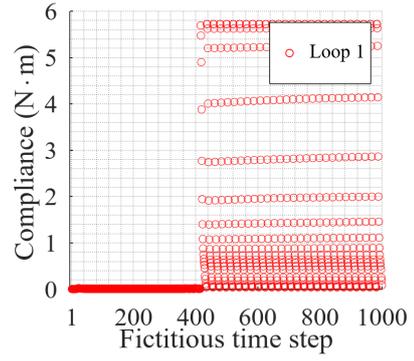


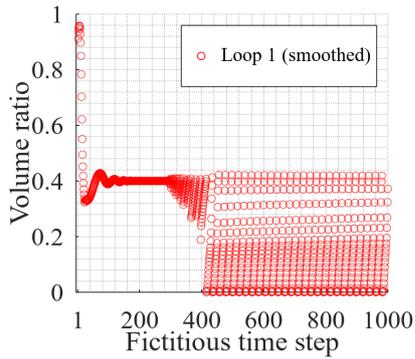
Fig. 14: Structural change during optimization by using the inexact volume constraint method for the center-load case considering three different  $K(\phi)$



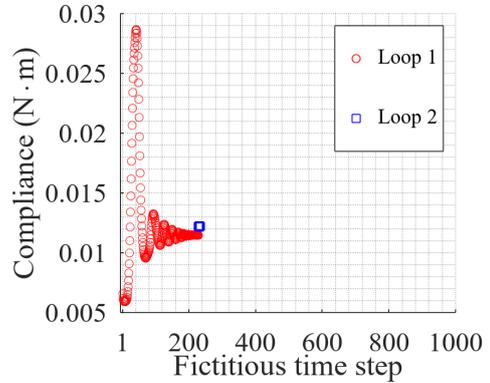
(a)  $K(\phi) = 1$



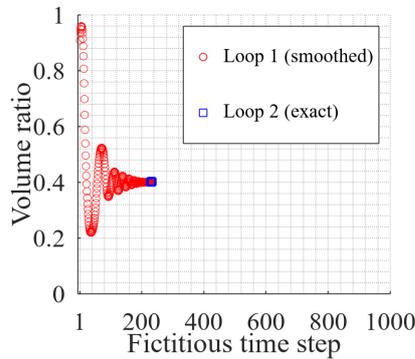
(b)  $K(\phi) = 0.5 + \cos(0.5\pi\phi)$



(b)  $K(\phi) = 0.5 + \cos(0.5\pi\phi)$

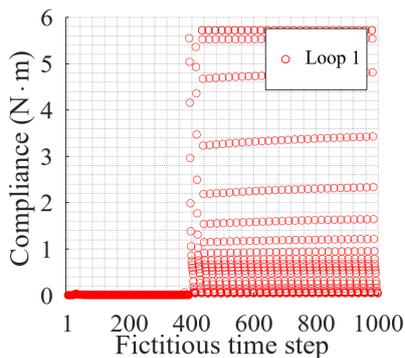


(c)  $K(\phi) = 0.5 + \sin(0.5\pi\phi)$



(c)  $K(\phi) = 0.5 + \sin(0.5\pi\phi)$

Fig. 15: Volume ratio by using the inexact volume constraint method for the lower-load case considering three different  $K(\phi)$



(a)  $K(\phi) = 1$

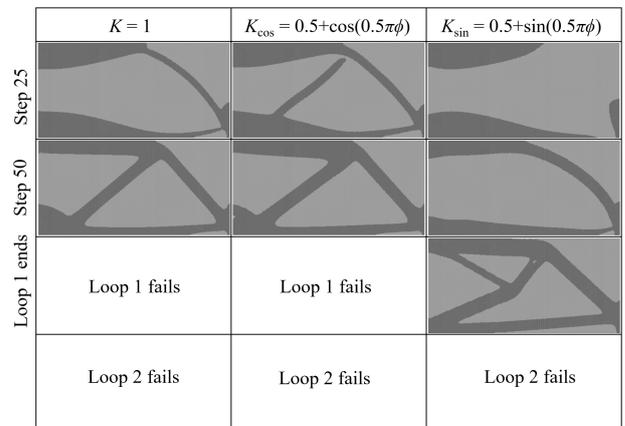
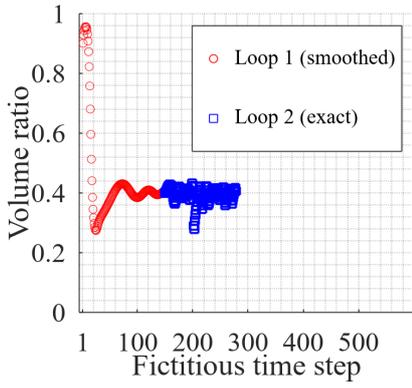
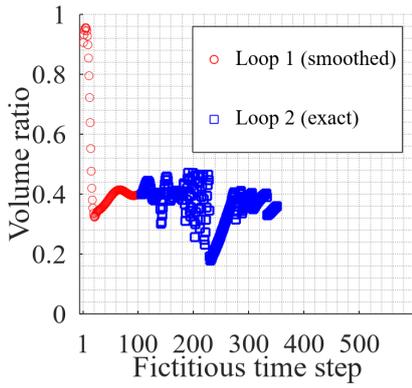


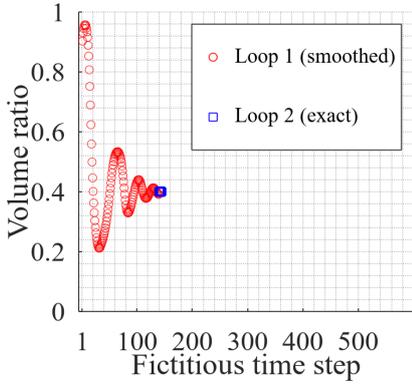
Fig. 17: Structural change during optimization by using the inexact volume constraint method for the lower-load case with different  $K(\phi)$



(a)  $K(\phi) = 1$

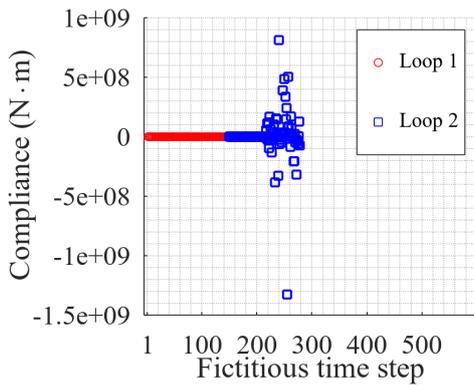


(b)  $K(\phi) = 0.5 + \cos(0.5\pi\phi)$

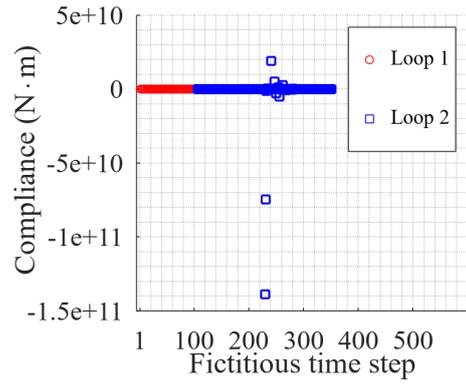


(c)  $K(\phi) = 0.5 + \sin(0.5\pi\phi)$

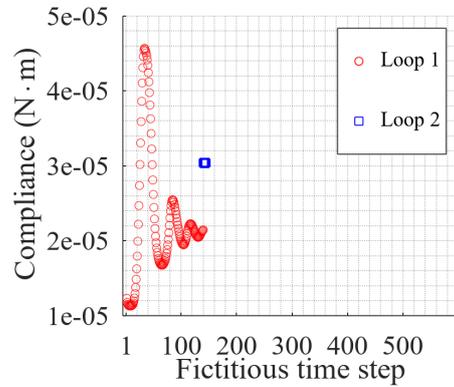
Fig. 18: Volume ratio by using the inexact volume constraint method for the bridge-like case with different  $K(\phi)$



(a)  $K(\phi) = 1$



(b)  $K(\phi) = 0.5 + \cos(0.5\pi\phi)$



(c)  $K(\phi) = 0.5 + \sin(0.5\pi\phi)$

Fig. 19: Structural compliance by using the inexact volume constraint method for the bridge-like case with different  $K(\phi)$

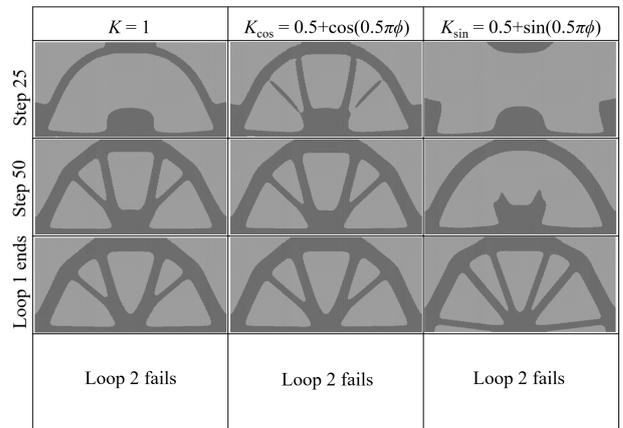


Fig. 20: Structural change during optimization by using the inexact volume constraint method for the bridge-like case with different  $K(\phi)$

## Reference

- (1) Bendsøe, M.P., Sigmund, O.. Material interpolation schemes in topology optimization. *Archive of Applied Mechanics (Ingenieur Archiv)* Vol.69, No.(9-10), (1999), pp.635-654. doi:10.1007/s004190050248.
- (2) Bendsøe, M.P., Sigmund, O.. *Topology Optimization*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, (2004), doi:10.1007/978-3-662-05086-6.
- (3) Yamada, T., Izui, K., Nishiwaki, S., Takezawa, A.. A topology optimization method based on the level set method incorporating a fictitious interface energy. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* Vol.199, No.45-48, (2010), pp.2876-2891. doi:10.1016/j.cma.2010.05.013.
- (4) Emmendoerfer, H., Silva, E.C.N., Fancello, E.A.. Stress-constrained level set topology optimization for design-dependent pressure load problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* Vol.344, (2019), pp.569-601. doi:10.1016/j.cma.2018.10.004.
- (5) Zhang, Z., Xie, Y.M., Li, Q., Zhou, S.. A reaction-diffusion based level set method for image segmentation in three dimensions. *Engineering Applications of Artificial Intelligence* Vol.96, (2020), pp.103998. doi:10.1016/j.engappai.2020.103998.
- (6) Li, H., Yamada, T., Jolivet, P., Furuta, K., Kondoh, T., Izui, K., Nishiwaki, S.. Full-scale 3D structural topology optimization using adaptive mesh refinement based on the level-set method. *Finite Elements in Analysis and Design* Vol.194, (2021), pp.103561. doi:10.1016/j.finel.2021.103561.
- (7) Zhuang, Z., Xie, Y., Zhou, S., A reaction diffusion-based level set method using body-fitted mesh for structural topology optimization. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* Vol.381, No.1 (2021), pp. 113829. doi: <https://doi.org/10.1016/j.cma.2021.113829>.
- (8) Zhuang, Z., Xie, Li, Q., Y., Zhou, S., Body-fitted bidirectional evolutionary structural optimization using nonlinear diffusion regularization. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* Vol.396, No.1 (2022), pp. 115114. doi: <https://doi.org/10.1016/j.cma.2022.115114>.
- (9) Cui, Y., and Takahashi, T., and Matsumoto, T., An exact volume constraint method for topology optimization via reaction–diffusion equation. *Computers & Structures* Vol.280 (2023), pp.1006986.
- (10) Cui, Y., and Takahashi, T., and Matsumoto, T., A time-saving FEM-based approach for structural topology optimization with exact boundary representation. *Mechanical Engineering Journal*, Vol.9, No.6 (2022), pp. 22–00281. <https://doi.org/10.1299/mej.22-00281>.
- (11) Yamada T, Nishiwaki S, Izui K, Yoshimura M, Takezawa A. A Structural Optimization Method Incorporating Level Set Boundary Expressions Based on the Concept of the Phase Field Method. *JSMET*. 75 (2009) 753 pp. 550–558. <https://doi.org/10.1299/kikaia.75.550>.
- (12) Lopes, C.G., Santos, R.B.d., Novotny, A.A.. Topological derivative based topology optimization of structures subject to multiple loadcases. *Latin American Journal of Solids and Structures* Vol.12, No.5, (2015), pp.834-860. doi:10.1590/1679-78251252.
- (13) Hestenes, M. R.. Multiplier and gradient methods. *Journal of Optimization Theory and Applications*, Vol. 4, No.5, (1969), pp.303–320. doi:10.1007/BF00927673.
- (14) Rockafellar, R. T.. The multiplier method of Hestenes and Powell applied to convex programming. *Journal of Optimization Theory and Applications*, Vol.12, No.6, (1973), pp.555–562. doi:10.1007/BF00934777.
- (15) Powell M. J. D.. Algorithms for nonlinear constraints that use Lagrangian functions. *Mathematical Programming*, Vol. 14, (1978), pp.224–248. doi:10.1007/BF01588967.
- (16) Hecht, F.. New development in freefem++. *Journal of Numerical Mathematics* Vol.20, No.3-4, (2012), pp. 251-265, doi:10.1515/jnum-2012-0013.
- (17) Jolivet, P., Dolean, V., Hecht, F., Nataf, F., Pru' Homme, C., Spillane, N.. High performance domain decomposition methods on massively parallel architectures with freefem++. *Journal of Numerical Mathematics* vol. 20, no. 3-4, (2012), pp. 287-302. doi:10.1515/jnum-2012-0015.
- (18) Kim, C., Jung, M., Yamada, T., Nishiwaki, S., Yoo, J.. FreeFEM++ code for reaction-diffusion equation-based topology optimization: for high-resolution boundary representation using adaptive mesh refinement. *Structural and Multidisciplinary Optimization* Vol. 62, No.1, (2020), pp.439-455. doi:10.1007/s00158-020-02498-3

# 境界要素法と摂動法を用いた開領域の固有周波数の 加振問題への応用

## APPLICATION OF EIGENFREQUENCY FOR AN OPEN DOMAIN TO EXCITATION PROBLEMS USING BOUNDARY ELEMENT AND PERTURBATION METHODS

丸山 泰蔵<sup>1)</sup>, 杉田 直広<sup>2)</sup>

Taizo MARUYAMA and Naohiro SUGITA

- 1) 東京工業大学環境・社会理工学院 (〒 152-8550 東京都目黒区大岡山 2 丁目 12-1, E-mail: maruyama.t.ag@m.titech.ac.jp)  
2) 東京工業大学科学技術創成研究院 (〒 226-8503 神奈川県横浜市緑区長津田町 4259, E-mail: sugita.n.aa@m.titech.ac.jp)

This paper presents a perturbation analysis of the excitation problem for an open domain. As a fundamental study, it addresses wave scattering by a crack in a two-dimensional unbounded domain to avoid fictitious eigenfrequency issues, which are encountered in a boundary integral equation. The modal amplitude is approximated using the perturbation method, employing a Taylor expansion around the complex-valued eigenfrequency for the open domain. The eigenfrequency problem for an open domain is solved using boundary element and Sakurai-Sugiura methods. Several numerical results demonstrate that the perturbation solutions evaluate the modal amplitude with real-valued frequency excitation.

**Key Words:** Eigenfrequency Analysis, Open Domain, Excitation Problem, Boundary Element Method, Perturbation Method

### 1. はじめに

超音波非破壊検査等で扱う波動問題では、材料表面等の境界が十分遠方に存在する場合、遠方からの反射波が含まれない有限時間の計測波形を用いて欠陥の推定を行うことが多い。その場合は通常、無限遠への波の放射を考慮して(半)無限領域中の散乱問題としてモデル化を行う<sup>(1)</sup>。開領域の波動問題では波の放射によるエネルギーの散逸が存在するため、エネルギーが完全にトラップされる特別な場合を除いて実数の固有周波数は存在しない。しかしながら、エネルギー散逸を含んだ複素数の固有周波数は存在することが知られている。このような複素固有周波数は減衰を伴う共振として物理的に解釈することができる。したがって開領域の固有周波数によって引き起こされる共振を利用することができれば、Local Defect Resonance<sup>(2)</sup>を利用した欠陥のイメージングや超音波試験のS/N向上に寄与できると考えられる。以上の観点から、如何なる加振を行えばどの程度の振幅で共振を励起できるか調べる加振問題の解析は、開領域の固有周波数の実用上意義がある。

閉領域に対する実固有周波数ではその固有関数の直交性

が振動論においてよく知られており、ノーマルモード展開を用いれば加振によって励起される各共振モード振幅は求められる<sup>(3)</sup>。一方、開領域に対する複素固有周波数ではその固有関数の正規化、完全性、直交性に関する研究は進められ、特定の場合には物理的に意味のあるモードのみでの完全性が示されているものの<sup>(4)</sup>、多くの場合は定かでない。また、正規化と直交性はPerfect Matched Layer (PML)を用いた定式化によって形成する方法が提案されている<sup>(5)</sup>。これらの電磁気学における開領域の複素固有周波数に関する研究成果は近年、Sauvanら<sup>(6)</sup>によってまとめられている。一方、振動学では、摂動法による固有周波数周りで加振問題の解析が行われている<sup>(7)</sup>。複数のモードが含まれる解析を行う場合は直交関係式が必要になるが、単一の固有周波数に対してTaylor展開する場合には必ずしも直交関係式が得られなくとも解析可能であると思われる。そこで本研究では摂動法に基づき、直交関係式を用いずに単一の複素固有周波数による共振モードがどの程度励振できるかを調べる簡便な方法を提案する。

開領域の固有周波数問題では、空間領域において無限遠で固有関数が発散する。そのため、有限要素法や有限差分法といった領域型の数値解法で扱う場合、PML等の吸収境界に

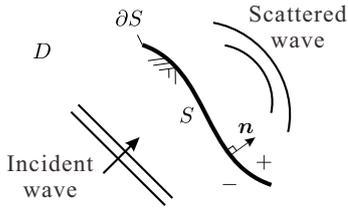


Fig. 1 Elastic wave scattering by a crack in a two-dimensional unbounded domain.

よる処理が必要となる．しかしながら PML を用いた場合には，PML 由来の非物理的なモードが発生するため，物理的に意味のあるモードを識別する必要がある<sup>(8)</sup>．一方，積分方程式に基づいた手法では，基本解（Green 関数）が無窮遠での放射条件を厳密に満足することから，境界積分方程式の見かけの固有周波数問題を除いて，不適切なモードは発生しない．そこで本研究では基礎的検討として，見かけの固有周波数問題が現れない 2 次元無限領域中のき裂による散乱問題を対象として，境界要素法を用いた解析を行う．その後，摂動法を用いて，開領域に対して得られる複素固有周波数と実際の加振問題における実周波数の近似的な関係を求める．

## 2. 解くべき開領域の固有値問題

本研究では時間調和な波動場を考え，時間因子は  $e^{-i\omega t}$  とする．ここで， $i$  は虚数単位， $\omega$  は角周波数， $t$  は時刻である．また特に断らない限り，2 次元直交座標系を用い，総和規約に従うものとする．

Fig. 1 に示すように，き裂  $S \subset \mathbb{R}^2$  によって入射波が散乱する問題を考える．き裂  $S$  は縁  $\partial S$  を有する自己交差しない滑らかな開曲線である．領域  $D := (\mathbb{R}^2 \setminus \bar{S})$  は等方，均質な線形弾性体であると仮定する．ここで， $\bar{S}$  は  $S$  の閉包である．Fig. 1 のようにき裂  $S$  の片側を  $+$  方向，反対を  $-$  方向とする．法線方向ベクトル  $\mathbf{n}$  は  $S$  の  $+$  方向に定義する．全変位場  $\mathbf{u}$  は次式のように入射波  $\mathbf{u}^{\text{in}}$  と散乱波  $\mathbf{u}^{\text{sc}}$  の重ね合わせであると仮定する．

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}^{\text{in}} + \mathbf{u}^{\text{sc}} \quad (1)$$

他の変数についても上付き in, sc はそれぞれ入射波，散乱波に対応することを示す．散乱波は次の Navier-Cauchy 方程式と放射条件を満足する．

$$\mu \nabla^2 \mathbf{u}^{\text{sc}}(\mathbf{x}) + (\lambda + \mu) \nabla \nabla \cdot \mathbf{u}^{\text{sc}}(\mathbf{x}) + \rho \omega^2 \mathbf{u}^{\text{sc}}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \quad \text{for } \mathbf{x} \in D \quad (2)$$

$$\lim_{|\mathbf{x}| \rightarrow \infty} \sqrt{|\mathbf{x}|} \left\{ \frac{\partial \mathbf{u}^{\text{sc};\varphi}}{\partial |\mathbf{x}|}(\mathbf{x}) - ik_\varphi \mathbf{u}^{\text{sc};\varphi}(\mathbf{x}) \right\} = \mathbf{0} \quad (3)$$

$$\lim_{|\mathbf{x}| \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{|\mathbf{x}|}} \mathbf{u}^{\text{sc};\varphi}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \quad (4)$$

ここで， $\lambda$ ， $\mu$  は Lamé 定数， $\rho$  は密度である．また， $\varphi = \text{L}$  or  $\text{T}$  であり， $\mathbf{u}^{\text{sc};\text{L}}$ ， $\mathbf{u}^{\text{sc};\text{T}}$  はそれぞれ散乱波の縦波成分，横波成分を表しており， $k_{\text{L}}$  と  $k_{\text{T}}$  はそれぞれ縦波と横波の波数である．入射波  $\mathbf{u}^{\text{in}}$  は散乱体であるき裂が存在しない場合の解

であるため，式 (2) を  $\mathbb{R}^2$  に対して満足するが，放射条件 (3)，(4) は必ずしも満足しない．き裂開口変位  $[\mathbf{u}] := \mathbf{u}^+ - \mathbf{u}^-$  に対して次の正則条件を仮定する．

$$[\mathbf{u}](\mathbf{x}) = \mathbf{0} \quad \text{for } \mathbf{x} \in \partial S$$

ここで，上付き添字  $\pm$  は  $D$  中の場の変数をどちらの方向から  $S$  に極限移行したのかを示す．向かい合うき裂面は常に非接触であると仮定し，き裂面における境界条件は次式で表される表面力フリーとする．

$$t_i(\mathbf{x}) := \mathcal{T}_{ij} u_j(\mathbf{x}) = 0 \quad \text{for } \mathbf{x} \in S \quad (5)$$

$$\mathcal{T}_{ij} := n_k(\mathbf{x}) C_{kijl} \frac{\partial}{\partial x_l}$$

ここで， $\mathbf{t}$  は表面力， $\mathcal{T}_{ij}$  は表面力作用素， $\mathbf{C}$  は弾性定数テンソルである．式 (5) では  $\mathbf{t}^+ = \mathbf{t}^-$  であるため上付き添字を省略している．

式 (2)–(4) から得られる散乱波に対する積分表現に式 (1) を代入すると，次の全波動場に対する積分表現が得られる．

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}^{\text{in}}(\mathbf{x}) + \int_S \mathbf{T}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega) \cdot [\mathbf{u}](\mathbf{y}) dS(\mathbf{y}) \quad \text{for } \mathbf{x} \in D \quad (6)$$

ここで， $\mathbf{T}$  は二重層核， $dS$  は線素である．式 (6) の両辺に  $\mathbf{x}$  に関する表面力作用素を作用させた後， $\mathbf{x}$  を境界  $S$  上に極限移行し，式 (5) を考慮すると次の超特異境界積分方程式が得られる．

$$-\mathbf{t}^{\text{in}}(\mathbf{x}) = \text{p.f.} \int_S \mathbf{W}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega) \cdot [\mathbf{u}](\mathbf{y}) dS(\mathbf{y}) \quad \text{for } \mathbf{x} \in S \quad (7)$$

ここで， $\mathbf{W}$  は超特異積分核である．通常の境界要素法では，設定した入射波項  $\mathbf{t}^{\text{in}}$  に対して式 (7) をき裂開口変位  $[\mathbf{u}]$  について解く．その後，式 (6) によって領域  $D$  内での任意の点における変位を求めることができる．

式 (7) で表される系に対する固有周波数  $\omega^*$  と対応する固有関数  $[\mathbf{u}^*]$  は次を満足する

$$\text{p.f.} \int_S \mathbf{W}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega^*) \cdot [\mathbf{u}^*](\mathbf{y}) dS(\mathbf{y}) = \mathbf{0} \quad \text{for } \mathbf{x} \in S \quad (8)$$

このとき， $\mathbf{W}$  は  $\omega$  に対する非線形関数であるため，式 (8) を空間について離散化した場合，非線形固有値問題に帰着される．波の無限遠への放射によってエネルギーが完全に停留できないため，固有周波数  $\omega^*$  はエネルギー減衰を含む意味で複素数となる．本研究では時間因子を  $e^{-i\omega t}$  と設定したため， $\Im[\omega^*] < 0$  となる．

## 3. 加振問題への応用

非線形固有値問題 (8) を解いて得られる固有周波数は複素数であるが，実際の加振は実周波数で行われることを考慮して加振問題への応用を考える．本研究では，実軸に近い位置に分布する単一の固有周波数  $\omega^*$  を対象とし，摂動法による加振問題の定式化を行う．

加振に用いる実周波数  $\omega$  は次のように表されると仮定する.

$$\omega = \omega^* + \epsilon\hat{\omega} \quad (9)$$

ここで,  $\epsilon$  は小さな正数,  $\hat{\omega}$  は固有周波数からの離調パラメータである. 加振によって励起されるき裂開口変位  $[\mathbf{u}]$  は次のように  $\epsilon$  のべき級数で表現できると仮定する.

$$[\mathbf{u}] = \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon^n [\mathbf{u}_n] \quad (10)$$

超特異積分核  $\mathbf{W}$  を次のように  $\omega$  について  $\omega^*$  周りで Taylor 展開する.

$$\mathbf{W}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega) = \mathbf{W}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega^*) + \epsilon\hat{\omega} \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial \omega}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega^*) + \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad (11)$$

また, 加振力である入射波の表面力は次のオーダーと仮定する.

$$\mathbf{t}^{\text{in}} = \epsilon \hat{\mathbf{t}}^{\text{in}} \quad (12)$$

式 (9)–(12) を式 (7) に代入し,  $\epsilon$  についてのオーダーごとに方程式を満足させることを考えると,  $\mathcal{O}(\epsilon^0)$ ,  $\mathcal{O}(\epsilon^1)$  に対して次式が得られる.

$$\mathcal{O}(\epsilon^0): \quad \text{p.f.} \int_S \mathbf{W}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega^*) \cdot [\mathbf{u}_0](\mathbf{y}) dS(\mathbf{y}) = \mathbf{0} \quad (13)$$

$$\mathcal{O}(\epsilon^1): \quad \text{p.f.} \int_S \left\{ \mathbf{W}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega^*) \cdot [\mathbf{u}_1](\mathbf{y}) + \hat{\omega} \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial \omega}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega^*) \cdot [\mathbf{u}_0](\mathbf{y}) \right\} dS(\mathbf{y}) = -\hat{\mathbf{t}}^{\text{in}}(\mathbf{x}) \quad (14)$$

式 (13) の解は式 (8) より, 次のように得られる.

$$[\mathbf{u}_0] = \alpha [\mathbf{u}^*] \quad (15)$$

ここで,  $\alpha$  は固有モード振幅である. 式 (15) を式 (14) に代入して  $\alpha$  と  $\hat{\mathbf{t}}^{\text{in}}$  の関係を求めることができれば, 設定した加振に対して固有モードがどの程度の強さで励振できるかを調べられる.

式 (14) について, 如何なる  $[\mathbf{u}_1]$  に対しても次のような関係を持つ関数  $\mathbf{v}^*$  が存在すると仮定する.

$$\int_S \overline{\mathbf{v}^*(\mathbf{x})} \cdot \left[ \text{p.f.} \int_S \mathbf{W}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega^*) \cdot [\mathbf{u}_1](\mathbf{y}) dS(\mathbf{y}) \right] dS(\mathbf{x}) = 0$$

式 (14) の両辺に左から  $\overline{\mathbf{v}^*(\mathbf{x})}$  を掛けて  $\mathbf{x}$  について  $S$  にわたって積分すると次式が得られる.

$$\begin{aligned} \alpha &= -\frac{1}{X^* \hat{\omega}} \int_S \overline{\mathbf{v}^*(\mathbf{x})} \cdot \hat{\mathbf{t}}^{\text{in}}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) \\ &= -\frac{1}{X^* (\omega - \omega^*)} \int_S \overline{\mathbf{v}^*(\mathbf{x})} \cdot \mathbf{t}^{\text{in}}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (16)$$

ここで,  $X^*$  は次式で定義している.

$$X^* := \int_S \overline{\mathbf{v}^*(\mathbf{x})} \cdot \left[ \text{p.f.} \int_S \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial \omega}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega^*) \cdot [\mathbf{u}^*](\mathbf{y}) dS(\mathbf{y}) \right] dS(\mathbf{x})$$

$X^*$  は固有ペア  $(\omega^*, [\mathbf{u}^*])$ , 及び  $\mathbf{v}^*$  の情報のみから求められるため, 定数として考えられる. したがって式 (16) に示すよ

うに, 固有モード振幅  $\alpha$  は加振項と  $\mathbf{v}^*$  の内積, 固有周波数からの離調  $(\omega - \omega^*)$  によって近似的に求められる.

#### 4. 離散系での取り扱い

境界要素法を用いた数値計算における前節の理論の扱いを説明する. 本研究では Galerkin 法を用いて境界積分方程式 (7) を離散化し, 数値計算する. したがって, 重み関数  $\psi$  を用いた次の式を考える.

$$\begin{aligned} & - \int_S \psi(\mathbf{x}) \mathbf{t}^{\text{in}}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) \\ & = \int_S \psi(\mathbf{x}) \text{p.f.} \int_S \mathbf{W}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega) \cdot [\mathbf{u}](\mathbf{y}) dS(\mathbf{y}) dS(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (17)$$

式 (17) を通常の境界要素法の枠組みで空間について離散化すると, 次の連立一次方程式が得られる.

$$\mathbf{W}(\omega)[\mathbf{u}] = -\mathbf{t}^{\text{in}}$$

ここで,  $\mathbf{W}$ ,  $[\mathbf{u}]$ ,  $\mathbf{t}^{\text{in}}$  はそれぞれ, 超特異積分核に対応する係数行列, き裂開口変位に対応する未知ベクトル, 入射表面力に対応する既知ベクトルである. したがって, 本問題では次式を満足する  $\omega^*$  と  $[\mathbf{u}^*]$  のペアが固有周波数と右固有ベクトルである.

$$\mathbf{W}(\omega^*)[\mathbf{u}^*] = \mathbf{0} \quad (18)$$

ここで,  $\mathbf{W}$  は  $\omega$  に対する非線形関数行列であるため, 式 (18) は非線形固有値問題である. 本研究では, Sakurai-Sugiura Method<sup>(9)</sup> (SSM) によって非線形固有値問題を数値的に解く.

摂動法における各種パラメータは以下のように仮定する.

$$\begin{aligned} [\mathbf{u}] &= \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon^n [\mathbf{u}_n] \\ \mathbf{W}(\omega) &= \mathbf{W}(\omega^*) + \epsilon\hat{\omega} \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial \omega}(\omega^*) + \mathcal{O}(\epsilon^2) \\ \mathbf{t}^{\text{in}} &= \epsilon \hat{\mathbf{t}}^{\text{in}} \end{aligned}$$

以上を考慮すると,  $\mathcal{O}(\epsilon^0)$ ,  $\mathcal{O}(\epsilon^1)$  に対する方程式は次である.

$$\mathcal{O}(\epsilon^0): \quad \mathbf{W}(\omega^*)[\mathbf{u}_0] = \mathbf{0} \quad (19)$$

$$\mathcal{O}(\epsilon^1): \quad \mathbf{W}(\omega^*)[\mathbf{u}_1] + \hat{\omega} \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial \omega}(\omega^*)[\mathbf{u}_0] = -\hat{\mathbf{t}}^{\text{in}} \quad (20)$$

式 (19) の解は式 (18) より, 次のように得られる.

$$[\mathbf{u}_0] = \alpha [\mathbf{u}^*] \quad (21)$$

固有値問題 (18) に対して次式を満足する左固有ベクトル  $\mathbf{v}^*$  を考える.

$$\mathbf{v}^{*:\text{H}} \mathbf{W}(\omega^*) = \mathbf{0}$$

ここで, 上付き H は共役転置を示している. 式 (21) と左固有ベクトル  $\mathbf{v}^*$  を用いると, 式 (20) は次のように変形できる.

$$\begin{aligned} \alpha &= -\frac{1}{X^* \hat{\omega}} \mathbf{v}^{*:\text{H}} \hat{\mathbf{t}}^{\text{in}} \\ &= -\frac{1}{X^* (\omega - \omega^*)} \mathbf{v}^{*:\text{H}} \mathbf{t}^{\text{in}} \end{aligned} \quad (22)$$

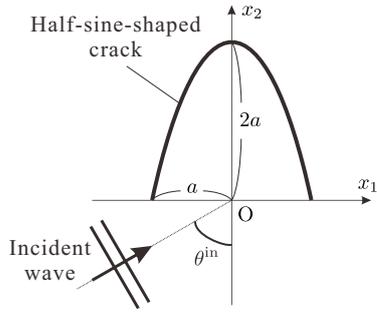


Fig. 2 Elastic wave scattering by a half-sine-shaped crack.

ここで、 $X^*$  は次式で定義している。

$$X^* := \mathbf{v}^{*H} \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial \omega}(\omega^*)[\mathbf{u}^*]$$

$X^*$  は固有周波数と左右固有ベクトルから求められるため、固定した  $\omega^*$  に対して定数である。そのため、固有モード振幅  $\alpha$  は左固有ベクトルと加振項の内積、固有周波数からの離調によって求められる。

### 5. 数値解析例

き裂に対する散乱解析結果と式 (22) による固有モード振幅の結果を比較して、本摂動解析の妥当性を確かめる。数値解析モデルは Fig. 2 に示す幅と高さが  $2a$  の半周期正弦関数型き裂による入射平面波の散乱問題とした。Poisson 比  $\nu = 0.3$  として、入射平面波は次式で与えた。

$$\mathbf{u}^{\text{in}} = u_0 \mathbf{d}_\varphi \exp(ik_\varphi \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}) \quad (23)$$

ここで、 $u_0$  は変位振幅、 $\mathbf{p}$  は伝搬方向ベクトル、 $\mathbf{d}_\varphi$  ( $\varphi = \text{L}$  or  $\text{T}$ ) は振動方向ベクトルであり、 $\mathbf{d}_\text{L} = \mathbf{p}$ 、 $\mathbf{d}_\text{T} \cdot \mathbf{p} = 0$  である。また、Fig. 2 中の  $\theta^{\text{in}}$  は入射角であり、 $\mathbf{p} = (\sin \theta^{\text{in}}, \cos \theta^{\text{in}})$  とした。この解析モデルは、著者らの既往の研究<sup>(10, 11)</sup>においてき裂面の接触を考慮した場合に分調波共振が確認されたモデルであり、共振とその励振の特性を調べることも目的として採用した。

次式で表される幅  $a$  あたりの入射エネルギーで正規化された散乱エネルギーを Fig. 3(a), (b) に示す。

$$E^{\text{sc}} = \frac{i}{2au_0\sigma_0} \int_S \left\{ [\mathbf{u}^{\text{sc}}](\mathbf{x}) \cdot \overline{\mathbf{t}^{\text{sc}}(\mathbf{x})} - \overline{[\mathbf{u}^{\text{sc}}](\mathbf{x})} \cdot \mathbf{t}^{\text{sc}}(\mathbf{x}) \right\} dS(\mathbf{x})$$

ここで、 $\sigma_0$  は次式で表される入射波の応力振幅である。

$$\sigma_0 = \begin{cases} u_0(\lambda + 2\mu)k_\text{L} & (\varphi = \text{L}) \\ u_0\mu k_\text{T} & (\varphi = \text{T}) \end{cases}$$

Fig. 3(a), (b) はそれぞれ縦波入射、横波入射の場合である。一方、Fig. 3(c) には SSM で求めた固有周波数を示す。図中の破線は SSM における積分経路（固有周波数の探索領域）を示している。Fig. 3(a), (b) の散乱エネルギーは様々な入射角  $\theta^{\text{in}}$  に対して示しているが、Fig. 3(c) の固有周波数の実部付近の周波数でいずれかの  $\theta^{\text{in}}$  がピークを取っている場合が多い。また、実部が最も小さい固有周波数に対応するピークは立ち上がり急峻になっている。この固有周波数の減衰

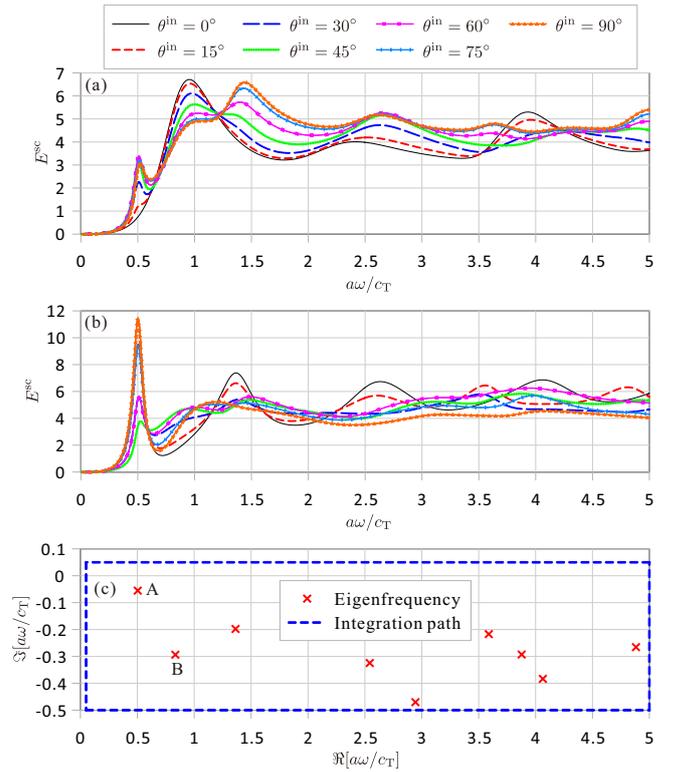


Fig. 3 Scattering energy by (a) longitudinal incidence and (b) transverse incidence for various frequencies when the analysis model is given by Fig. 2 with  $\nu = 0.3$ . The eigenfrequencies obtained by the SSM are plotted in (c).

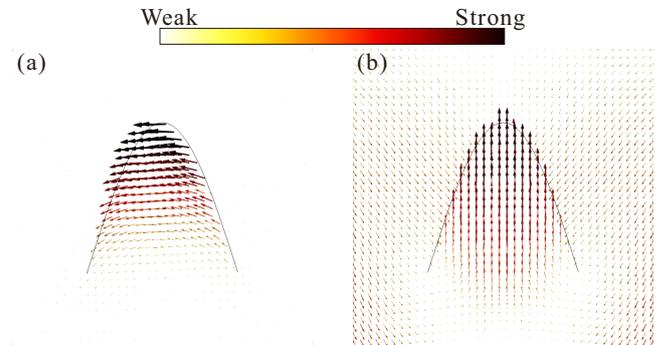


Fig. 4 Displacement fields in modal vibration of eigenfrequencies (a) A and (b) B shown in Fig. 3(c).

に対応する虚部の絶対値が小さいことと関係していると予想される。

Fig. 3(c) に示した A, B の 2 つの固有周波数に対応する固有モードでのある時刻の変位場をそれぞれ Fig. 4(a), (b) に示す。Fig. 4(a) より、A の固有モードはき裂で隔てられた部分が左右に曲げ振動するような挙動である。一方、Fig. 4(b) より、B の固有モードはき裂で隔てられた部分が上下に伸び縮みするような挙動である。

入射周波数を固有周波数に近い実数としたときの式 (22) で表される固有モード振幅を調べる。次式で表される正規化した固有モード振幅の絶対値と入射角、周波数との関係を

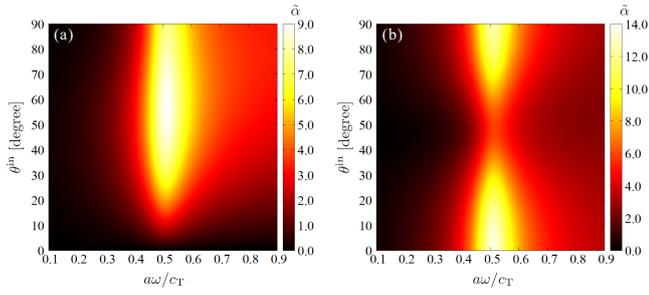


Fig. 5 Absolute value of modal amplitude for eigenfrequency A when (a) longitudinal and (b) transverse incidence.

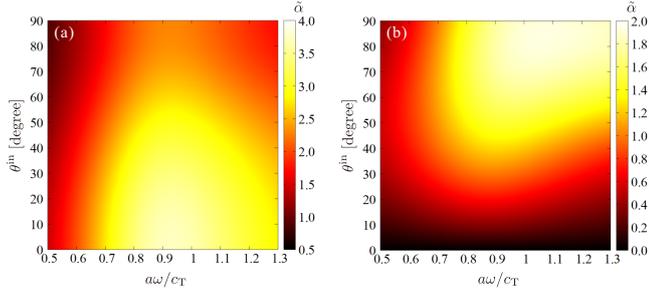


Fig. 6 Absolute value of modal amplitude for eigenfrequency B when (a) longitudinal and (b) transverse incidence.

Fig. 5, 6 に示す。

$$\tilde{\alpha} = \left| \frac{\alpha}{u_0} \right| \max_{\mathbf{x} \in S} |[\mathbf{u}^*](\mathbf{x})|$$

Fig. 5, 6 では、Fig. 4 に示した固有モードを励振するのに適切だと思われる入射波の種類、入射角で、固有周波数付近において  $\tilde{\alpha}$  が大きな値を取ると期待される。Fig. 5(a), (b) はそれぞれ縦波入射、横波入射の場合の結果である。縦横どちらの入射波に対しても A の固有周波数  $a\omega^*/c_T = 0.503 - 0.055i$  付近の周波数にピークが存在することがわかる。一方、入射角については挙動が異なり、縦波入射の場合は  $\theta^{\text{in}} = 0^\circ$  のとき  $\tilde{\alpha} = 0$  であり、 $\theta^{\text{in}} = 60^\circ$  あたりで  $\tilde{\alpha}$  がピークを取っている。横波入射の場合は、 $\theta^{\text{in}} = 0^\circ, 90^\circ$  で  $\tilde{\alpha}$  が大きな値を取り、 $\theta^{\text{in}} = 50^\circ$  付近で値が小さくなっている。

Fig. 6 より、B の固有周波数の場合は A の場合と比較して、 $\tilde{\alpha}$  の値が小さく、値の変化が緩やかであることがわかる。縦波入射の場合は  $\theta^{\text{in}} = 0^\circ$  のときに  $\tilde{\alpha}$  がピークを取っている。一方、横波入射の場合は  $\theta^{\text{in}} = 0^\circ$  のとき  $\tilde{\alpha} = 0$  であり、 $\theta^{\text{in}} = 80^\circ$  あたりで  $\tilde{\alpha}$  がピークを取っている。

Fig. 3 で見られた虚部の絶対値が小さい固有周波数に対応するピークの立ち上がり急峻になる傾向は、式 (22) 中の  $1/(\omega - \omega^*)$  による影響だと理解でき、Fig. 5, 6 とも整合している。また、入射波の種類や入射角に対する A, B の固有モード振幅に対する挙動はそれぞれ Fig. 4(a), (b) に示される固有モードと整合している。

摂動法による固有モードのみのき裂開口変位 (PM) と境界要素法によって求めたき裂開口変位 (BEM) の比較を Fig. 7

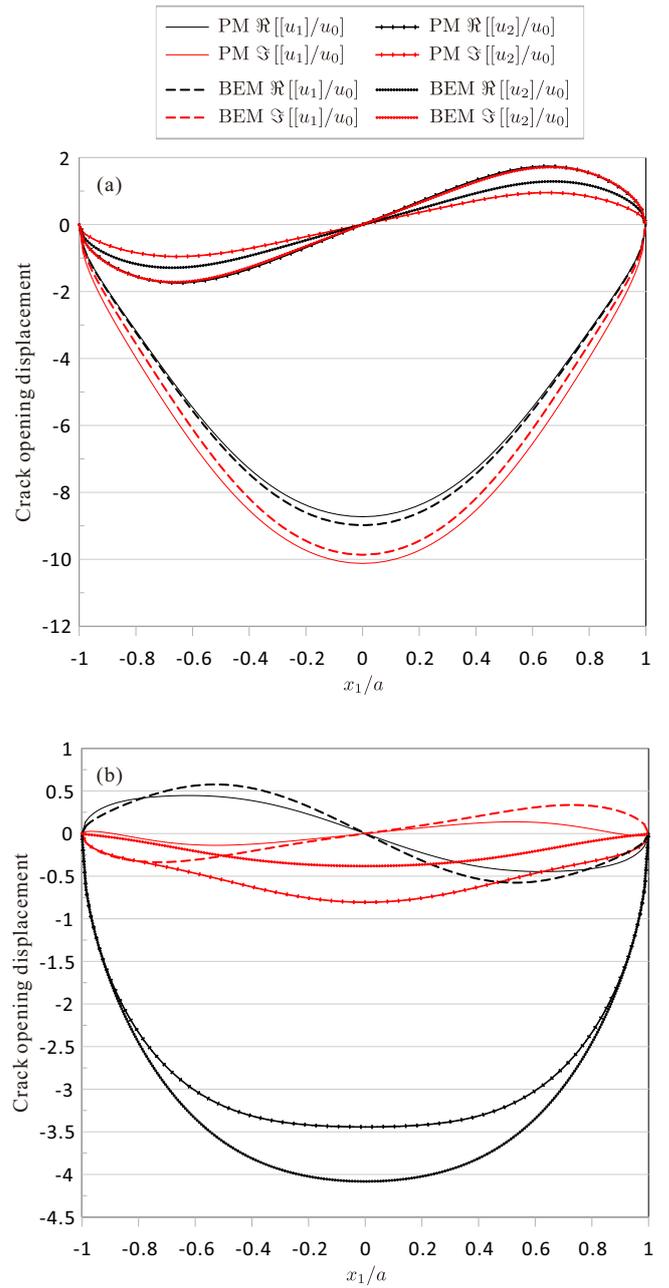


Fig. 7 Comparison of crack opening displacement between perturbation method (PM) and boundary element method (BEM) (a) when  $\omega = \Re[\omega^*]$  for case A and transverse incidence with  $\theta^{\text{in}} = 0^\circ$  and (b) when  $\omega = \Re[\omega^*]$  for case B and longitudinal incidence with  $\theta^{\text{in}} = 0^\circ$ .

に示す。摂動法によるき裂開口変位は次式で求めた。

$$[\mathbf{u}] = \alpha[\mathbf{u}^*]$$

Fig. 7(a) は A の場合の  $\omega = \Re[\omega^*]$  のときの  $\theta^{\text{in}} = 0^\circ$  で横波入射した際のき裂開口変位を示している。Fig. 7(a) より、 $[u_2]/u_0$  はあまり一致していないが、 $[u_1]/u_0$  は概ねよく一致していることがわかる。Fig. 4(a) に示すように、A の場合は横揺れが支配的であり、 $[u_1]/u_0$  が大きい値を取っているため、良好な結果であると考えられる。一方、Fig. 7(b) は B の場合の  $\omega = \Re[\omega^*]$  のときの  $\theta^{\text{in}} = 0^\circ$  で縦波入射した際のき

裂開口変位を示している。Fig. 7(b) より,  $[u_1]/u_0$ ,  $[u_2]/u_0$  ともに乖離が比較的大きい。しかしながら, 傾向はよく一致していると思われる。Fig. 3(c) に示すように A の場合は  $|\Im[\omega^*]|$  が B の場合よりも小さく, Fig. 7 で示した境界要素法の解において固有モード成分が支配的であると考えられる。このことが A の場合は摂動法と境界要素法の解が比較的良好一致した原因だと思われる。しかしながら, 比較的  $|\Im[\omega^*]|$  が大きい B の場合でも, 固有モードを励振しやすい設定においては Fig. 7(b) に示すようにモード振幅をある程度推定できることがわかった。

## 6. おわりに

本研究では, 境界要素法によって求めた開領域の固有周波数とそのときの固有モードを実周波数での加振問題に応用するため, 摂動解析を行った。摂動法の適用によって, 固有周波数と左右固有ベクトル, 及び加振項からどの程度のモード振幅が励振されるかを近似的に求めることができた。提案した定式化では, 固有周波数と左右固有ベクトルを一度求めれば, 加振項を変化させるだけでモード振幅が計算できるため, 様々な加振を検討する際に順解析を実施するよりも高速に計算可能である。

今後の課題として, 複数の固有周波数が近接する場合の検討が挙げられる。また, 非破壊検査を想定したモデルでのモード振幅を最大化する加振(超音波入射)方法の設計, 医療イメージングでの流体中のバブルの励振等, 種々の加振問題への応用を検討する予定である。

## 参考文献

- (1) L. W. Schmerr Jr.: Fundamentals of Ultrasonic Non-destructive Evaluation: A Modeling Approach 2nd ed., Springer Cham, (2014).
- (2) I. Yu. Solodov, J. Bai, S. Bekgulyan, and G. Busse: A Local Defect Resonance to Enhance Acoustic Wave-Defect Interaction in Ultrasonic Nondestructive Evaluation, *Applied Physics Letters*, **99**(2011), No.211911.
- (3) A. W. Leissa and M. S. Qatu: Vibration of Continuous Systems, About McGraw Hill Professional, (2011).
- (4) P. T. Leung, S. Y. Liu, and K. Young: Completeness and orthogonality of quasinormal modes in leaky optical cavities, *Physical Review A*, **49**(1994), pp.3057–3067.
- (5) C. Sauvan, J. P. Hugonin, I. S. Maksymov, and P. Lalanne: Theory of the Spontaneous Optical Emission of Nanosize Photonic and Plasmon Resonators, *Physical Review Letters*, **110**(2013), No.237401.
- (6) C. Sauvan, T. Wu, R. Zarouf, E. A. Muljarov, and P. Lalanne: Normalization, orthogonality, and completeness of quasinormal modes of open systems: the case of electromagnetism, *Optics Express*, **30**(2022), No.6846.
- (7) A. H. Nayfeh and D. T. Mook: Nonlinear Oscillations, Wiley-VCH, (1995).
- (8) J. C. Araujo-Cabarcas and C. Engström: On spurious solutions in finite element approximations of resonances in open systems, *Computers and Mathematics with Applications*, **74**(2017), pp.2385–2402.
- (9) J. Asakura, T. Sakurai, H. Tadano, T. Ikegami, and K. Kimura: A numerical method for nonlinear eigenvalue problems using contour integrals, *SIAM Letters*, **1**(2009), pp.52–55.
- (10) T. Maruyama, T. Saitoh, and S. Hirose: Numerical study on sub-harmonic generation due to interior and surface breaking cracks with contact boundary conditions using time-domain boundary element method, *International Journal of Solids and Structures*, **126–127**(2017), pp.74–89.
- (11) T. Maruyama: Harmonic balance-boundary element and continuation methods for steady-state wave scattering by interior and surface-breaking cracks with contact acoustic nonlinearity, *International Journal of Solids and Structures*, **210–211**(2021), pp.310–324.

# 弾性体の界面剥離による平面波の散乱解析に対する メッシュフリー型解析手法の開発

## DEVELOPMENT OF A MESHFREE-TYPE METHOD FOR PLANE WAVE SCATTERING BY AN INTERFACE DEBONDING ON THE INTERFACE OF ELASTIC SOLIDS

古川 陽<sup>1)</sup>

Akira FURUKAWA

1) 北海道大学大学院工学研究院 (〒060-8628 北海道札幌市北区北13条西8丁目, E-mail: afurukawa@eng.hokudai.ac.jp)

This paper presents an OMP-based meshfree method for anti-plane wave analysis. The developed meshfree method, OMP-Mf( $s$ ), uses not only fundamental solutions but also plane waves as basis functions and can select adequate basis functions using OMP. We applied this developed method to study plane wave scattering caused by interface debonding at the interface of two elastic solids. Several numerical results show that OMP-Mf( $s$ ) provides a good approximation of displacement wavefield for  $s = 2$ .

**Key Words:** Meshfree-Type Method, Wave Scattering, Interface Debonding, Fundamental Solutions, Plane Wave, Orthogonal Matching Pursuit

### 1. はじめに

鋼板接着工法による補強床版や繊維強化プラスチックは層構造を有しており、その内部に生じる界面剥離は性能低下の原因となる。界面剥離の代表的な非破壊評価手法として超音波試験があり、剥離部分からの散乱波の情報をもとに対象物を評価する。界面剥離によって生じる散乱波の特性を理解するためには、数値計算による検討が有効である。数値計算において、剥離部分による散乱波の特性の把握を目的とした解析では、半無限領域を含む解析領域を取り扱うことが一般的である。このような解析を実現するため、様々な解表現や積分方程式を用いた定式化が提案されている<sup>(1, 2, 3)</sup>。

偏微分方程式に対するメッシュフリー型の数値解法の代表例として、基本解近似解法<sup>(4)</sup> (MFS; the method of fundamental solutions) がある。MFSは、対象とする問題の近似解を基本解と近似係数の線形結合で表現する。このとき、基本解の源点は解析領域の補領域に配置され、近似係数は境界条件によって決定される。そのため、MFSは解析における未知数の数が少なく済み、基本解の特異性を取り扱う必要がないことから数値計算の実装が容易であることが知られている。その一方で、MFSの解表現に用いる基本解の源点の数や配置は任意性があり、近似解に影響を及ぼすことが知られている。MFSの源点選択については、これまで数多くの手法が提案されている<sup>(5, 6, 7, 8)</sup>。

MFSの源点選択に関して、著者はこれまで、直交マッチング追跡<sup>(9)</sup> (OMP; orthogonal matching pursuit) を用いた選択手法の開発に取り組んできた。OMPは $l^0$ 最適化に分類される線形問題の最適化手法であり、貪欲法に基づいて基底ベクトルを選択する。OMPは劣決定問題に対しても適用可能であり、線形問題の解を表現するために必要となる基底ベクトルを選択することが可能となる。OMPによる源点選択を組み込んだMFS (以下、OMP-MFSと呼ぶ) の主な適用対象は無限領域を対象とした散乱解析<sup>(10)</sup>であったが、多層弾性体のような半無限領域を含む問題を取り扱うことが可能となれば、適用範囲の拡大が期待できる。

MFSによって半無限領域を取り扱う場合、平面波の取り扱いに注意を払う必要がある。MFSの基底関数は基本解 (2次元問題の場合は円筒波) であり、平面波の表現には不適切である。そのため、一般的には平面波は解析的に計算され、既知の情報として取り扱われる。このような平面波の計算は理論的には計算可能であるが、多層構造や材料の異方性を考慮する場合には計算が複雑になる。これに対して、OMPに基づく解析手法では、基底関数の増加に対する制約はなく、基本解以外にも例えば平面波を基底関数とする解表現であっても基底関数の選択を容易に実行できる。

以上を踏まえ、本論文では基底関数として基本解以外の関数を含むメッシュフリー型の解析手法を開発する。開発手法は基底関数に基本解と平面波を用い、OMPによって近似係数を決定する。加えて、OMPによる近似係数の決定を $s$ 段

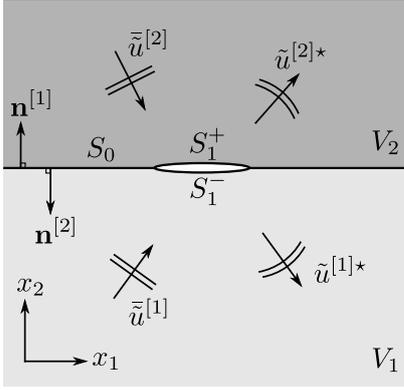


Fig.1 Anti-plane wave scattering by an interface debonding on the interface of elastic halfspaces.

階 ( $s = 1, 2$ ) に分割して実行する計算方法についても検証する．開発手法は，将来的には多層構造弾性体を対象とする散乱解析への適用を想定しているが，その前段階として，解析手法の基礎的な性質について整理する必要があると考えられる．そのため，本論文では，開発手法を2層弾性体の界面剥離による平面波の散乱問題に適用する．これ以降では，特に断りのない限り，1つの項に繰り返し現れる下付き添え字に対して総和規約を適用する．また，ギリシャ文字による下付き添え字は1, 2をとるものとする．

## 2. 解析手法

### 2.1. 対象とする問題

本論文では，Fig.1に示すような2つの弾性体の界面に存在する剥離部分による面外波動の散乱問題について考える．同図において，解析領域  $V_p$  ( $p = 1, 2$ ) はいずれも半無限領域とし，等方で均質な線形弾性体とする．また，これらの弾性体の界面（境界）は  $S$  とし，健全部分  $S_0$  と剥離部分  $S_1 (= S_1^- \cup S_1^+)$  によって構成される．また， $\mathbf{n}^{[p]} (= [n_1^{[p]}, n_2^{[p]}]^T)$  は，領域  $V_p$  に対する境界上の単位外向き法線ベクトルである．ただし， $(\cdot)^T$  は行列・ベクトルの転置を表す．加えて， $(\bar{\cdot})$  は散乱解析における既知項を， $(\tilde{\cdot})^*$  は散乱解析における未知項を表す．散乱解析における入射波は平面波とし，入射波は既知項に含まれるものとする．

領域  $V_p$  ( $p = 1, 2$ ) に対して，周波数領域における等方性弾性体の運動方程式は，物体力をゼロと仮定すると，次式で表現される．

$$(\mu_p \partial_\beta \partial_\beta + \rho_p \omega^2) \tilde{u}^{[p]}(\mathbf{x}) = 0 \quad (1)$$

ここに， $\tilde{u}^{[p]}(\mathbf{x})$  は領域  $V_p$  の位置  $\mathbf{x} (= [x_1, x_2]^T)$  における面外方向変位， $\omega$  は角周波数を表す．また， $\partial_\beta = \partial / \partial x_\beta$  であり， $\rho_p, \mu_p$  は領域  $V_p$  を構成する弾性体の密度とせん断弾性係数を表す．さらに，重ね合わせの原理を用いれば，面外方向変位  $\tilde{u}^{[p]}(\cdot)$  は以下の関係式を満たす．

$$\tilde{u}^{[p]}(\mathbf{x}) = \bar{u}^{[p]}(\mathbf{x}) + \tilde{u}^{[p]*}(\mathbf{x}); \quad \mathbf{x} \in V_p \cup S \quad (2)$$

境界における表面力は，次式で与える．

$$\tilde{t}^{[p]}(\mathbf{x}) = \mathcal{T}^{[p]} \tilde{u}^{[p]}(\mathbf{x}); \quad \mathbf{x} \in S \quad (3)$$

ここに， $\mathcal{T}^{[p]}$  は表面力作用素であり，次式で与えられる．

$$\mathcal{T}^{[p]} = \mu_p n_\beta^{[p]}(\mathbf{x}) \partial_\beta \quad (4)$$

Fig.1に示す2つの弾性体の界面における境界条件は，以下のように設定する．健全部分  $S_0$  における境界条件は，以下の式を用いる．

$$\tilde{u}^{[1]}(\mathbf{x}) = \tilde{u}^{[2]}(\mathbf{x}); \quad \mathbf{x} \in S_0 \quad (5)$$

$$\tilde{t}^{[1]}(\mathbf{x}) = -\tilde{t}^{[2]}(\mathbf{x}); \quad \mathbf{x} \in S_0 \quad (6)$$

一方，剥離部分  $S_1$  における境界条件は，次式を用いる．

$$\tilde{t}^{[1]}(\mathbf{x}) = 0; \quad \mathbf{x} \in S_1^- \quad (7)$$

$$\tilde{t}^{[2]}(\mathbf{x}) = 0; \quad \mathbf{x} \in S_1^+ \quad (8)$$

### 2.2. 近似解の表現と線形方程式

本論文では，解析領域  $V_p$  における変位  $\tilde{u}^{[p]}(\cdot)$  を次式で表現する．

$$\tilde{u}^{[p]}(\mathbf{x}) := \bar{u}^{[p]}(\mathbf{x}) + \sum_{k=1}^{N_a} \tilde{a}_k^{[p]}(\mathbf{x}) \tilde{c}_k^{[p]} \quad (9)$$

ここに， $\tilde{a}_k^{[p]}(\cdot)$  は未知項の近似に用いる基底関数， $\tilde{c}_k^{[p]}$  は近似係数を表す．また，境界における表面力  $\tilde{t}^{[p]}(\cdot)$  は，式(4)，(9)を用いて以下のように表現する．

$$\tilde{t}^{[p]}(\mathbf{x}) := \tilde{t}^{[p]}(\mathbf{x}) + \sum_{k=1}^{N_a} \tilde{b}_k^{[p]}(\mathbf{x}) \tilde{c}_k^{[p]} \quad (10)$$

ここに，

$$\tilde{b}_k^{[p]}(\mathbf{x}) = \mathcal{T}^{[p]} \tilde{a}_k^{[p]}(\mathbf{x}) \quad (11)$$

である．本論文では，基底関数  $\tilde{a}_k^{[p]}(\cdot)$  として，基本解と平面波を考える．基本解  $\tilde{U}^{[p]}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  は，次式で与えられる．

$$\tilde{U}^{[p]}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{i}{4\mu_p} H_0^{(1)}(k_T^{[p]} r) \quad (12)$$

ここに， $\mathbf{x}$  は観測点， $\mathbf{y}$  は源点を表し， $r = |\mathbf{x} - \mathbf{y}|$  である．また， $k_T^{[p]}$  は領域  $V_p$  における面外波動の波数， $H_n^{(1)}$  は  $n$  次の第1種 Hankel 関数を表し， $i = \sqrt{-1}$  である．一方，平面波  $\tilde{U}^{\text{PW}[p]}(\mathbf{x}, \mathbf{p})$  は次式で与えられる．

$$\tilde{U}^{\text{PW}[p]}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \exp \left[ i k_T^{[p]} \langle \mathbf{p}, \mathbf{x} \rangle \right] \quad (13)$$

ここに， $\langle \cdot, \cdot \rangle$  はベクトルの内積， $\mathbf{p}$  は平面波の進行方向ベクトルを表す．

本論文では，弾性体の界面である境界  $S$  上に選点  $\mathbf{x}_i (= [x_{i,1}, x_{i,2}]^T; i = 1, 2, \dots, N_x)$  を配置し，その選点上で境界条件を満足するように近似係数  $\tilde{c}_k^{[p]}$  を決定する．このとき，解くべき線形方程式は，以下のように表現できる．

$$\tilde{\mathbf{D}} \tilde{\mathbf{c}} = \tilde{\mathbf{h}} \quad (14)$$

ここに， $\tilde{\mathbf{D}} \in \mathbb{C}^{M \times N}$ ， $\tilde{\mathbf{c}} \in \mathbb{C}^N$ ， $\tilde{\mathbf{h}} \in \mathbb{C}^M$  であり，本論文における解析では， $M = 2N_x$ ， $N = 2N_a$  である．式(14)において，未知ベクトル  $\tilde{\mathbf{c}}$  の成分は，次式で与えられる．

$$(\tilde{\mathbf{c}})_k := \tilde{c}_k^{[1]} \quad (15)$$

$$(\tilde{\mathbf{c}})_{N_a+k} := \tilde{c}_k^{[2]} \quad (16)$$

ただし,  $k = 1, 2, \dots, N_a$  である. 既知ベクトル  $\tilde{\mathbf{h}}$  の成分は, 以下の通りである.

$$(\tilde{\mathbf{h}})_i := \begin{cases} -\tilde{u}^{[1]}(\mathbf{x}_i) + \tilde{u}^{[2]}(\mathbf{x}_i) & : \mathbf{x}_i \in S_0 \\ -\tilde{t}^{[1]}(\mathbf{x}_i) & : \mathbf{x}_i \in S_1^- \end{cases} \quad (17)$$

$$(\tilde{\mathbf{h}})_{N_x+i} := \begin{cases} -\tilde{t}^{[1]}(\mathbf{x}_i) - \tilde{t}^{[2]}(\mathbf{x}_i) & : \mathbf{x}_i \in S_0 \\ -\tilde{t}^{[2]}(\mathbf{x}_i) & : \mathbf{x}_i \in S_1^+ \end{cases} \quad (18)$$

ただし,  $i = 1, 2, \dots, N_x$  である. さらに, 係数行列  $\tilde{\mathbf{D}}$  の成分は, 以下のように与えられる.

$$(\tilde{\mathbf{D}})_{i,k} := \begin{cases} \tilde{a}_k^{[1]}(\mathbf{x}_i) & : \mathbf{x}_i \in S_0 \\ \tilde{b}_k^{[1]}(\mathbf{x}_i) & : \mathbf{x}_i \in S_1^- \end{cases} \quad (19)$$

$$(\tilde{\mathbf{D}})_{i,N_a+k} := \begin{cases} -\tilde{a}_k^{[2]}(\mathbf{x}_i) & : \mathbf{x}_i \in S_0 \\ 0 & : \mathbf{x}_i \in S_1^- \end{cases} \quad (20)$$

$$(\tilde{\mathbf{D}})_{N_x+i,k} := \begin{cases} \tilde{b}_k^{[1]}(\mathbf{x}_i) & : \mathbf{x}_i \in S_0 \\ 0 & : \mathbf{x}_i \in S_1^+ \end{cases} \quad (21)$$

$$(\tilde{\mathbf{D}})_{N_x+i,N_a+k} := \tilde{b}_k^{[2]}(\mathbf{x}_i) : \mathbf{x}_i \in S_0 \cup S_1^+ \quad (22)$$

ただし,  $i = 1, 2, \dots, N_x$  および  $k = 1, 2, \dots, N_a$  であり,  $(\cdot)_{i,k}$  は行列の  $(i, k)$  成分を表す.

### 2.3. OMP (直交マッチング追跡)

本論文では, 式 (14) に示す線形方程式の求解に OMP を用いる. OMP では, 線形システム  $\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x}$  に対して, 以下に示す  $l^0$  最適化問題を解く.

$$\underset{\mathbf{x}}{\text{minimize}} \|\mathbf{x}\|_0 \text{ subject to } \mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x} \quad (23)$$

ここに,  $\|\cdot\|_0$  は  $l^0$  擬似ノルムを表し, その値は対象とするベクトルの非ゼロ成分の個数に対応する. OMP では, 以下に示す初期値を用いて, 式 (23) を解くために反復計算を実行する.

$$\mathbf{x}[0] = \mathbf{0}, \mathbf{r}[0] = \mathbf{y}, S_{-1} = \emptyset, k = 0 \quad (24)$$

ここに,  $\mathbf{0}$  は零ベクトル,  $S_k$  は各反復ステップで選択した列ベクトル (基底ベクトル) の情報を記憶するためのインデックス集合を表す. OMP による最適解の計算では, 式 (24) をもとに, 以下に示す処理を順に実行する.

$$i[k] := \arg \max_i \frac{|\langle \mathbf{a}_i, \mathbf{r}[k] \rangle|^2}{\langle \mathbf{a}_i, \mathbf{a}_i \rangle} \quad (25)$$

$$S_k := S_{k-1} \cup \{i[k]\} \quad (26)$$

$$\bar{\mathbf{x}}[k] := [\mathbf{A}_{S_k}^H \mathbf{A}_{S_k}]^{-1} \mathbf{A}_{S_k}^H \mathbf{y} \quad (27)$$

$$\mathbf{x}[k+1] := \sum_{i \in S_k} \bar{x}_i[k] \mathbf{e}_i \quad (28)$$

$$\mathbf{r}[k+1] := \mathbf{y} - \sum_{i \in S_k} \bar{x}_i[k] \mathbf{a}_i \quad (29)$$

$$k := k+1 \quad (30)$$

ここに,  $\mathbf{a}_i$  は行列  $\mathbf{A}$  の  $i$  列目の列ベクトルである. また,  $\mathbf{A}_{S_k}$  は, 行列  $\mathbf{A}$  のうち, インデックス集合  $S_k$  に記憶されたインデックスの列ベクトルのみを格納した行列を表す. 加えて,  $\mathbf{e}_i$  は  $i$  番目の成分にのみ値を持つ標準基底を表す. 式 (29) に示す  $\mathbf{r}[k+1]$  は,  $k+1$  回目の反復計算における残差ベクトルである. なお, 式 (27) における逆行列の計算には, 特異値分解を用いる. 式 (25)–(30) に示す反復計算は, 以下の終了条件のいずれか 1 つが満足されるまで繰り返し実行する.

$$\|\mathbf{r}[k+1]\|_2 < \epsilon_{\text{OMP}} \quad (31)$$

$$s_{\min}[k] < \epsilon_{\text{SVD}} \quad (32)$$

$$k = M \quad (33)$$

ここに,  $\|\cdot\|_2$  は  $l^2$  ノルム,  $s_{\min}(k)$  は行列  $\mathbf{A}_{S_k}$  の最小特異値を表す. ただし, この終了条件の判定は式 (30) の計算の後に実行される. OMP における反復計算が  $k = N^*$  において終了条件を満足したとき, 近似係数は, 形式上, 以下のように表現できる.

$$\tilde{\mathbf{c}} = \mathbf{x}[N^*] \quad (34)$$

式 (34) で与えられるベクトル  $\tilde{\mathbf{c}}$  の非ゼロ成分の個数は  $N^*$  であり, 最終的な基底ベクトルの数は  $M$  個以下となる. 加えて, OMP では  $N > M$  (劣決定) として計算を実行することも可能であり, この場合は基底ベクトルの取捨選択が可能となる.

式 (23) に示す通り, OMP における目的関数は  $l^0$  擬似ノルムであり, 基底ベクトル  $\mathbf{a}_i$  (行列  $\mathbf{A}$  の列ベクトル) と線形システムの残差ベクトル  $\mathbf{r}[k]$  の関係のみで解を決定する. そのため, OMP では, 勾配法における目的関数の勾配計算や, 正則化における正則化パラメータの設定が不要である. また, OMP は行列  $\mathbf{A}$  が行フルランクであれば最大  $M$  回の反復で解が得られる. さらに言えば, OMP は貪欲法であるものの, 線形システム  $\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x}$  に十分スパースな解が存在すれば, 最適解を有限ステップで求められることも知られている (13).

### 2.4. OMP に基づくメッシュフリー型解析手法

本節では, 本論文で用いる OMP に基づくメッシュフリー型解析手法である OMP-MFS, OMP-Mf( $s$ ) について説明する. OMP-MFS は OMP による源点選択を組み込んだ MFS であり, OMP-Mf( $s$ ) との比較のために用いる. OMP-Mf( $s$ ) は, 本論文で開発を行った解析手法である. この解析手法では, 基底関数に基本解と平面波の両方を用い, OMP を用いた近似係数の決定を  $s$  段階に分けて実行する. ただし,  $s = 1, 2$  とし, それぞれについて OMP-MFS に続けて説明する.

解析手法の説明の前に, MFS の成り立ちと OMP-Mf( $s$ ) の位置付けについて説明する. 本論文で開発する解析手法は MFS を基礎としている. MFS は間接法に分類され, 境界要素法 (BEM; boundary element method) との関連も指摘されている. 具体的には, BEM の拡張である仮想境界間接法

において、仮想境界上の分布密度を離散的に表現することで MFS を導出できる<sup>(11)</sup>。また、MFS は Trefftz 法に分類することができることも知られている<sup>(12)</sup>。このようにして得られる MFS は、原則として基底関数に 1 種類の関数（基本解）を用いる。これに対して、OMP-Mf( $s$ ) は、基底関数に基本解と平面波の 2 種類の関数を用いる点に特徴がある。

#### 2.4.1. OMP-MFS

OMP-MFS では、式 (9), (10) における既知項を次式で与える。

$$\bar{u}^{[1]}(\mathbf{x}) = \tilde{u}^{\text{in}[1]}(\mathbf{x}) + \tilde{u}^{\text{re}[1]}(\mathbf{x}) \quad (35)$$

$$\bar{u}^{[2]}(\mathbf{x}) = \tilde{u}^{\text{tr}[2]}(\mathbf{x}) \quad (36)$$

$$\bar{t}^{[1]}(\mathbf{x}) = \tilde{t}^{\text{in}[1]}(\mathbf{x}) + \tilde{t}^{\text{re}[1]}(\mathbf{x}) \quad (37)$$

$$\bar{t}^{[2]}(\mathbf{x}) = \tilde{t}^{\text{tr}[2]}(\mathbf{x}) \quad (38)$$

ここに、 $(\cdot)^{\text{in}}$  は入射波、 $(\cdot)^{\text{re}}$  は反射波、 $(\cdot)^{\text{tr}}$  は透過波を表す。これらの反射波・透過波は、文献<sup>(14)</sup>をもとに解析的に計算する。また、基底関数は基本解を用いて次式で与える。

$$\tilde{a}_k^{[p]}(\mathbf{x}) = \tilde{U}^{[p]}(\mathbf{x}, \mathbf{y}_k^{[p]}) \quad (39)$$

$$\tilde{b}_k^{[p]}(\mathbf{x}) = \tilde{T}^{[p]}(\mathbf{x}, \mathbf{y}_k^{[p]}) \quad (40)$$

ただし、 $k = 1, 2, \dots, N_y$  であり、 $N_a = N_y$  となる。OMP-MFS では、基底関数である基本解を用いて、界面剥離による散乱波を表現する。

#### 2.4.2. OMP-Mf(1)

OMP-Mf(1) は、基底関数に基本解と平面波の両方を用い、それらに対応する近似係数の計算を 1 段階で実行する。OMP-Mf(1) では、式 (9), (10) における既知項を次式で与える。

$$\bar{u}^{[1]}(\mathbf{x}) = \tilde{u}^{\text{in}[1]}(\mathbf{x}) \quad (41)$$

$$\bar{u}^{[2]}(\mathbf{x}) = 0 \quad (42)$$

$$\bar{t}^{[1]}(\mathbf{x}) = \tilde{t}^{\text{in}[1]}(\mathbf{x}) \quad (43)$$

$$\bar{t}^{[2]}(\mathbf{x}) = 0 \quad (44)$$

つまり、既知項は入射波のみとなる。また、基底関数は次式で与える。

$$\tilde{a}_k^{[p]}(\mathbf{x}) = \tilde{U}^{[p]}(\mathbf{x}, \mathbf{y}_k^{[p]}) \quad (45)$$

$$\tilde{a}_{N_y+l}^{[p]}(\mathbf{x}) = \tilde{U}^{\text{PW}[p]}(\mathbf{x}, \mathbf{p}_l^{[p]}) \quad (46)$$

$$\tilde{b}_k^{[p]}(\mathbf{x}) = \tilde{T}^{[p]}(\mathbf{x}, \mathbf{y}_k^{[p]}) \quad (47)$$

$$\tilde{b}_{N_y+l}^{[p]}(\mathbf{x}) = \tilde{T}^{\text{PW}[p]}(\mathbf{x}, \mathbf{p}_l^{[p]}) \quad (48)$$

ただし、 $k = 1, 2, \dots, N_y$  および  $l = 1, 2, \dots, N_p$  であり、 $N_a = N_y + N_p$  となる。基底関数は基本解と平面波によって構成されるため、界面剥離による散乱波のみならず、反射波・透過波（いずれも平面波）を表現するための近似係数を 1 段階で決定する。

#### 2.4.3. OMP-Mf(2)

OMP-Mf(2) は、OMP-Mf(1) と同様に基底関数に基本解と平面波の両方を用いる。ただし、近似係数の計算は 2 段階で

実行する。以下では、第  $s$  段階に関する物理量には  $(\cdot)^{(s)}$  を付けて区別する。第 1 段階では、既知項を以下の式を用いる。

$$\bar{u}^{[1](1)}(\mathbf{x}) = \tilde{u}^{\text{in}[1]}(\mathbf{x}) \quad (49)$$

$$\bar{u}^{[2](1)}(\mathbf{x}) = 0 \quad (50)$$

$$\bar{t}^{[1](1)}(\mathbf{x}) = \tilde{t}^{\text{in}[1]}(\mathbf{x}) \quad (51)$$

$$\bar{t}^{[2](1)}(\mathbf{x}) = 0 \quad (52)$$

また、基底関数は、平面波を用いて次式で与える。

$$\tilde{a}_k^{[p](1)}(\mathbf{x}) = \tilde{U}^{\text{PW}[p]}(\mathbf{x}, \mathbf{p}_k^{[p]}) \quad (53)$$

$$\tilde{b}_k^{[p](1)}(\mathbf{x}) = \tilde{T}^{\text{PW}[p]}(\mathbf{x}, \mathbf{p}_k^{[p]}) \quad (54)$$

ただし、 $k = 1, 2, \dots, N_p$  であり、 $N_a^{(1)} = N_p$  となる。第 1 段階では、平面波に関する近似係数  $\tilde{c}_k^{[p](1)}$  を決定する。そのためには境界条件の修正が必要であり、具体的には剥離部分  $S_1$  においても境界条件を式 (7), (8) から式 (5), (6) に置き換えて、近似係数  $\tilde{c}_k^{[p](1)}$  を求める。

第 2 段階では、既知項を以下の式で与える。

$$\bar{u}^{[1](2)}(\mathbf{x}) = \bar{u}^{[1](1)}(\mathbf{x}) + \sum_{k=1}^{N_a^{(1)}} \tilde{a}_k^{[1](1)}(\mathbf{x}) \tilde{c}_k^{[1](1)} \quad (55)$$

$$\bar{u}^{[2](2)}(\mathbf{x}) = \bar{u}^{[2](1)}(\mathbf{x}) + \sum_{k=1}^{N_a^{(1)}} \tilde{a}_k^{[2](1)}(\mathbf{x}) \tilde{c}_k^{[2](1)} \quad (56)$$

$$\bar{t}^{[1](2)}(\mathbf{x}) = \bar{t}^{[1](1)}(\mathbf{x}) + \sum_{k=1}^{N_a^{(1)}} \tilde{b}_k^{[1](1)}(\mathbf{x}) \tilde{c}_k^{[1](1)} \quad (57)$$

$$\bar{t}^{[2](2)}(\mathbf{x}) = \bar{t}^{[2](1)}(\mathbf{x}) + \sum_{k=1}^{N_a^{(1)}} \tilde{b}_k^{[2](1)}(\mathbf{x}) \tilde{c}_k^{[2](1)} \quad (58)$$

また、基底関数は、基本解を用いて次式で与える。

$$\tilde{a}_k^{[p](2)}(\mathbf{x}) = \tilde{U}^{[p]}(\mathbf{x}, \mathbf{y}_k^{[p]}) \quad (59)$$

$$\tilde{b}_k^{[p](2)}(\mathbf{x}) = \tilde{T}^{[p]}(\mathbf{x}, \mathbf{y}_k^{[p]}) \quad (60)$$

ただし、 $k = 1, 2, \dots, N_y$  であり、 $N_a^{(2)} = N_y$  となる。第 2 段階では健全部分と剥離部分の両方を考慮するため、境界条件は式 (5)-(8) を用いて近似係数  $\tilde{c}_k^{[p](2)}$  を決定する。

OMP-Mf(2) において、第 1 段階では境界条件として式 (5), (6) を用いており、入射波は平面波であるため、このとき未知となる波動場（反射波・透過波）は平面波のみで表現可能である。そのため、第 1 段階では平面波のみを基底関数として用いる。一方、第 2 段階では界面剥離による散乱波が発生し、この散乱波は放射条件を満たす基本解を用いて表現する必要がある。そのため、第 2 段階では基本解のみを基底関数として用いる。OMP-Mf(2) は OMP-Mf(1) とは異なり、平面波によって構成される波動場のみを先に平面波で近似し、円筒波で表現されるべき波動場を後から基本解で近似する。このように、OMP-Mf( $s$ ) の段階数  $s$  は、表現したい波動場の性質に基づいて適切に決定する必要がある。仮に、本節に示した OMP-Mf(2) において第 1 段階と第 2 段階を入れ替えた場合、本来は平面波で表現されるべき反射波・透過波が基本解によって表現されてしまう可能性がある。

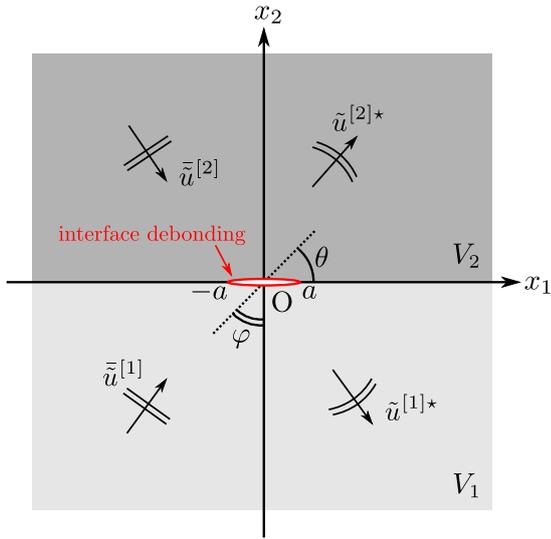


Fig. 2 Analytical model.

### 3. 数値解析例

#### 3.1. 解析条件

解析モデルを Fig.2 に示す. 領域  $V_1$  と  $V_2$  の界面は  $x_2 = 0$  とし, 界面における剥離部分の長さは  $2a$  とした. 解析領域を構成する弾性体の材料定数は, 密度を  $\rho_1 = \rho_2 = 1$  とし, せん断弾性係数を  $\mu_1 = 1, \mu_2 = 0.25$  とした. また, 角周波数は  $\omega = \pi$  とした. 界面き裂の代表長さ  $a$  は, 領域  $V_1$  における面外波動の波長  $\lambda_1$  との関係が  $\lambda_1 = 2a$  となるように設定した. 入射波である平面波の振幅は  $u_0 = 1$  とし, その進行方向は  $\varphi^{\text{in}} = 0.25\pi$  ( $\theta^{\text{in}} = 0.625\pi$ ) とした. ただし,  $\varphi$  および  $\theta$  の角度の取り方は, Fig.2 に示す通りとした.

本論文で取り扱うメッシュフリー型解析手法の適用において, 選点  $\mathbf{x}_i$  は界面上の  $x_{i,1} \in (-10a, 10a)$  を満たす範囲に, 等間隔に配置した. 選点の個数は  $N_x = 200$  とした. 近似解の表現において, 基本解の源点  $\mathbf{y}_k^{[p]}$  は次式で与えた.

$$\mathbf{y}_k^{[p]} = \mathbf{x}_j + \begin{Bmatrix} 0 \\ \Delta y_0 \end{Bmatrix} + (-1)^{p-1} (l-1) \begin{Bmatrix} 0 \\ \Delta y \end{Bmatrix}; \quad k = (l-1)N_x + j \quad (61)$$

ただし,  $l = 1, 2, \dots, N_l$  および  $j = 1, 2, \dots, N_x$  である. このとき, 源点の個数は  $N_y = N_l N_x$  となる. 本論文では,  $N_l = 20, \Delta y_0 = \Delta y = 0.1$  とした. 式 (61) を用いて計算した源点  $\mathbf{y}_k^{[p]}$  および選点  $\mathbf{x}_i$  の配置は, Fig.3 に示す通りである. また, 近似解の表現において, 平面波の進行方向ベクトル  $\mathbf{p}_k^{[p]}$  は次式で与えた.

$$\mathbf{p}_k^{[p]} = \begin{Bmatrix} \cos \theta_k^{[p]} \\ \sin \theta_k^{[p]} \end{Bmatrix}; \quad k = 1, 2, \dots, N_p \quad (62)$$

ただし,

$$\theta_k^{[p]} = \theta_{\min}^{[p]} + (k-1)\Delta\theta^{[p]} \quad (63)$$

$$\Delta\theta^{[p]} = \frac{\theta_{\max}^{[p]} - \theta_{\min}^{[p]}}{N_p - 1} \quad (64)$$

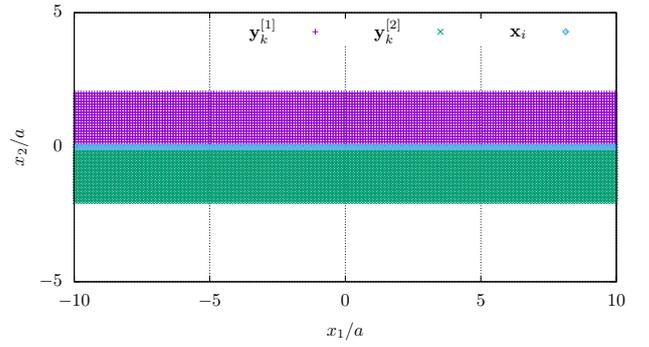


Fig. 3 The location of source points  $\mathbf{y}_k^{[p]}$  and collocation points  $\mathbf{x}_i$ .

Table 1 The number of equations and unknowns

	$M$	$N$
OMP-MFS	400	8000
OMP-Mf(1)	400	16000
OMP-Mf(2) stage 1	400	8000
OMP-Mf(2) stage 2	400	8000

とした. 本論文では, 進行方向ベクトルの個数を  $N_p = 20N_x$  とした. また, 進行方向ベクトルを与える角度の範囲は,  $(\theta_{\min}^{[1]}, \theta_{\max}^{[1]}) = (1.5\pi, 2\pi)$ ,  $(\theta_{\min}^{[2]}, \theta_{\max}^{[2]}) = (0, 0.5\pi)$  とした. なお, Table 1 に各解析手法における方程式の数  $M$  と未知数の数  $N$  の関係をまとめる. いずれの解析手法においても, 劣決定問題を取り扱っていることが確認できる. 加えて, 式 (31), (32) に示す OMP の終了条件に含まれるパラメータは,  $\epsilon_{\text{OMP}} = 10^{-10}$ ,  $\epsilon_{\text{SVD}} = 10^{-10}$  で与えた.

#### 3.2. 解析結果

##### 3.2.1. 界面における変位・表面力

界面における変位および表面力の計算結果を比較する. 比較には, メッシュフリー型解析手法 (OMP-MFS, OMP-Mf( $s$ )) による近似解に加え, BEM による近似解を参照解として用いる. BEM による解析では, 界面の影響によって生じる平面波 (反射波, 透過波) を既知とせず, 全変位に関する境界積分方程式を用いた. そのため, BEM による近似解には無限長の境界に配置されるべき要素を打ち切ることで生じる影響が含まれるが, ここでは  $x_1 \in [-80a, 80a]$  の範囲に境界要素を配置することで, その影響を可能な限り取り除いた. なお, 境界積分方程式の離散化には一定要素を用いた.

Fig.4 および Fig.5 に, 領域  $V_1$  に対する境界における変位および表面力を示す. Fig.4 に示す変位の計算結果では, 解析手法ごとに値がわずかに異なるものの概ね等しい値が得られた. また, Fig.5 に示す表面力の計算結果では, 境界  $S_1^-$  において表面力がゼロとなる点も含めて, 各解析手法の近似解は概ね一致した.

Fig.6 および Fig.7 に, 領域  $V_2$  に対する境界における変位および表面力を示す. これらの図に示す結果も, Fig.4 および Fig.5 に示す結果と同様に, 各解析手法によって得られる近似

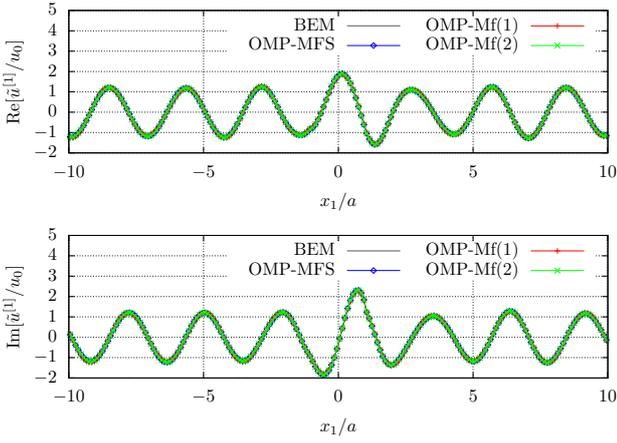


Fig. 4 Displacement distribution on the boundary of domain  $V_1$ .

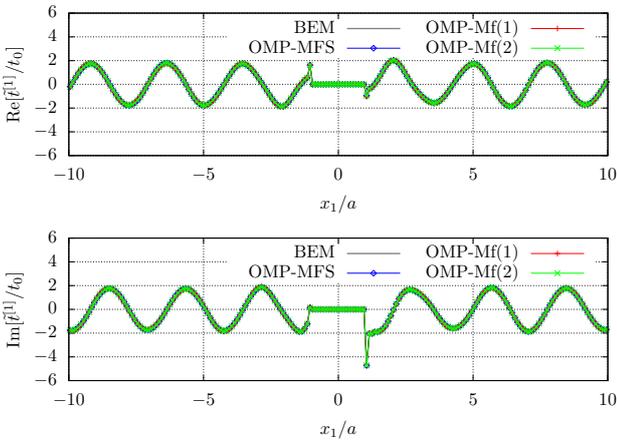


Fig. 5 Traction distribution on the boundary of domain  $V_1$  ( $t_0 = \mu_1 u_0/a$ ).

解が概ね一致していることが確認された。解析条件に示した通り、OMP-MFS、OMP-Mf( $s$ )は、選点  $\mathbf{x}_i$  を  $x_{i,1} \in (-10a, 10a)$  の範囲に配置している。本節に示した結果から、境界値の計算では、OMP-MFS、OMP-Mf( $s$ )において選点を配置する範囲（選点の配置を打ち切る範囲）による影響は顕著に出現しないことが確認された。

### 3.2.2. OMP-Mf( $s$ ) による近似解の傾向

領域  $V_p$  の変位分布の比較から、OMP-Mf( $s$ )によって得られる近似解の傾向について整理する。比較には、OMP-Mf( $s$ )とOMP-MFSによって計算された変位の差（以下、変位差分と呼ぶ）を用いる。比較対象としてOMP-MFSを用いる理由は、OMP-Mf( $s$ )による近似解と同様の表現を用いているためである。Fig.8に、OMP-Mf(1)とOMP-MFSの変位差分の実部を示す。同図において、変位差分は領域  $V_p$  に広く分布しており、その値はFig.4およびFig.6に示した境界値の変位と比較して無視できない程度の大きさとなった。また、同位相面の分布から、この変位差分は平面波（反射波、透過波）の近似誤差に起因するものと考えられる。

Fig.9に、OMP-Mf(2)とOMP-MFSの変位差分の実部を示す。同図に示す結果から、OMP-Mf(2)ではOMP-Mf(1)の場合と比較して変位差分が比較的小さくなることが確認さ

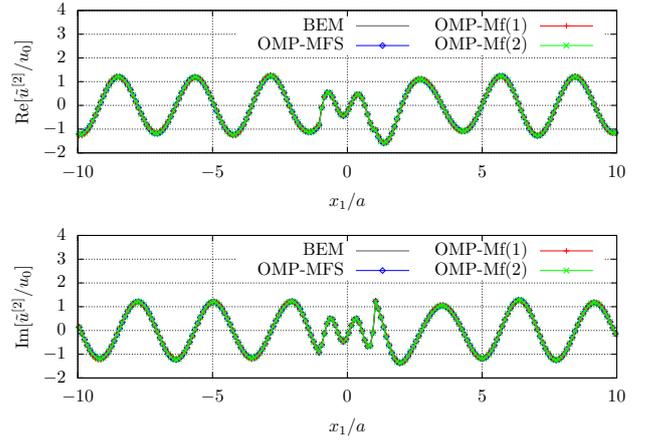


Fig. 6 Displacement distribution on the boundary of domain  $V_2$ .

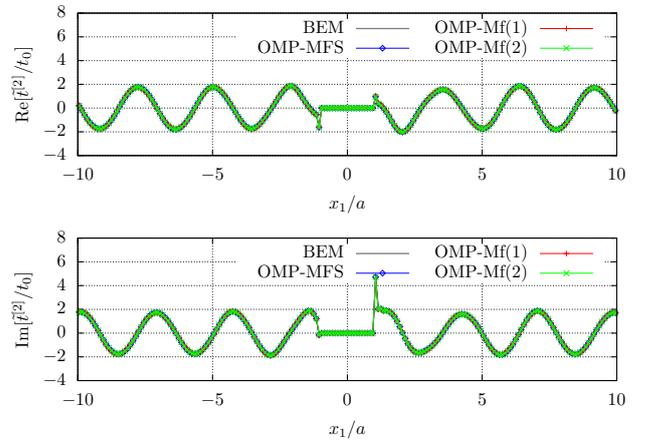


Fig. 7 Traction distribution on the boundary of domain  $V_2$  ( $t_0 = \mu_1 u_0/a$ ).

れた。可視化領域内部の  $\mathbf{x} = [-10a, 10a]^T$  の近傍において、変位差分が相対的に大きくなった。変位差分の同位相面の分布から、この変位差分についてもOMP-Mf(1)と同様に、平面波の近似誤差に起因して生じていると考えられる。この点をより詳細に調べるため、次節では開発手法における基底関数の選択傾向について議論する。

### 3.2.3. OMP-Mf( $s$ ) における基底関数の選択傾向

OMP-Mf( $s$ )において選択された基底関数の傾向について考察する。Table 2に、各解析手法においてOMPによって選択された基底関数の個数をまとめる。この表において、 $N_y^{[p]}$ は領域  $V_p$  に関する基本解の個数、 $N_p^{[p]}$ は領域  $V_p$  に関する平面波の個数を表す。この結果から、OMP-MFSとOMP-Mf(2)では、各領域における基本解の個数が等しくなった。また、OMP-Mf(1)とOMP-Mf(2)では、解表現に用いる平面波の個数が大きく異なっていることが確認できる。

Fig.10に、OMP-Mf( $s$ )において選択された平面波の進行方向ベクトル  $\mathbf{p}_k^{[p]}$  から得られる進行方向の角度  $\theta$  と、それに対応する近似係数の絶対値を示す。同図には、解析的に求めた反射係数および透過係数の値もあわせて示している。これらの反射係数・透過係数は、OMP-MFSにおいて反射波  $\tilde{u}^{\text{re}[1]}(\cdot)$  および透過波  $\tilde{u}^{\text{tr}[2]}(\cdot)$  の計算に用いているため、これ

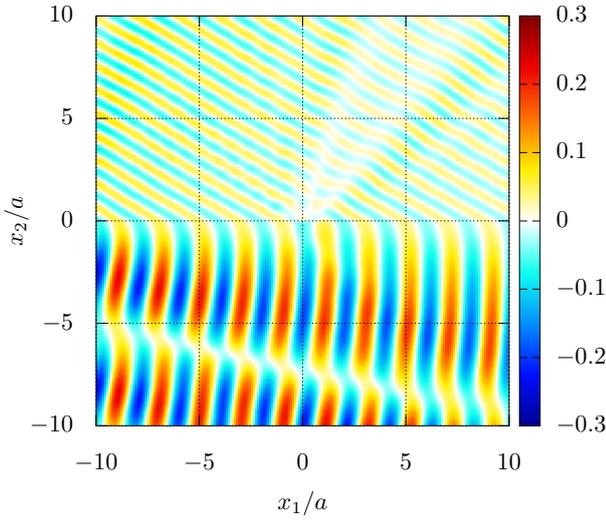


Fig. 8 The real part of displacement difference between OMP-Mf(1) and OMP-MFS.

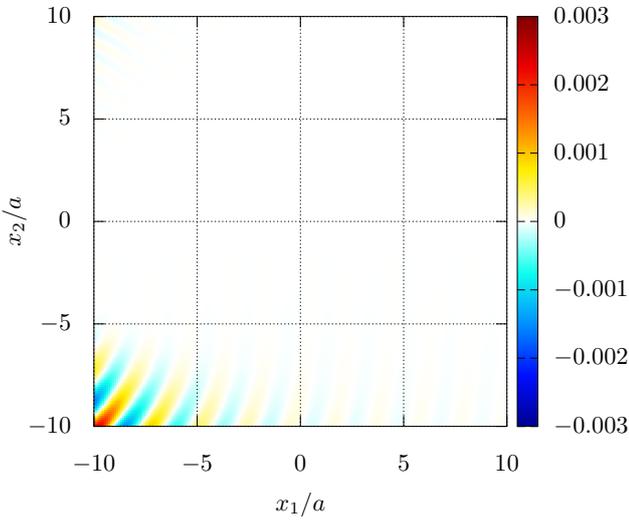


Fig. 9 The real part of displacement difference between OMP-Mf(2) and OMP-MFS.

らの値に近い値が得られていれば、反射波・透過波を良く近似していることになる。Fig.10の上図は、領域  $V_1$  における平面波（反射波）に関する計算結果に対応する。この図では、OMP-Mf(1)、OMP-Mf(2)ともに  $\theta/\pi = 0.175$  の反射係数に近い値が得られている。また、OMP-Mf(2)では  $\theta/\pi = 0.175$  以外の成分が比較的小さくなったが、OMP-Mf(1)では他にも近似係数の絶対値が大きい成分が含まれていた。これらがFig.8に示すような変位差分を生じさせた原因と考えられる。これに対して、Fig.10の下図は、領域  $V_2$  における平面波（透過波）に関する計算結果に対応する。この図では、OMP-Mf(1)、OMP-Mf(2)ともに透過係数に概ね一致する結果が得られた。しかし、OMP-Mf(1)では透過波の進行方向から離れた角度に近似係数の絶対値が比較的大きな成分が確認された。これらが影響した結果、OMP-Mf(1)の変位差分はOMP-Mf(2)と比較して大きくなった考えられる。

続けて、基本解の源点の選択傾向について考察する。OMPによって選択された源点の配置とそれに対応する近似係数の

Table 2 The number of basis functions selected by OMP

	$N_y^{[1]*}$	$N_y^{[2]*}$	$N_p^{[1]*}$	$N_p^{[2]*}$
OMP-MFS	200	200	-	-
OMP-Mf(1)	198	195	3	4
OMP-Mf(2) stage 1	-	-	23	37
OMP-Mf(2) stage 2	200	200	-	-

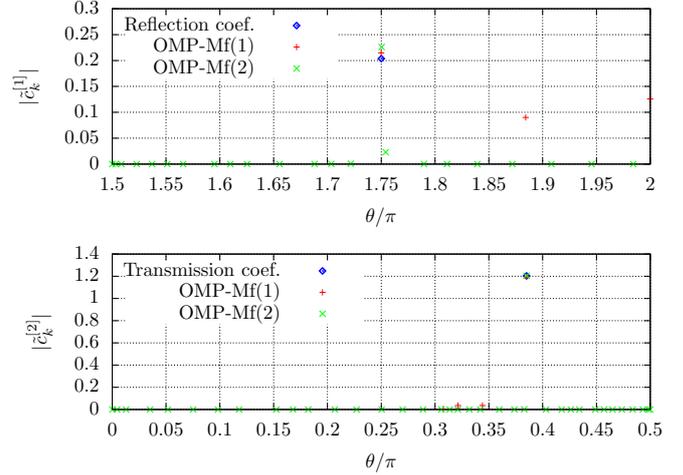


Fig. 10 The angle of propagation of plane waves and the corresponding approximation coefficients.

絶対値を、Fig.11-Fig.13に示す。ただし、Fig.11はOMP-MFS、Fig.12はOMP-Mf(1)、Fig.13はOMP-Mf(2)の結果に対応する。なお、これらの図において、近似係数の絶対値がゼロとなる源点はあらかじめ取り除いてある。これらの結果を比較すると、いずれの解析手法においても、境界近傍に源点が密に配置されていることがわかる。また、健全部分と剥離部分の境界と界面から離れた位置に、近似係数の絶対値が大きな源点が分布することが確認された。加えて、OMP-MFSとOMP-Mf(2)の結果では、源点の配置が一致し、近似係数の絶対値の値が概ね等しくなった（両者の差は  $10^{-9}$  程度であった）。以上の結果から、平面波と基本解による波動場を同時に決定するOMP-Mf(1)よりも、それらを2つの段階に分割して決定するOMP-Mf(2)の方が、解析的に平面波を取り扱うOMP-MFSに近い解析を実現できることが確認された。

#### 4. おわりに

本論文では、弾性体の界面剥離による面外波動散乱問題を対象に、OMPに基づくメッシュフリー型解析手法を開発し、その有効性を確認した。対象とする問題では入射波を平面波に設定し、すべてのメッシュフリー型解析手法において、近似解を平面波と基本解による円筒波の重ね合わせによって表現した。本論文における開発手法であるOMP-Mf(s)は、近似係数の決定をs段階に分割して行う解析手法であり、 $s = 1, 2$ とした場合の計算結果の比較を行った。OMP-Mf(1)および

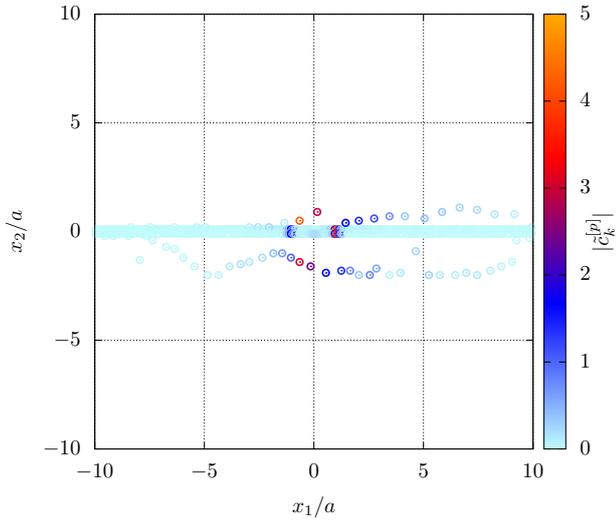


Fig. 11 The location of the source points and the corresponding approximation coefficients (OMP-MFS).

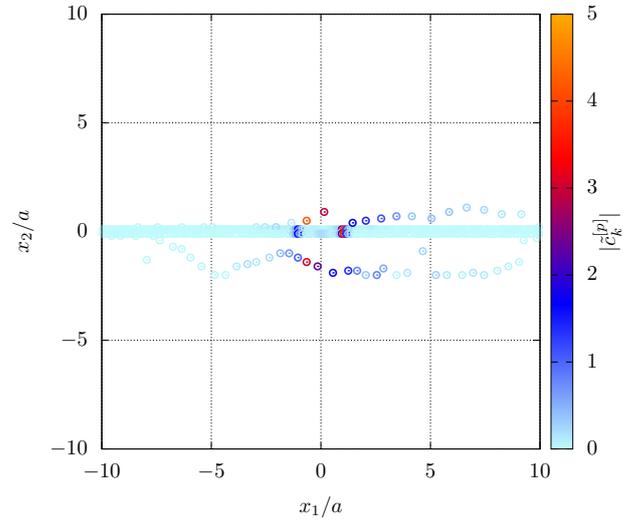


Fig. 13 The location of the source points and the corresponding approximation coefficients (OMP-Mf(2)).

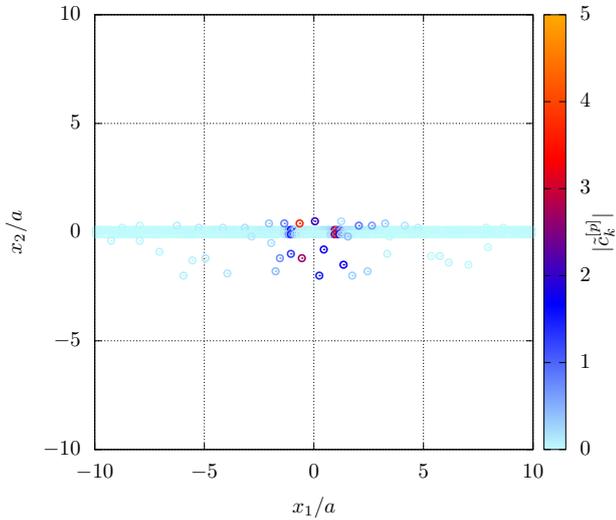


Fig. 12 The location of the source points and the corresponding approximation coefficients (OMP-Mf(1)).

OMP-Mf(2) における結果の比較から、境界値については両者に大きな差は生じなかったが、領域内部の変位分布については OMP-Mf(2) が優れていることが確認された。なお、本論文では計算コストに関する定量的な考察は行っていないが、開発手法は OMP による基底関数の探索を含むため、従来の MFS と比較して計算コストは高くなる。また、この傾向は、解析に用いる基底関数の数の増加に伴い顕著となる。今後は、OMP-Mf( $s$ ) を界面剥離を有する多層構造弾性体に対する波動散乱問題に適用し、その有効性を確認する予定である。

**謝辞：**本研究は、JSPS 科研費 22K04277 の助成を受けたものです。この場を借りて感謝申し上げます。

### 参考文献

(1) Boström, A.: Elastic wave scattering from an interface crack: Antiplane strain, *J. Appl. Mech.*, **54**(1987),

pp. 503–508.  
 (2) Hirose, S., Kitahara, M.: Scattering of elastic waves by interface cracks between dissimilar materials, *Review of Progress in Quantitative Nondestructive Evaluation*, **12**(1993), pp. 1467–1474.  
 (3) Golub, M.V., Doroshenko, O.V.: Boundary integral equation method for simulation scattering of elastic waves obliquely incident to a doubly periodic array of interface delaminations, *J. Comput. Phys.*, **376**(2019), pp. 675–693.  
 (4) Fairweather, G., Karageorghis, A., Martin, P.A.: The method of fundamental solutions for scattering and radiation problems, *Eng. Anal. Bound. Elem.*, **27**(2003), pp. 759–769.  
 (5) Shigeta, T., Young, D.L., Liu, C.S.: Adaptive multi-layer method of fundamental solutions using a weighted greedy QR decomposition for the Laplace equation, *J. Comput. Phys.*, **231**(2012), pp. 7118–7132.  
 (6) Li, M., Chen, C.S., Karageorghis, A.: The MFS for the solution of harmonic boundary value problems with non-harmonic boundary conditions, *Comput. Math. Appl.*, **66**(2013), pp. 2400–2424.  
 (7) Lin, J., Lamichhane, A.R., Chen, C.S., Lu, J.: The adaptive algorithm for the selection of sources of the method of fundamental solutions, *Eng. Anal. Bound. Elem.*, **95**(2018), pp. 154–159.  
 (8) Oh, J., Zhu, H., Fu, Z.: An adaptive method of fundamental solutions for solving the Laplace equation, *Comput. Math. Appl.*, **77**(2019), pp. 1828–1840.  
 (9) 永原正章：スパースモデリング–基礎から動的システムへの応用–, (2017), コロナ社.  
 (10) 古川陽, 松村耕佑, 斎藤隆泰, 廣瀬壮一：異方性材料の面外波動問題に対する基本解近似解法の適用, *土木学会論文集*, **79**(2023), 論文 No.22-15024.

- (11) 結城良治, 木須博行: 境界要素法による弾性解析, (1987), 培風館.
- (12) Pluymers, B., Van Hal, B. Vandepitte, D., Desmet, W.: Trefftz-based methods for time-harmonic acoustics, Arch. Comput. Methods Eng., **14**(2007), pp. 343–381.
- (13) Elad, M. 著, 玉木徹訳: スパースモデリング- $l_1/l_0$  ノルム最小化の基礎理論と画像処理への応用, (2016), 共立出版.
- (14) Achenbach, J.D.: Wave Propagation in Elastic Solids, (1973), North-Holland Publishing Company.



# 複数車両を参照する数理モデルによる交差点を左折する 車両隊列シミュレーション

## VEHICLE PLATOON SIMULATION TURNING RIGHT AT INTERSECTION ACCORDING TO MULTIPLE LEADER VEHICLE-FOLLOWING MODEL

坂本 浩規<sup>1)</sup>, 玉城 龍洋<sup>2)</sup>, 北 栄輔<sup>3)</sup>

Hiroki SAKAMOTO, Tatsuhiro TAMAKI and Eisuke KITA

- 1) 名古屋大学大学院情報科学研究科 (〒 464-8601 名古屋市千種区不老町 1)  
2) 沖縄工業高等専門学校メディア情報工学科 (〒 905-2171 沖縄県名護市辺野古 905)  
3) 名古屋大学大学院情報科学研究科 (〒 464-8601 名古屋市千種区不老町 1, E-mail: kita@i.nagoya-u.ac.jp)

Vehicle Platoon is the method of platooning the vehicles with a short vehicle-to-vehicle distance. It is effective to increase the traffic amount safely without constructing new roads. In the previous study, the mathematical model for controlling the vehicle velocity was defined by the car-following model. A theoretical study revealed that each vehicle in a platoon could control its velocity from the information of only the nearest frontal vehicle and the lead vehicle of the platoon. When a platoon turns left at a corner, the lead vehicle in the platoon changes in order, so the following vehicles must change the lead vehicle they should refer to. In this study, model parameters are determined by numerical simulation and then, their validity is discussed through experiments.

**Key Words:** Car-Following Model, Vehicle Platoon, Simulation, Experiment

### 1. 緒論

交通渋滞は物流コストの増大をもたらすとともに、騒音や空気汚染などの原因ともなっている。様々な分野の研究者が、交通渋滞の解決方法に取り組んでいる。それらの一つに、高度道路交通システム (Intelligent Transportation Systems, ITS) の分野における隊列走行がある<sup>(1)</sup>。

隊列走行においては、短い車間距離において、複数の車両が一行で走行する。車間距離を詰めることで交通容量を増大できるとともに、追従車両の空気抵抗が低減され、省エネルギー効果も見込まれている。しかし、安全な隊列走行を実現するためには、各種センサーなどを用いた車両の速度と行動の自動制御システムが必要となる。

本研究では、隊列走行する車両の速度制御について述べる。制御モデルは、いわゆる車両追従モデルに基づいている。車両追従モデルは、前方車両との車間距離や速度差などから自車両の速度または加速度を制御するモデルである<sup>(2, 3, 4)</sup>。これらのモデルでは直前方車両 1 台だけを参照する機会が多いのに対して、複数の前方車両を参照するモデルも提案されている<sup>(5, 6)</sup>。例えば、牛田<sup>(5)</sup>は、前方の複数台の車両との

速度差を用いた多台参照 Chandler モデルに基づき速度制御を適用している。朝比奈<sup>(6)</sup>は、直前方車両との車間距離と隊列の先頭車両との速度差を用いて速度制御を行っている。いずれにおいても、自車両のすぐ前方を走行する車両と隊列の先頭を走行する車両の 2 台を参照するモデルが有効であるとしている。

ところで、一般道を走行する場合、隊列の合流や分離、さらに、交差点の右左折において隊列の組み替えが起こり、そのたびに隊列の先頭車両が入れ替わることになる。本研究では、そのもっとも簡単な場合として、車両隊列が交差点で左折する場合を考える。交差点を左折するとき、隊列は左折した車両とその直後の車両で 2 つの隊列に分かれることになる。それゆえ、隊列の車両が左折するたびに、後続車両にとっての先頭車両が入れ替わり、速度制御則が更新されるようにする。数値シミュレーションとロボット車両<sup>(7)</sup>を用いた実験を通して、モデルの影響について検討する。

本論文は、以下のように構成されている。本節は緒論として、研究目的について述べた。第 2 節では、本研究で用いる速度の制御モデルについて述べる。第 3 節では、計算機シミュレーション結果を示し、第 4 節では、LEGO MINDSTORMS NXT による実験結果隊列走行実験について述べる。第 5 節

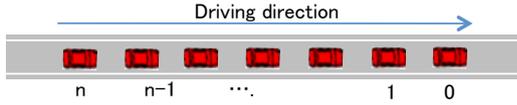


図1  $n$  台の車両からなる車両隊列

では、得られた結論についてまとめる.

## 2. 車両追従モデル

### 2.1. Chandler モデル

一般に、車両追従モデルでは、車両の速度や加速度を他車両との車間距離や速度差などの情報を用いて制御する. Chandler らの提案したモデルは次式で与えられる (2).

$$\ddot{x}_n(t + \Delta t) = a(\dot{x}_{n-1}(t) - \dot{x}_n(t)) \quad (1)$$

ここで、 $x_n(t)$  は時刻  $t$  における車両  $n$  の位置、 $\Delta t$  は応答の遅れ時間、 $a$  は車両  $n$  の直前方車両  $n-1$  に対する感度を表す (図 1). また、 $\dot{x}$ 、 $\ddot{x}$  は、それぞれ車両の速度と加速を示す.

Chandler モデルは直前方を走行する車両との速度差だけを用いるが、これを複数の前方車両を参照するモデルに拡張すると次式となる.

$$\ddot{x}_n(t + \Delta t) = \sum_{j=1}^m a_j(\dot{x}_{n-j}(t) - \dot{x}_n(t)) \quad (2)$$

ここで、 $x_{n-j}$  は車両  $n-j$  の位置、 $a_j$  は車両  $n-j$  に対する車両  $n$  の感度、 $m$  は車両  $n$  の参照する先行車両の数、 $\Delta t$  は遅れ時間を表す. このモデルでは、加速度  $\ddot{x}_n$  は自車両の速度と各先行車両の速度の差  $\dot{x}_{n-j}(t) - \dot{x}_n(t)$  によって制御される. パラメータ  $m$  の値は、Chandler モデルでは  $m = 1$ 、Bexelius モデル (8) では  $m = 2$ 、Wakita モデル (9) では  $m > 1$  となる.

### 2.2. 多台参照 Chandler モデルの安定解析

本研究では車両 4 台で構成される隊列を考える. 先頭より、1 番目の車両を先頭車両とし、つづいて、第 1 追従車両、第 2 追従車両、第 3 追従車両とする. 先頭車両に生じた速度変化の影響は、後方車両に伝わるに従って小さくなる. このことに基づいて、Chandler は安定条件を導いている. 牛田は、複数車両を参照する Chandler モデルについて、安定性解析を行い以下の結果を得ている (5).

#### 2.2.1. 第 1 追従車両の安定性解析結果

第 1 追従車両は先頭車両の直後を走行するので、先頭車両だけを参照する. 遅れ時間を  $\Delta t = 1$  とすると、安定条件は以下ようになる.

$$0 \leq a_1 \leq \frac{1}{2} \quad (3)$$

この結果より、1 台追従車両の感度の最大値は  $a_1 = 1/2$  となる.

#### 2.2.2. 第 2 追従車両の安定性解析結果

第 2 追従車両は先頭車両と第 1 追従車両を参照することができる. 遅れ時間を  $\Delta t = 1$  とすると、安定条件は以下ようになる.

$$0 \leq a_2 \leq \frac{(1 - 2a_1) + \sqrt{1 - 2a_1}}{4} \quad (4)$$

表 1 前方車両に対する運転者の感度

追従車両	感度
1st	$a_1 = \frac{1}{2}$
2nd	$a_1 = \frac{3}{8}, a_2 = \frac{3}{16}$
3rd	$a_1 = \frac{1}{2}, a_2 = 0, a_3 = \frac{1}{6}$

2 台の前方車両に対する運転者の感度の和は次式で定義される.

$$b_2 \equiv a_1 + a_2 \leq \frac{(1 - 2a_1) + \sqrt{1 - 2a_1}}{4} \quad (5)$$

感度の和  $b_2$  は、 $a_1 = 3/8$  と  $a_2 = 3/16$  のとき、最大値  $(b_2)_{\max} = 9/16$  となる.

#### 2.2.3. 第 3 追従車両の安定性解析結果

第 3 追従車両は先頭車両と 2 台の追従車両を参照することができる. 遅れ時間を  $\Delta t = 1$  とすると、安定条件は以下ようになる.

$$0 \leq a_1 + a_2 \equiv b_2 \leq \frac{9}{16} \quad (6)$$

$$0 \leq a_3 \leq \frac{(3 - 4a_1 - 8a_2) + \sqrt{9 - 16(a_1 + a_2)}}{12} \quad (7)$$

前方車両に対する運転者の感度の和は次式で定義される.

$$b_3 \equiv a_1 + a_2 + a_3 \leq \frac{(3 - 4a_1 - 8a_2) + \sqrt{9 - 16(a_1 + a_2)}}{12} \quad (8)$$

感度の和  $b_3$  は、 $a_1 = 1/2$ 、 $a_2 = 0$ 、 $a_3 = 1/6$  のとき、最大値  $(b_3)_{\max} = 2/3$  とする.

各追従車両において前方車両に対する運転者の感度の和が最大となるときの運転者の感度  $a_1$ 、 $a_2$ 、 $a_3$  をまとめると表 1 となる. 第 3 追従車両の場合、前方車両が 3 台いるにもかかわらず参照すべき車両は 2 台だけでよいことになる.

## 3. 計算機シミュレーション

### 3.1. 計算機シミュレーション条件

車両隊列は 4 台の車両からなる. 先頭より先頭車両、第 1 追従車両、第 2 追従車両、第 3 追従車両であり、それぞれ Vehicle 0, Vehicle 1, Vehicle 2, Vehicle 3 とする. 1 タイムステップは実時間では 0.1(s) とする. 初期状態では、各車両とその直前方車両の車間距離を全て等しく 20(m) とし、車両の初期速度を 18(m/s) と設定する. 時刻  $t = 5$ (s) において、先頭車両は急減速して停止し、10 秒間停止した後、時刻  $t = 15$ (s) において再び速度 18(m/s) に加速する.

第 2 追従車両と第 3 追従車両の速度制御には、次に述べるモデル 1 とモデル 2 を用いて、それらの結果を比較する. 直前方車両を参照する Chandler モデルをモデル 1、隊列の先頭車両と自車両の直前方車両の 2 台を参照する Chandler モデルをモデル 2 とする. ただし、第 1 追従車両は前方車両が 1 台しか存在しないので、モデル 2 においても、第 1 追従車両はモデル 1 に従うこととする. 感度は表 1 に示すように与える.

### 3.2. 計算機シミュレーション結果

モデル 1 による結果を図 2 と図 3 に、モデル 2 による結果を図 4 と図 5 に示す. 図 2 と図 4 は各車両の速度変化図、

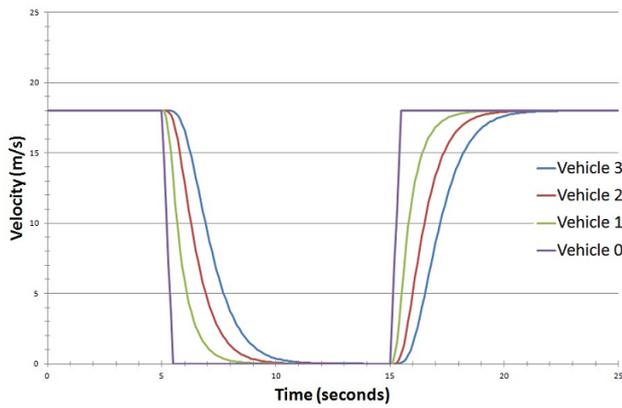


図 2 車両速度の数値シミュレーション (モデル 1)

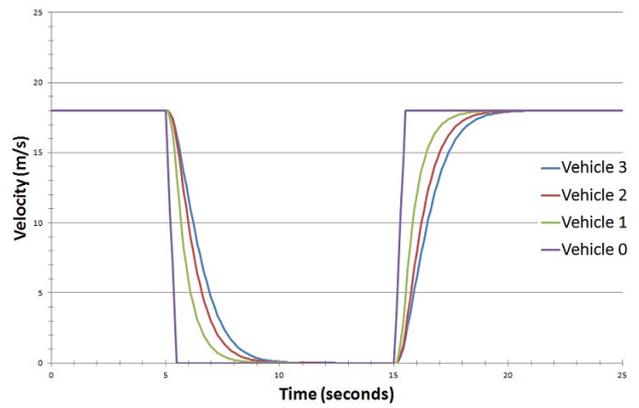


図 4 車両速度の数値シミュレーション (モデル 2)

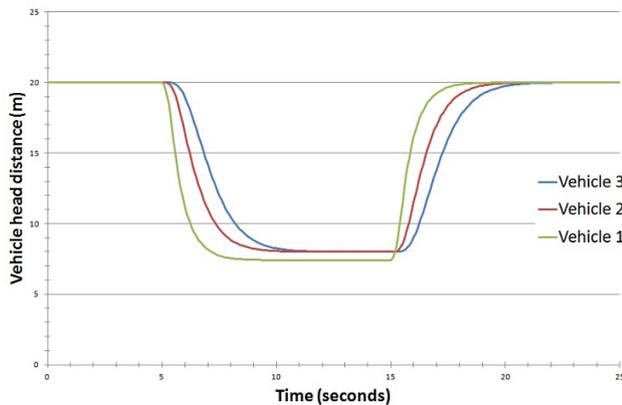


図 3 車間距離の数値シミュレーション (モデル 1)

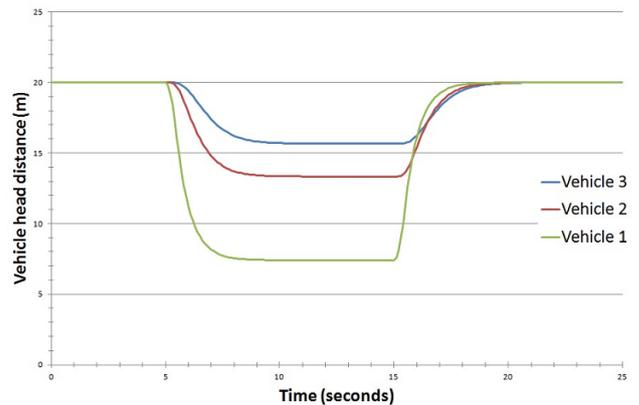


図 5 車間距離の数値シミュレーション (モデル 2)

図 3 と図 5 は各車両の車間距離図である。横軸はシミュレーション時間、縦軸は車両速度または車間距離を示す。車両にはラベル Vehicle 0, Vehicle 1, Vehicle 2, Vehicle 3 を付与し、それらは先頭車両、第 1 追従車両、第 2 追従車両、第 3 追従車両を示す。

最後尾の第 3 追従車両が停止するのは、モデル 1 において 11.8(s) であるのに対して、モデル 2 では 10.8(s) である。また、第 3 追従車両の速度が元の速度に戻るの、モデル 1 では 21.6(s) であるのに対して、モデル 2 では 20.4(s) である。モデル 1 よりもモデル 2 の方が第 3 追従車両の減速が早く始まっており、また早く元の速度に回復できていることがわかる。したがって、隊列走行時において、モデル 2 による速度制御アルゴリズムを適用した方が、車間距離の変動をより小さくした状態で走行できると考えられる。

#### 4. 隊列走行実験

##### 4.1. 実験条件

第 3 節の結果より、直前方車両だけを参照するモデルよりも直前方車両と先頭車両の 2 台参照モデルの方が車間距離の変動を小さくできる。しかし、先頭車両として参照すべき車両は交通状況によって異なっており、隊列として協調行動している車両群の先頭の車両と判断すべきである。

本研究では、隊列走行する車両群が交差点を左折する場合



図 6 隊列走行実験

を考える。本研究では、LEGO MINDSTORMS NXT を用いて実験車両を作成する。実験の様子を図 6 に示す。車両は、写真右後方より走行を開始し、図 6 にある黒い線に沿って走行し、黄色のところまで左折を開始する。左折を開始する車両は、後続車両とは異なる行動を取ることになるので、左折を開始する車両と後続する車両の間で隊列が分かれることになる。そこで、後続する車両は、常に左折する車両の直後の車両を隊列の先頭と判断して速度制御する。プログラミング言語として Not eXactly C (NXC)<sup>(10, 12)</sup> を用いる。また統合開発環境として、NXC プログラミングの開発環境として提

表 2 停止と再加速の時間

Model	1st stop	1st reacceleration	2nd stop	2nd reacceleration	3rd stop
Model 1	2.776	2.923	3.364	3.234	2.613
Model 2	1.706	3.449	2.535	3.832	2.053

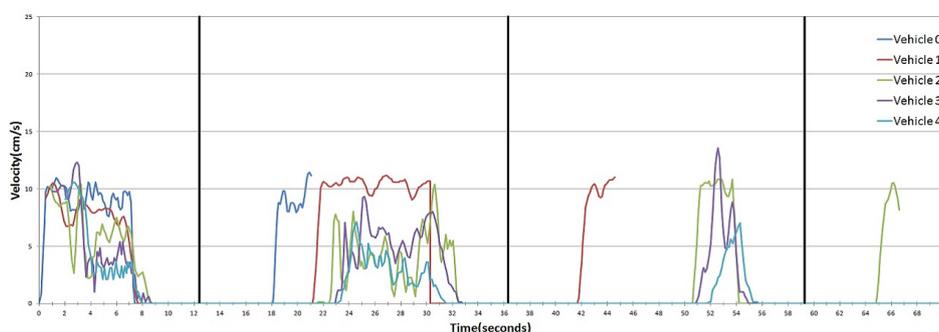


図 7 車両の速度変動 (モデル 1)

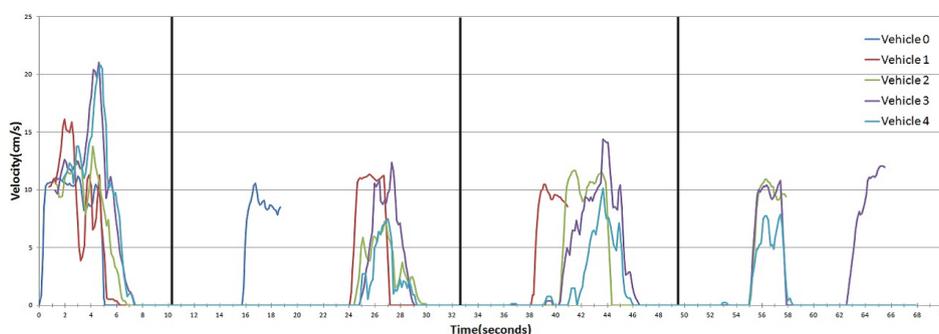


図 8 車両の速度変動 (モデル 2)

供されている Brick Command Center(BricxCC)<sup>(11)</sup> を使用する。

## 4.2. 速度制御アルゴリズム

### 4.2.1. モデル 1 の場合

モデル 1 は、1 台の前方車両を参照する Chandler モデルであり、式 (1) で与えられる。式 (1) における速度差の項  $\dot{x}_{n-1}(t) - \dot{x}_n(t)$  は車間距離の差分として、次式で近似的に求めることとする。

$$\Delta \dot{x}_{n-1}(t) \simeq \frac{\Delta x_{n-1}(t) - \Delta x_{n-1}(t - \Delta t)}{\Delta t} \quad (9)$$

ここで、 $\Delta x_{n-1}(t)$  は時刻  $t$  における車両  $n-1$  と車両  $n$  の車間距離を示す。

$$\Delta x_{n-1}(t) = x_{n-1}(t) - x_n(t) \quad (10)$$

式 (9) を用いるためには、直前方車両との車間距離を測定する必要がある。本実験では、LEGO MINDSTORMS NXT の有する超音波センサを用いて直前方車両との車間距離を測定する。

### 4.2.2. モデル 2 の場合

モデル 2 では、隊列の先頭車両と、自車両の直前方車両の 2 台を参照し、これら 2 台の情報で速度を制御する 2 台参照型 Chandler モデルであり、式 (2) で与えられる。式 (2) に

含まれる変数  $\dot{x}_0(t)$  の値は隊列の先頭車両であり、Bluetooth 通信を利用して得る。LEGO MINDSTORMS NXT では、Bluetooth 通信において、1 台の発信車両と 3 台までの受信車両を設定できる。そこで、先頭車両を発信車両、それ以外の追従車両を受信車両とする。

また、式 (2) の右辺第 1 項の  $\dot{x}_{n-1}(t) - \dot{x}_n(t)$  は通常の Chandler モデルの場合と同様に、車間距離の差分として式 (9) で近似的に求める。モデル 2 においても、LEGO MINDSTORMS NXT の有する超音波センサを用いて直前方車両との車間距離を測定する。

## 4.3. 実験結果

モデル 1、モデル 2 の車両の速度変化図を、それぞれ図 7 と図 8 に示す。ラベル Vehicle 0, Vehicle 1, Vehicle 2, Vehicle 3, Vehicle 4 はそれぞれ先頭車両、第 1 追従車両、第 2 追従車両、第 3 追従車両、第 4 追従車両を表している。横軸に時間経過、縦軸に車両速度をとる。各図に記載された黒い縦線は、前方車両が左折行動に入ったことから、隊列の先頭車両が、左折行動に入った車両からその次の車両に入れ替わった時点を表している。表 2 では、先頭車両が停止するための減速を開始してからすべての追従車両が停止するまでの所要時間 (stop) と、新しい隊列が編成され先頭車両が再加速を開始してからすべての追従車両が再加速を完了するまでの所要時

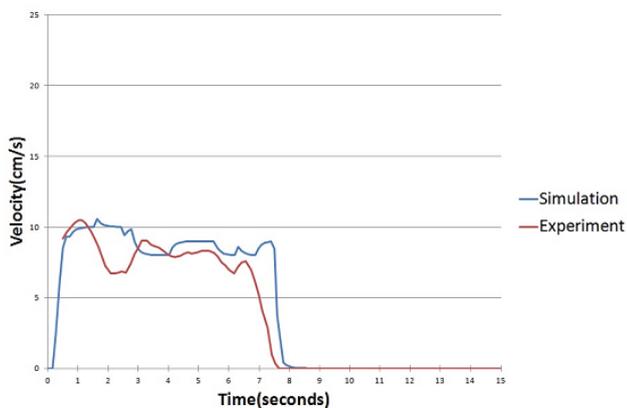


図 9 Vehicle 1 の速度変動の比較 (モデル 1)

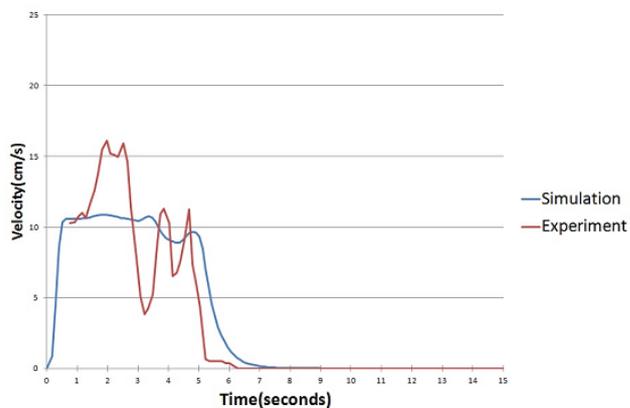


図 12 Vehicle 1 の速度変動の比較 (モデル 2)

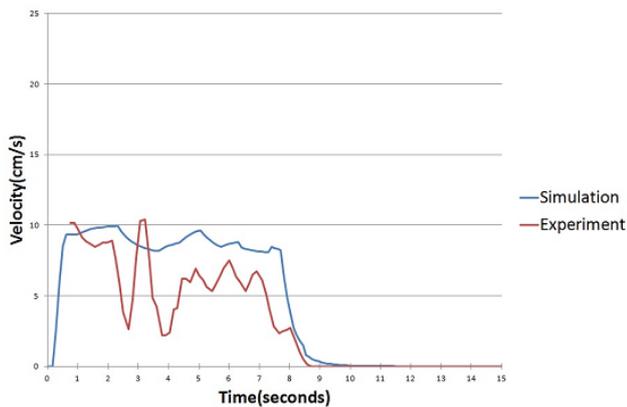


図 10 Vehicle 2 の速度変動の比較 (モデル 1)

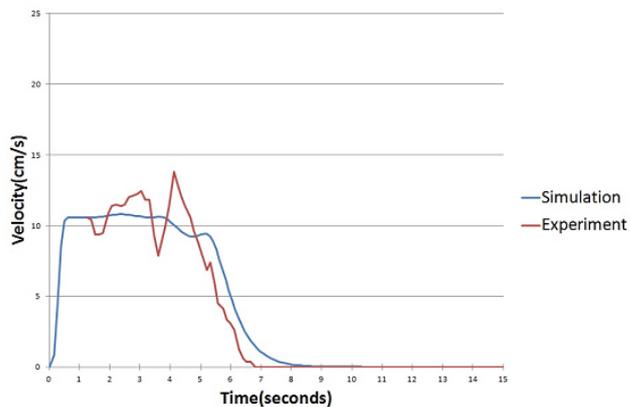


図 13 Vehicle 2 の速度変動の比較 (モデル 2)

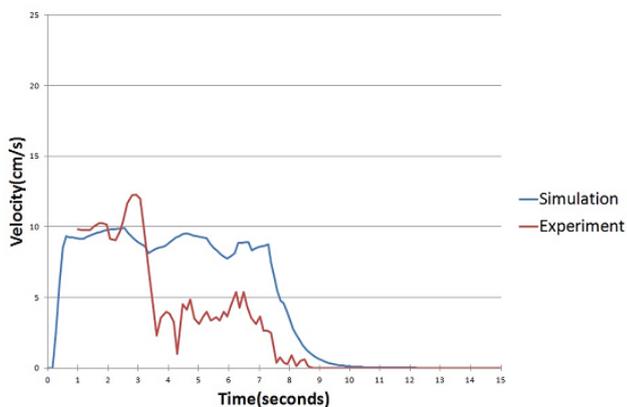


図 11 Vehicle 3 の速度変動の比較 (モデル 1)

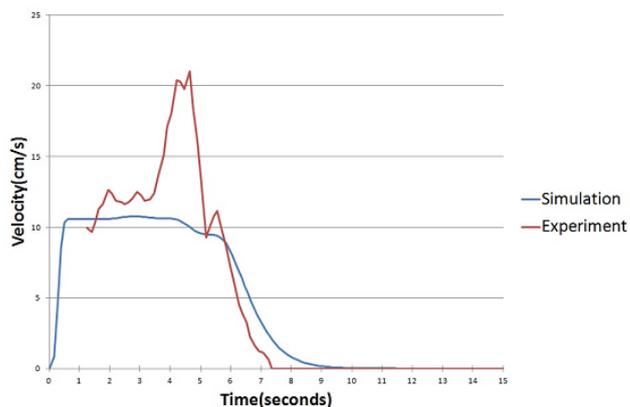


図 14 Vehicle 3 の速度変動の比較 (モデル 2)

間 (reacceleration) を示す。図 7, 図 8 から, 先頭車両が交差点手前で停止するたびに, 追従車両は先頭車両に従って停止することがわかる。また, 黒い縦線の時点において, 停止前に先頭車両であった車両の直後の車両が新しく先頭車両となり, 追従車両は新しい先頭車両の再加速に従って速度を変化させていることが示されている。各モデルにおける停止にかかる時間及び再加速にかかる時間を表 2 に示す。停止にかかる時間は, 1 回目の停止, 2 回目の停止, 3 回目の停止のいずれにおいても, モデル 2 が短いことがわかる。

つづいて, 数値シミュレーション結果とロボット車両による実験結果を比較する。モデル 1 およびモデル 2 において, シミュレーション開始後 15 秒後までの第 1 追従車両, 第 2 追従車両, 第 3 追従車両の速度変化を比較する。モデル 1 の結果を図 9, 図 10, 図 11 に, モデル 2 の結果を図 12, 図 13, 図 14 に示す。モデルによらず, それぞれの追従車両の減速のタイミングはほぼ一致しているが, 速度変動には数値シミュレーションと実験によって違いが見える。実験においては, 車両の左右の車輪の回転速度を変更することで, 車両が黒いライン上を走行するように車両の進行方向を制御している。これによる制御遅れは数値シミュレーションでは考慮されていない。このために, 実験結果と数値シミュレーションのずれが発生すると考えられる。

## 5. 結論

本研究では, 車車間通信が実現された状況での隊列走行において, 交差点を曲がる場合や隊列を組み替える場合に向けた, 車両の速度制御アルゴリズムについて検討した。隊列の再編成の具体的な例として, 隊列が交差点を左折する場合を考えた。隊列走行の計算機シミュレーションと, LEGO MINDSTORMS NXT によって作成したロボット車両による隊列走行実験によって検討した。車両の速度制御には, 直前方車両のみを参照する Chandler モデル, 直前方車両と隊列の先頭車両の 2 台を参照する Chandler モデルを比較した。その結果, 直前方車両のみを参照する Chandler モデルよりも直前方車両と隊列の先頭車両の 2 台を参照する Chandler モデルの方が, 追従車両の停止や, 再加速による速度の回復が早く行われることがわかった。

今後の課題として, 先行車両に対する遅れ時間の乱れを考慮した車両追従モデルの構築が挙げられる。本研究では遅れ時間は一定であるとしていたが, 実際の車両においては, 遅れ時間の乱れが想定される。車両追従モデルの安定性は遅れ時間に依存するため, 遅れ時間の乱れによって安定条件を満たさなくなるケースが生じることも考えられる。また, 本研究では交差点を左折する場合を取り上げたが, 隊列の合流や分離においても隊列を組み替えることとなる。隊列走行を行

うにあたり想定される他の状況においても検証する必要がある。

## 謝辞

本研究は JSPS 科研費 19K04140 の助成を受けたものです。

## 参考文献

- (1) トラックの隊列走行について. <https://www.mlit.go.jp/common/001178890.pdf>. 2023 年 10 月 8 日参照.
- (2) R. E. Chandler, R. Herman, and E. W. Montroll. Traffic dynamics; studies in car-following. *Operations Research*, Vol. 6, No. 2, pp. 165–184, 1958.
- (3) G. F. Newell. Nonlinear effects in the dynamics of car following. *Operations Research*, Vol. 9, No. 2, pp. 209–229, 1961.
- (4) 杉山雄規. 交通流の物理, *ながれ* 22, 2003.
- (5) E. Kita, C. Ushida, K. Asahina, T. Tamaki, Y. Wakita. Platoon Simulation of Vehicle Robots According to Vehicle following Model, *International Journal of Advances in Computer Science and Its Applications*, Vol.4, Issue 4, pp.205-207, 2014.
- (6) 北 栄輔, 朝比奈鋼司, 牛田千智, 玉城龍洋, 村井 希. 多台参照追従モデルによる隊列走行シミュレーションについて. *日本計算数理工学論文集*, Vol.19, pp.79-84, No.16-191201, 2019.
- (7) レゴマインドストーム. <https://www.lego.com/ja-jp/themes/mindstorms/about>. 2023 年 10 月 8 日参照.
- (8) S. Bexelius. An extended model for car-following. *Transportation Research*, Vol. 2, No. 1, pp. 13–21, 1968.
- (9) 脇田佑希子, 清水光輝, 玉城龍洋, 北 栄輔. 合流車両による交通渋滞緩和のためのセルオートマトンシミュレーション, *日本計算数理工学論文集*, Vol.10, pp.75-80, 2010.12.
- (10) *Next byte codes, not exactly c, and superpro c*. <http://bricxcc.sourceforge.net/nbc/>. 2023 年 10 月 8 日参照.
- (11) *Bricx command center*. <http://bricxcc.sourceforge.net/>. 2023 年 10 月 8 日参照.
- (12) *LEGO Mindstorms NXT2.0 ユーザガイド*. <http://www2.ocn.ne.jp/~takamoto/LegoMindstormsNXT2.0UserGuide.pdf>. 2023 年 10 月 8 日参照.

# A fast skeletonisation of 2D objects using a generalised double-layer potential and the $\mathcal{H}$ -matrix method

Hiroshi ISAKARI<sup>1)</sup>

1) Keio University (〒 223-0061 3-14-1 Hiyoshi, Kohoku-ku, Yokohama-shi, Kanagawa E-mail: isakari@sd.keio.ac.jp)

This paper proposes a fast numerical method to calculate the so-called topological skeleton of two-dimensional objects. The proposed method is based on a generalised double-layer potential that provides a smoothed signed distance field for an object given in a surface format and is thus considered CAD-friendly. To efficiently evaluate the skeleton, we here incorporate the  $\mathcal{H}$ -matrix method to calculate the potential. Numerical experiments show that, although sometimes the  $\mathcal{H}$ -matrix method might become unstable, the skeleton can be calculated with sufficient accuracy within acceptable computational time in many practical cases.

**Key Words:** Generalised Layer Potential, Topological Skeleton,  $\mathcal{H}$ -matrix method, Geometric Feature Extraction, Image Processing

## 1. Introduction

Topology optimisation <sup>(1, 2)</sup> has long been studied in academic and industrial communities. Beyond its original aim in the field of structural mechanics to provide light and stiff mechanical members, it is now applied to a variety of engineering fields such as acoustics <sup>(3, 4)</sup>, fluid dynamics <sup>(5)</sup>, electromagnetics <sup>(6)</sup>, etc. Some emergence of useful commercial CAE software equipped with the topology optimisation capability <sup>(7)</sup> has also helped enhance its practical use in product developments in engineering industries. The scope of the topology optimisation application remains, however, limited to the conceptual design phase in most industries. Some trial and error modifications on topology-optimised design are still necessary before finalising the detailed design. This is partly because the current topology optimisation technologies may not provide a print-ready design that is manufacturable as is. For example, the topology optimisation maximising the stiffness sometimes gives a geometrically complicated design that includes extremely thin members. In such a case, the members need to be fleshed out to give a durable engineering product. In order for topology optimisation to truly revolutionise product development, the print-ready design needs to be addressed.

Some effort on this aspect has already been made by some researchers. The so-called overhang constraints for 3D printing and thickness control are especially addressed by many

researchers, see e.g. <sup>(8, 9, 10)</sup> for early contributions. It may, however, be more convenient to handle various geometrical constraints (such as the overhang and closed cavity exclusion constraints for 3D printing, die-cutting capabilities, minimum or maximum local thickness constraints, etc) in a unified manner than to develop a separate method for each possible constraint. Some studies in this direction are found in literature including Allaire et al <sup>(11)</sup> and Yamada et al <sup>(12, 13, 14, 15, 16)</sup>, the latter of which is particularly remarkable. All of these perform the topology optimisation while controlling the geometric feature. The Yamada method uses partial-differential equations (PDEs) whose solutions extend the normal vector field. Various geometric features can then be extracted from the field.

The normal vector extension can also be characterised as the gradient of the signed distance field. Various numerical methods for calculating the distance function have been studied for a long time, mainly in the field of image processing. Typical ones include those solving the eikonal equation <sup>(17, 18)</sup>, some other PDEs <sup>(19)</sup>, and variational problems <sup>(20)</sup>. All of these methods require recognising the target objects as images or characteristic functions and thus are essentially domain-based methods. On the other hand, especially in the three-dimensional case, the shape data is often given as surface data such as in the STL format. It may thus be preferable to use a method that converts the input surface data directly to the corresponding signed distance

---

15 Oct. 2023 received, 2 Nov. 2023 accept

field. For this purpose, some researchers used a kind of layer potential to calculate the signed distance <sup>(21, 22)</sup>. Belyaev et al proposed the signed  $L_p$ -distance field based on the generalised double-layer potential and established a methodology to calculate a highly accurate smoothed approximation for the signed distance function.

This paper extends the double-layer potential method <sup>(22)</sup> in two ways. One is to calculate the topological skeleton, which is one of the typical geometric features of an object. The other is an acceleration of the method. Belyaev et al proposed a method to naively calculate the potential. The original method thus requires  $O(MN)$  arithmetic operations to evaluate the potential at  $M$  field points for an object whose surface is characterised by  $N$  segments. This study combines the  $\mathcal{H}$ -matrix method to accelerate the computation.

## 2. Formulations

### 2.1. Point in polygon and the double-layer potential

We first see that the double-layer potential for the Laplace equation with constant density is somehow related to a geometric feature of a given object. Here, we consider two-dimensional cases. As an example, let us consider an  $N$ -sided polygon  $\Omega$  (Fig. 1). The surface of  $\Omega$  is oriented, and its outward normal on the surface is denoted as  $n$ . The  $j^{\text{th}}$  edge of the polygon is denoted as  $s_j$  for  $j = 1, \dots, N$ . In

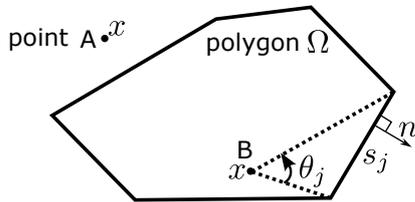


Fig. 1 Given 2D object  $\Omega$  (a polygon in this example) and points A and B.

order to check if a given point  $x \in \mathbb{R}^2$  is inside or outside  $\Omega$ , we may use the following sum of the steradian:

$$\varphi_0(x) := \sum_{j=1}^N \theta_j(x), \quad (1)$$

where  $\theta_j(x)$  is the steradian of  $s_j$  from the point  $x$ .  $\varphi_0(x)$  returns the value of  $2\pi$  if  $x$  is located in the polygon, and 0 if outside. It is easy to see that  $\theta_j$  is nothing but the following double-layer potential of the two-dimensional Laplace equation with the constant density of 1:

$$\theta_j(x) = \int_{y \in s_j} \frac{(y-x) \cdot n}{|x-y|^2} ds. \quad (2)$$

The double-layer potential

$$\int_{\partial\Omega} \frac{(y-x) \cdot n}{|x-y|^2} ds \quad (3)$$

thus gives the characteristic function of the domain  $\Omega$ .

### 2.2. Generalised double-layer potential and the signed $L_p$ -distance field

Now, our goal is to generalise the double-layer potential (3) to provide an approximation of the signed-distance function defined as

$$\Psi(x) := \begin{cases} d(x, \partial\Omega) & x \in \Omega \\ -d(x, \partial\Omega) & x \notin \Omega \end{cases}, \quad (4)$$

with  $d(x, \partial\Omega) := \min_{y \in \partial\Omega} |x-y|$ . To this end, Belyaev et al proposed the  $L_p$ -distance field, which is briefly reviewed in this section. The detailed and mathematically rigorous discussion can be found in the original paper <sup>(22)</sup>. To derive the  $L_p$ -distance field, the following generalised double-layer potential (with unit density) is first introduced:

$$\varphi_p(x) := \int_{y \in \partial\Omega} \frac{(y-x) \cdot n}{|x-y|^{2+p}} ds \quad (5)$$

where  $p$  is a positive integer. By introducing an appropriate coordinate system, in the case of  $x \in \Omega$ , the asymptotic behaviour of  $\varphi_p$  as  $p \rightarrow \infty$  reads

$$\varphi_p(x) = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{|x-y|^p} \sim \frac{1}{\left(\min_{y \in \partial\Omega} |x-y|\right)^p \sqrt{p}} \quad (6)$$

with the help of the Laplace method, provided that  $y$  is twice differentiable with respect to  $\theta$ . In (6),  $\theta$  represents the argument of  $x-y$ . Note that, in the case of  $x \notin \Omega$ , the mid-equation in (6) needs to be adjusted, but the final expression is valid also for this case. The  $p^{\text{th}}$  root of the reciprocal of the generalised double-layer potential (5) thus approaches the distance function as  $p \rightarrow \infty$ . With some more careful observation, one may find that

$$\Psi_p(x) := \left( \frac{c_p}{\varphi_p(x)} \right)^{\frac{1}{p}} \quad (7)$$

with the following sequence:

$$c_0 = \pi, \quad c_1 = 2, \quad c_{p+2} = \frac{p+1}{p+2} c_p \quad (8)$$

gives

$$\Psi_p(x) = d(x, \partial\Omega) + O\left(\frac{1}{p}\right) \quad (9)$$

as  $p \rightarrow \infty$ , which has a better convergence than  $(1/\varphi_p(x))^{1/p}$  to the distance function.

To augment the distance function (9) by the  $\pm$  sign to obtain the signed distance field (4), we may use the ‘‘point in polygon’’ algorithm presented in Section 2.1.

In evaluating the signed  $L_p$ -distance field, it is essentially important to accurately evaluate the generalised double-layer potential (5). Note that, since its integrand can be nearly

singular when  $x \in \Omega$  is close to the boundary  $\partial\Omega$ , naive numerical quadratures cannot be used to evaluate the potential. Instead, we here derive the analytical expression for the boundary integral (5). It suffices to consider the following potential generated by an oriented line segment:

$$\int_0^\gamma \frac{d\theta}{|x - y(\theta)|^p}, \quad (10)$$

at a given point  $x \in \Omega$ , where  $\gamma$  is the steradian at  $x$  of the segment, and  $y$  is a point on the segment and is a function of  $\theta$ . It can easily be found that, when  $p$  is odd, the integral (10) can be expressed as

$$\varphi_{2n-1}(x) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{C_{ij}^n}{(ab)^{j-1}} \left( \frac{1}{a^{2n+1-j}} + \frac{1}{b^{2n+1-j}} \right) t^{2i-1} \quad (11)$$

for  $p = 2n - 1$ , where  $t$  is defined as  $t := \tan(\gamma/2)$ ,  $a$  (resp.  $b$ ) is the distance between  $x$  and the starting (resp. ending) point of the target line segment, and  $C_{ij}^n \in \mathbb{Q}$  is the coefficient. In our implementation, the coefficients  $C^n \in \mathbb{R}^{n \times n}$  (for  $n = 1, 2, \dots$ ) are precomputed by Maple.  $C^5$ , for example, is given as

$$C^5 = \begin{pmatrix} 1/5 & 1/5 & 1/5 & 1/5 & 1/5 \\ 2/15 & 2/5 & 3/5 & 11/15 & 4/5 \\ 2/35 & 2/7 & 23/35 & 1 & 6/5 \\ 1/70 & 1/10 & 11/35 & 3/5 & 4/5 \\ 1/630 & 1/70 & 2/35 & 2/15 & 1/5 \end{pmatrix}. \quad (12)$$

To illustrate the signed  $L_p$ -distance fields, we here calculate  $\Psi_p(x)$  for a unit circle. Fig. 2 shows  $\Psi_5(x)$ ,  $\Psi_{15}(x)$ , and  $\Psi_{25}(x)$  for  $\{x \mid -2 < x_1 < 2, x_2 = 0\}$  as well as the exact signed distance function  $\Psi(x) = 1 - |x_1|$ . For the computation, the surface of the circle is approximated by an inscribed polygon of it with 2000 edges, and the signed  $L_p$ -distance fields are evaluated at 500 points of equal intervals on the given line. From the figure, one finds that  $\Psi_p$

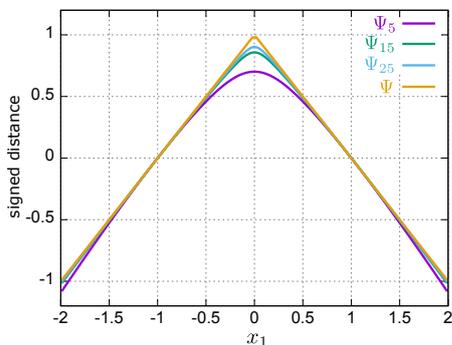


Fig. 2 Signed  $L_p$ -distance field for a unit circle.

approaches the exact signed distance  $\Psi$  as  $p$  becomes large. Although a relatively large difference between  $\Psi_p$  and  $\Psi$  is observed away from the boundary  $|x_1| = 1$ ,  $\Psi_p$  agrees well

with  $\Psi$  even when  $p$  is small in the vicinity of the boundary. To see the convergence, we also show the relative  $\ell_1$ -error of  $\Psi_p$  on the 500 points against the exact signed distance vs  $p$  in Fig. 3. As expected from the estimate (9), the relative error scales with  $1/p$ .

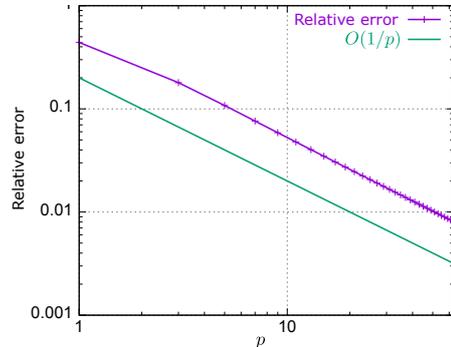


Fig. 3 Relative error of  $\Psi_p$  against the exact signed distance vs  $p$ .

### 2.3. Skeleton computation

One may observe from Fig. 2 that the signed  $L_p$ -distance field is smoothed at the centre of the circle  $x_1 = 0$  at which the gradient of  $\Psi$  does not exist. We may thus evaluate the gradient of  $\Psi_p$  everywhere. Since  $\Psi_p$  approximates the signed distance, it is expected that  $|\nabla\Psi_p| = 1$  holds\* except where  $\nabla\Psi$  does not exist. Indeed, Fig 4 showing  $1 - |\nabla\Psi_p|$  vs  $x_1$  for the unit circle case indicates that  $|\nabla\Psi_p| \sim 1$  holds except in the vicinity of  $x_1 = 0$ . On the other hand, it is

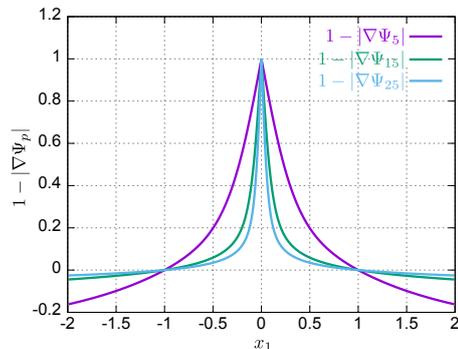


Fig. 4  $1 - |\nabla\Psi_p|$  for a unit circle.

known that the set of points where  $\nabla\Psi$  does not exist corresponds to the topological skeleton that is defined as a set of points  $x$  such that there exist at least 2 points  $y$  satisfying  $\min_{y \in \partial\Omega} |x - y|$ . It is thus inferred that the topological skeleton can be recovered as e.g.  $\{x \mid 1 - |\nabla\Psi_p(x)| > \varepsilon\}$ , where  $\varepsilon$  is a given positive parameter. Note that there exist several definitions of the skeleton. See e.g. Allaire et al <sup>(11)</sup>

\*Recall that the gradient of the signed distance field on the boundary agrees with the unit outward normal.

and the references therein for other definitions and further discussions.

Note also that we may use the automatic differentiation to evaluate the gradient of the signed  $L_p$ -distance. In our implementation, we used a Fortran 95 library for the automatic differentiation of the forward mode <sup>(23)</sup> for this purpose.

#### 2.4. $\mathcal{H}$ -matrix-based acceleration

Evaluating the signed  $L_p$ -distance field (7) and its gradient (for skeleton computation) with the generalised double-layer potential (5) at  $M$  field points for a given  $N$ -sided polygon requires  $O(MN)$  arithmetic operations. Since this computation can be viewed as matrix-vector multiplication of an  $\mathbb{R}^{M \times N}$  matrix and  $\mathbb{R}^N$  vector of ones, and the matrix has a hierarchical block structure with rank-deficient blocks, we may use the  $\mathcal{H}$ -matrix method <sup>(24)</sup> or the fast-multipole method <sup>(25)</sup> to accelerate this computation. We here adopt the former one for its simple implementation. In the standard  $\mathcal{H}$ -matrix method, the target matrix is hierarchically subdivided into subblocks in a binary tree format until its row and column size is less than a given parameter  $n_{\min}$ . The submatrix of the target matrix is then low-rank approximated if the submatrix satisfies the following so-called admissible condition:

$$\min\{\text{diam}(t), \text{diam}(s)\} \leq \eta \text{dist}(t, s), \quad (13)$$

where  $t$  and  $s$  respectively denote the subset of the field points and the boundary elements,  $\text{diam}(a)$  indicates the size of the bounding box of  $a$ , and  $\text{dist}(s, t)$  the distance between  $t$  and  $s$ , and  $\eta > 0$  is a parameter. Using larger  $\eta$  means that more submatrices shall be low-rank approximated. Note that the larger  $p$  brings the more severe singularity in the double-layer potential (5). The smaller  $\eta$  in (13) would, therefore, be necessary for the larger  $p$ . Also note that the sole use of the admissible condition (13) often ends up with a small number (say 4 or 8) of huge subblocks to be low-rank approximated, which may degrade the parallel computing performance. To avoid such a situation, we augment the admissible condition by the following ones:

$$|t| < n_{\max} \text{ and } |s| < n_{\max}, \quad (14)$$

where  $n_{\max} > n_{\min}$  is a given parameter, and  $|a|$  is the number of elements in  $a$ .

For the low-rank approximation, we use the standard adaptive cross approximation (ACA).

### 3. Numerical experiments

#### 3.1. Demonstration

We first demonstrate an illustrative numerical example of extracting the topological skeleton of a given 2D object with complicated geometry. Fig. 5 (a) shows the given object.

Here, the boundary data similar to the STL one (or the boundary element mesh) of the black object is given as the input. The surface of the object is parameterised by 37999 line segments. For this example, we calculated the signed  $L_p$ -distance field (7) for  $p = 15$  at the 120000 ( $= 300 \times 400$ ) lattice points distributed in  $\{x \mid |x_1| < 0.75, |x_2| < 1.00\}$  by the proposed method accelerated by the  $\mathcal{H}$ -matrix method. The parameters for the  $\mathcal{H}$ -matrix method is empirically set as  $n_{\min} = 64$ ,  $n_{\max} = 1024$ ,  $\eta = 0.516$ ,  $\varepsilon_{\text{ACA}} = 10^{-4}$ , where  $\varepsilon_{\text{ACA}}$  is the given tolerance for the adaptive cross approximation. Fig. 5 (b), (c), and (d) show  $\Psi_{15}$ ,  $\nabla\Psi_{15}$ , and  $1 - |\nabla\Psi_{15}|$ , respectively. From the figure, we may confirm at least qualitatively that we can extract the geometric features of the given object. We then discuss the timing. The elapsed

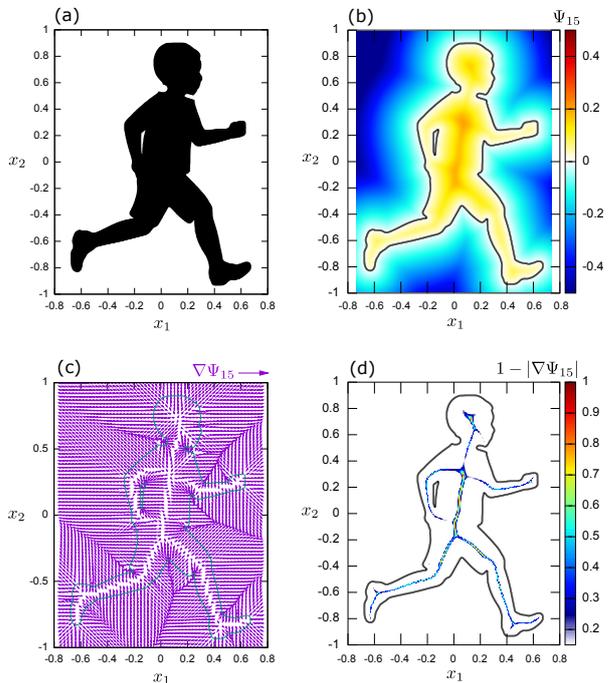


Fig. 5 (a) Given 2D object, (b) signed  $L_p$ -distance field of 15<sup>th</sup> degree, (c) its gradient, and (d) the skeleton recovered by  $1 - |\nabla\Psi_{15}| > 0.2$ .

time to compute  $\Psi_{15}$  and its gradient was 462 sec with the  $\mathcal{H}$ -matrix method, while 830 sec without it. The computation was carried out on a desktop PC with Xeon Platinum 8360Y (36 cores and 72 threads). We may, therefore, conclude that the proposed method does accelerate the Belyaev method <sup>(22)</sup> by the  $\mathcal{H}$ -matrix method.

#### 3.2. Validation

In this subsection, to quantitatively evaluate the performance of the proposed method, we show the test results for a simple geometry. As a test object, we here use a rectangular-shaped object  $\{x \mid |x_1| < 0.75, |x_2| < 0.15\}$  and

evaluate the signed  $L_p$ -distance fields at the equally spaced 40000 ( $= 200 \times 200$ ) points allocated in  $\{x \mid |x_{1,2}| < 1.00\}$ .  $n_{\min} = 64$  and  $n_{\max} = 1024$  are again used for this example. The other parameters for the  $\mathcal{H}$ -matrix method are empirically set as  $\eta = 2/p^{1/4}$ ,  $\varepsilon_{\text{ACA}} = \min(10^{-4}, 0.1\sqrt{p})$ . We

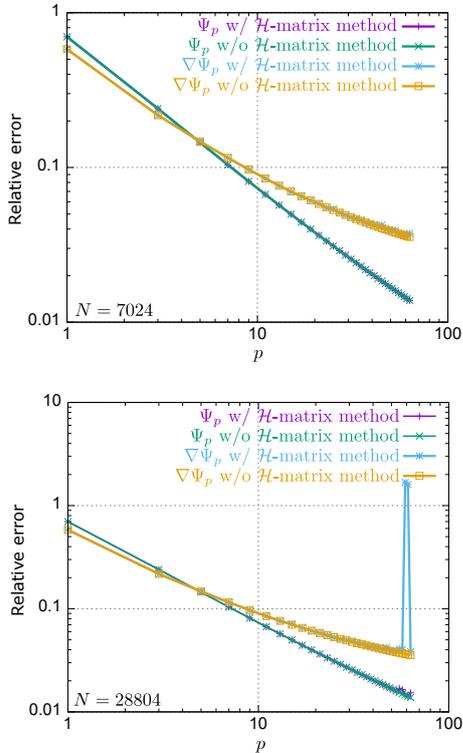


Fig. 6 Relative error in signed  $L_p$ -distance and its gradient to the exact ones for the case of  $N = 7024$  boundary elements (top) and  $N = 28804$  (bottom).

first discuss the accuracy. Fig. 6 shows the relative  $\ell_1$ -error in  $L_p$ -distance field and its gradient to their exact distance counterparts evaluated at the lattice points against  $p$  for the case of  $N = 7024$  and  $N = 28804$ , where  $N$  is the number of boundary elements for the rectangular object. Note that the generalised double-layer potential for this case can accurately be evaluated with  $N = 4$ , i.e. a single boundary element on each rectangular edge gives the exact potential (3) except for the rounding error. We here intentionally use, however, excessively large  $N$  to evaluate the performance of the  $\mathcal{H}$ -matrix method. Although it is expected that the accuracy may degrade for this example with corners in the object surface (see the discussion in Section 2.2), the relative error for the distance field almost scales as  $O(1/p)$ . The accuracy of the gradient is somewhat worse than that of the distance field itself\*\*. Nonetheless, the relative error for the gradient

\*\*The distance function appears to be calculated with good accuracy, but in the lower right corner of Fig. 7 one may find a

is less than 10% if  $p > 10$  is used.

One also observes that when  $p$  and  $N$  are large, the  $\mathcal{H}$ -matrix method fails to give the accurate  $\Psi_p$  and  $\nabla\Psi_p$ . This tendency is more severely observed in  $\nabla\Psi_p$  than in  $\Psi_p$  itself. This is obviously caused by the ill-conditioned kernel for large  $p$  (see (5)). We might not use the ACA to evaluate such an ill-conditioned potential for large  $p$ . We would like, however, to emphasise that in practical use  $p \sim 10$  would be enough in skeletonising an object (see Section 3.1). We thus may conclude that the proposed method with the  $\mathcal{H}$ -matrix method is still promising in skeletonising 2D objects in practical cases.

We lastly discuss the computational efficiency of the proposed method. Fig. 7 shows the elapsed time for computing  $\Psi_p$  and its gradient for various  $p$  and  $N = 7024$ . The pro-

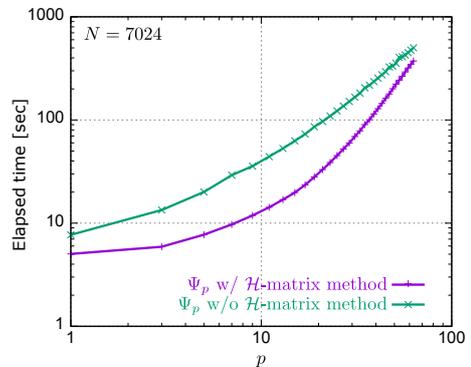


Fig. 7 Elapsed time for computing  $\Psi_p$  vs the degree  $p$  of the  $L_p$ -distance.

posed method is always faster than the conventional method without  $\mathcal{H}$ -matrix acceleration among tested  $p = 1, 3, \dots, 63$ . The plot for the proposed method is steeper than that for the conventional method for large  $p$ , though. This is also caused by the slow convergence in ACA due to the ill-conditioned kernel.

From the above observations, we conclude that the proposed method works well at least when the degree of  $L_p$ -distance field is moderate, say  $p \sim 10$ .

#### 4. Concluding remarks

In this paper, we proposed an extension of the generalised double-layer potential method for the signed  $L_p$ -distance field evaluation<sup>(22)</sup> to skeletonise 2D objects. The proposed method only relies on the boundary data of given objects and is thus able to convert directly from, e.g., STL data to

slight jump in the purple line (representing the error in  $\Psi_p$  evaluated with the  $\mathcal{H}$ -matrix method). Although the increase in the error is small, it is considerably large compared to the given tolerance for ACA (e.g.  $\varepsilon_{\text{ACA}} \simeq 1.8 \times 10^{-8}$  for  $p = 60$ ) and cannot be ignored.

the approximation of its skeleton. We found that the proposed method can provide the topological skeleton even with a small  $p$ . We also addressed its acceleration by the  $\mathcal{H}$ -matrix method. We confirmed that the  $\mathcal{H}$ -matrix method can accelerate the skeleton computation with the condition that  $p$  is small added. On the other hand, the stable and fast  $L_p$ -distance computation for large  $p$  is left for future works. To address this, we may try the fast-multipole method instead of the  $\mathcal{H}$ -matrix method. It may also be possible to improve the ACA algorithm for the current kernel. To this end, we might exploit the fact that the generalised double-layer potential (5) can have a tiny value for the case that both  $p$  and  $|x - y|$  are large. We might also, instead of using the automatic differentiation, manually differentiate the double-layer potential and take appropriate measures to avoid the loss of significant digits to improve the accuracy in  $\nabla\Psi_p$ . It may also be an interesting future direction to combine the proposed method with the topology and shape optimisation technologies to optimise engineering designs with geometric constraints.

#### References

- (1) M-P. Bendsøe and N. Kikuchi. Generating optimal topologies in structural design using a homogenization method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 71, No. 2, pp. 197–224, 1988.
- (2) T. Yamada, K. Izui, S. Nishiwaki, and A. Takezawa. A topology optimization method based on the level set method incorporating a fictitious interface energy. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 199, No. 45, pp. 2876–2891, 2010.
- (3) E. Wadbro and M. Berggren. Topology optimization of an acoustic horn. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 196, No. 1, pp. 420–436, 2006.
- (4) H. Isakari, K. Kuriyama, S. Harada, T. Yamada, T. Takahashi, and T. Matsumoto. A topology optimisation for three-dimensional acoustics with the level set method and the fast multipole boundary element method. *Mechanical Engineering Journal*, Vol. 1, No. 4, CM0039, 2014.
- (5) K. Yaji, T. Yamada, M. Yoshino, T. Matsumoto, K. Izui, and S. Nishiwaki. Topology optimization using the lattice Boltzmann method incorporating level set boundary expressions. *Journal of Computational Physics*, Vol. 274, pp. 158–181, 2014.
- (6) F. Lucchini, R. Torchio, V. Cirimele, P. Alotto, and P. Bettini. Topology optimization for electromagnetics: A survey. *IEEE Access*, Vol. 10, pp. 98593–98611, 2022.
- (7) Topology Optimization (SOLIDWORKS). <https://www.solidworks.com/media/topology-optimization>.
- (8) L. Harzheim and G. Graf. A review of optimization of cast parts using topology optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, Vol. 31, No. 5, pp. 388–399, 2006.
- (9) A-T. Gaynor, N-A. Meisel, C-B. Williams, and J-K. Guest. Topology optimization for additive manufacturing: Considering maximum overhang constraint. In *15th AIAA/ISSMO Multidisciplinary Analysis and Optimization Conference*, 2014.
- (10) S. Galjaard, S. Hofman, and S. Ren. New Opportunities to optimize structural designs in metal by using additive manufacturing. In *Advances in Architectural Geometry 2014*, pp. 79–93, 2015.
- (11) G. Allaire, F. Jouve, and G. Michailidis. Thickness control in structural optimization via a level set method. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, Vol. 53, No. 6, pp. 1349–1382, 2016.
- (12) T. Yamada. Geometric shape features extraction using a steady state partial differential equation system. *Journal of Computational Design and Engineering*, Vol. 6, No. 4, pp. 647–656, 2019.
- (13) T. Yamada and Y. Noguchi. Topology optimization with a closed cavity exclusion constraint for additive manufacturing based on the fictitious physical model approach. *Additive Manufacturing*, Vol. 52, 102630, 2022.
- (14) T. Miki and T. Yamada. Topology optimization considering the distortion in additive manufacturing. *Finite Elements in Analysis and Design*, Vol. 193, 103558, 2021.
- (15) D-Y. Hur, Y. Sato, T. Yamada, K. Izui, and S. Nishiwaki. Level-set based topology optimization considering milling directions via fictitious physical model. *Mechanical Engineering Journal*, Vol. 7, No. 6, 20–00226, 2020.
- (16) Y. Sato, T. Yamada, K. Izui, and S. Nishiwaki. Manufacturability evaluation for molded parts using fictitious physical models, and its application in topology optimization. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, Vol. 92, No. 1, pp. 1391–1409, 2017.
- (17) J-A. Sethian. A fast marching level set method for monotonically advancing fronts. *Proceedings of the Na-*

- tional Academy of Sciences*, Vol. 93, No. 4, pp. 1591–1595, 1996.
- (18) J. Qian, Y-T. Zhang, H-K. Zhao. Fast sweeping methods for eikonal equations on triangular meshes. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Vol. 45, No. 1, pp. 83–107, 2007.
- (19) K. Crane, C. Weischedel, and M. Wardetzky. Geodesics in heat: A new approach to computing distance based on heat flow. *ACM Trans. Graph.*, Vol. 32, No. 5, 2013.
- (20) A. Belyaev and P-A. Fayolle. An ADMM-based scheme for distance function approximation. *Numerical Algorithms*, Vol. 84, No. 3, pp. 983–996, 2020.
- (21) N. Ahuja and J-H. Chuang. Shape representation using a generalized potential field model. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, Vol. 19, No. 2, pp. 169–176, 1997.
- (22) A. Belyaev, P-A Fayolle, and A. Pasko. Signed  $L_p$ -distance fields. *Solid and Physical Modeling 2012*, Vol. 45, No. 2, pp. 523–528, 2013.
- (23) G.M. von Hippel. TaylUR 3, a multivariate arbitrary-order automatic differentiation package for Fortran 95. *Computer Physics Communications*, Vol. 181, No. 3, pp. 705–706, 2010.
- (24) J. Ostrowski, Z. Andjelic, M. Bebendorf, B. Cranganu-Cretu, and J. Smajic. Fast BEM-solution of Laplace problems with H-matrices and ACA. *IEEE Transactions on Magnetics*, Vol. 42, No. 4, pp. 627–630, 2006.
- (25) V Rokhlin. Rapid solution of integral equations of classical potential theory. *Journal of Computational Physics*, Vol. 60, No. 2, pp. 187–207, 1985.



# ノンレシプロカルゲルの円筒押し込み大変形解析

## LARGE DEFORMATION ANALYSIS OF A NONRECIPROCAL GEL UNDER CYLINDRICAL INDENTATION

野々垣 翔真<sup>1)</sup>, 松原 成志朗<sup>2)</sup>, 永島 壮<sup>3)</sup>, 奥村 大<sup>4)</sup>

Shoma NONOGAKI, Seishiro MATSUBARA, So NAGASHIMA and Dai OKUMURA

- 1) 名古屋大学大学院工学研究科 (〒464-8603 名古屋市千種区, E-mail: nonogaki.shoma.i6@s.mail.nagoya-u.ac.jp)
- 2) 名古屋大学大学院工学研究科 (〒464-8603 名古屋市千種区, E-mail: seishiro.matsubara@mae.nagoya-u.ac.jp)
- 3) 名古屋大学大学院工学研究科 (〒464-8603 名古屋市千種区, E-mail: so.nagashima@mae.nagoya-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, E-mail: dai.okumura@mae.nagoya-u.ac.jp)

In this study, we investigate the large deformation analysis of a nonreciprocal gel under cylindrical indentation. The nonreciprocity of the gel is modeled by extending the framework of anisotropic linear elasticity [Wang et al., 2023. Mechanical nonreciprocity in a uniform composite material. *Science* 380, 192–198]. Plane-strain finite-element analysis is performed by assuming the frictionless between the gel and the rigid indenter, leading to reproducing the asymmetric response of the nonreciprocal gel. It is found that severe large deformations cause non-convergence of incremental calculations, which is resolved by introducing artificial viscosity and hourglass control. The combination prevents the occurrence of hourglass deformation modes around the area directly below the indenter as well as obtains converged solutions in efficient incremental calculations. The use of larger values of the two parameters causes the increase of computational efficiency and the decrease of computational accuracy. Parametric studies elucidate the existence of the proper region of the two parameters.

**Key Words:** Nonreciprocal gel, Tension compression asymmetry, Large deformations, FEA

### 1. 緒 言

ハイドロゲル中にナノシートを配向して埋め込まれた複合材料は、負荷方向によって異なる力学特性を示すことから、ノンレシプロカルゲル (NR ゲル) と呼ばれ<sup>(1)</sup>、様々な工学応用を期待されている<sup>(1-3)</sup>。この特異性はナノシートの座屈挙動<sup>(4,5)</sup>が圧縮方向への変形によってのみ生じることに起因する。NR ゲルはハイドロゲル中にサブミクロン間隔で配向されたナノシートを含むだけであるから、中実で一様な複合材料とみなすことができ、先行研究<sup>(6-9)</sup>で作成されたメタマテリアルのように特異性を発現させるための空隙を含む微視構造を持たず、任意の形状を取ることができ、高い意匠性を有する<sup>(2)</sup>。

本論文の著者である松原と奥村は、上述の文献<sup>(1)</sup>において、NR ゲルの非線形材料モデルを構築し、有限要素解析ソフト ABAQUS<sup>(10)</sup>のユーザー材料サブルーチン UMAT を開発した。材料モデル構築では、異方性を考慮した線形弾性モデル<sup>(11)</sup>を

増分形式に拡張し、各方向への単軸引張圧縮試験と単純せん断試験から得られた応力とひずみの間の非線形応答を折れ線によってモデル化して導入した。この材料モデルでは、ナノシートの座屈に伴うノンレシプロカル特性の発現が現象論的に陽に表現されており、この非線形材料モデルを用いた有限要素解析によって、NR ゲルの工学応用のための検討や定性的・定量的な評価の進展が期待される。

一方、NR ゲルの主成分はハイドロゲルであり、有限要素解析では変形の非圧縮性<sup>(12)</sup>に由来する計算力学的な困難が現れる。例えば、実験と理論の比較のためのベンチマークとして円筒押し込み試験を考えると、実験では大変形に伴ってノンレシプロカル特性に起因する非対称変形が顕著に表れるのに対して、計算では増分解析における反復計算の非収束によって、変形の初期段階までしか解析ができない<sup>(1)</sup>。しかしながら、上述の問題は計算力学的に解決できる余地があり、このような取り組みは、大変形かつ非圧縮変形を前提とする NR ゲルの有限要素解析を安定に行い、計算の精度と効率を

2023 年 10 月 12 日受付, 2023 年 10 月 30 日受理

両立させるために非常に重要である。

本研究では、NR ゲルの円筒押し込み大変形解析に着目し、人工粘性とアワーグラス制御を組み合わせた解析によって、増分解析の安定化と計算精度と効率について議論する。著者らの調べる限り、NR ゲルの有限要素解析におけるこのような取り組みは見当たらない<sup>(1)</sup>。2 節では NR ゲルのために開発された非線形材料モデルの特徴を簡単に説明する。3 節では、有限要素モデルと解析条件について述べる。4 節では解析結果を示す。人工粘性の導入によって、過酷な大変形下においても増分解析が安定化することを示す。ノンレシプロカル特性に起因して非対称な変形挙動が現れることを確認するとともに、円筒押し込み下部の要素に生じるアワーグラス変形モードはアワーグラス制御でロバストに制御できることを示す。これらのパラメータ空間が計算精度と効率に及ぼす影響を幅広く調べ、適正なパラメータ設定について議論する。

## 2. 非線形材料モデル

この節では、有限要素解析に用いる NR ゲルのための非線形材料モデル<sup>(1)</sup>について簡単に説明する。

NR ゲル中にはナノシートが配向しており、主方向 (Fig. 1) への単軸引張圧縮試験と単純せん断試験より、ヤング率  $E_i$ 、せん断剛性  $G_{ij}$ 、ポアソン比  $\nu_{ij}$  は負荷ひずみの関数として実験的に評価されている<sup>(1)</sup>。ノンレシプロカル特性はナノシートの座屈に起因するヤング率の引張圧縮非対称性として現象論的に現れ、付録の Fig. A.1 に示すように、ヤング率は負荷ひずみの大きさに依存して顕著な非線形性を示す。一方、ポアソン比  $\nu_{ij}$  には引張圧縮非対称性や負荷ひずみ依存性はほとんど現れず<sup>(1)</sup>、図示することは省略するが、非圧縮性を満たす定数の組み合わせとなる ( $\nu_{12} \sim 0$ ,  $\nu_{13} \sim 1$ ,  $\nu_{31} \sim 0.5$ )。付録の Fig. A.2 に示すように、せん断剛性についてはわずかに負荷ひずみ依存性が現れる。

これらの非線形特性を ABAQUS の UMAT に実装するため、直交異方性を考慮した線形弾性モデルを増分形式に拡張し、ヤング率とせん断剛性をそれぞれの成分ごとに負荷ひずみの関数として折れ線近似で表現する (付録参照)。平面ひずみ条件を  $x_2$  方向に仮定して、ひずみと応力の増分形式を  $\Delta \varepsilon_{ij}$ ,  $\Delta \sigma_{ij}$  と表すとき、

$$\begin{Bmatrix} \Delta \varepsilon_{11} \\ \Delta \varepsilon_{33} \\ \Delta \gamma_{31} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & 0 \\ S_{21} & S_{22} & 0 \\ 0 & 0 & S_{33} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta \sigma_{11} \\ \Delta \sigma_{33} \\ \Delta \sigma_{31} \end{Bmatrix} \quad (1)$$

$$S_{11} = (1 - \nu_{12}^2) / E_1(\varepsilon_{11}) \quad (2)$$

$$S_{12} = -(1 + \nu_{12}) \nu_{31} / E_3(\varepsilon_{33}) \quad (3)$$

$$S_{21} = -(1 + \nu_{12}) \nu_{13} / E_1(\varepsilon_{11}) \quad (4)$$

$$S_{22} = (1 - \nu_{13} \nu_{31}) / E_3(\varepsilon_{33}) \quad (5)$$

$$S_{33} = 1 / G_{31}(\gamma_{31}) \quad (6)$$

と書ける。この材料モデルは線形弾性モデルに属するため、非圧縮性は微圧縮性に緩和して導入される。すなわち、解析に必要なポアソン比を、 $\nu_{12} = 0$ ,  $\nu_{13} = 0.98$ ,  $\nu_{31} = 0.49$  としてそれぞれ与える。

UMAT 内では現在の応力とひずみを既知として、試行されるひずみ増分に対して応力増分を計算し、増分後に応力を更新するとともに、コンシステント接線剛性を出力として与える。ABAQUS では、これらの積分点での値に基づく有限要素方程式の反復計算を行い、増分解析の収束解を得る。

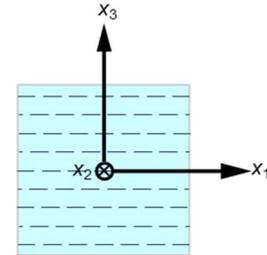


Fig. 1 The  $x_1$ - $x_2$ - $x_3$  orthonormal coordinate prescribed as the material's principal directions with the  $x_1$ - $x_2$  plane parallel to the nanosheets in the NR gel<sup>(1)</sup> (i.e., nanosheets are aligned perpendicular to the  $x_3$ -direction).

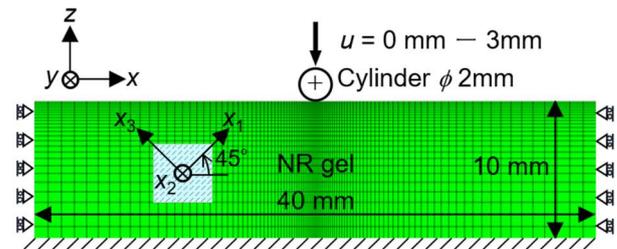


Fig. 2 Initial configuration ( $u = 0$ ) and boundary conditions of the plane-strain finite-element model of the NR gel under cylindrical indentation. The numbers of nodes and elements are 2,652 and 2,525, respectively.

## 3. 有限要素モデル

Fig. 2 に NR ゲルの円筒押し込み解析のための有限要素モデルを示す<sup>(1)</sup>。解析に用いる直交座標系  $x$ - $y$ - $z$  に対して、NR ゲルの主方向を規定する直交座標系  $x_1$ - $x_2$ - $x_3$  (Fig. 1) は 45 度回転しており、円筒インデンターの押し込みによって左右非対称の変形が生じる。ABAQUS での解析において、NR ゲルの非線形材料モデルは UMAT に実装されており (2 節)、円筒インデンターは解析的剛体として設定される。

平面ひずみを仮定して、要素タイプには 4 節点平面ひずみ要素 (CPE4 もしくは CPE4R) を用いる。標準的な CPE4 要素に対して、低減積分を適用する場合には CPE4R 要素となり、アワーグラス制御を利用する場合には CPE4R 要素を用いる。Fig. 2 には、NR ゲルや円筒インデンターの寸法、要素分割、境界条件がそれぞれ図示されている。すなわち、NR ゲルの側面では水平方向の変位を拘束、底面では変位を完全拘束する。NR ゲルと円筒インデンター間の接触は、双方の接触面形状を考慮できるサーフェス-サーフェス機能で離散化される。簡単のために接触面の摩擦をなしとみなす。円筒インデンターの垂直下向きの移動量を押し込み深さ  $u$  (mm) と定義

し、増分解析には自動増分機能をデフォルトで利用する。

人工粘性とアワーグラス制御の解析オプションを利用して、円筒インデンターの押し込み深さを  $u = 3 \text{ mm}$  まで与えることを考える (Fig. 3)。試験解析によって、どちらも利用しない場合には、収束解の得られる限界押し込み深さは  $1.16 \text{ mm}$  であった。この理由として、インデンター直下の変形の厳しい要素にてアワーグラスモード (二つの要素で砂時計型となるゼロエネルギーモード) <sup>(10,13,14)</sup> が発生し、増分解析における反復計算を非収束としていることがわかった。したがって、これらの解析オプションの組み合わせには、アワーグラスモードの発生を防ぎつつ、反復計算を安定に収束させる役割が期待される。

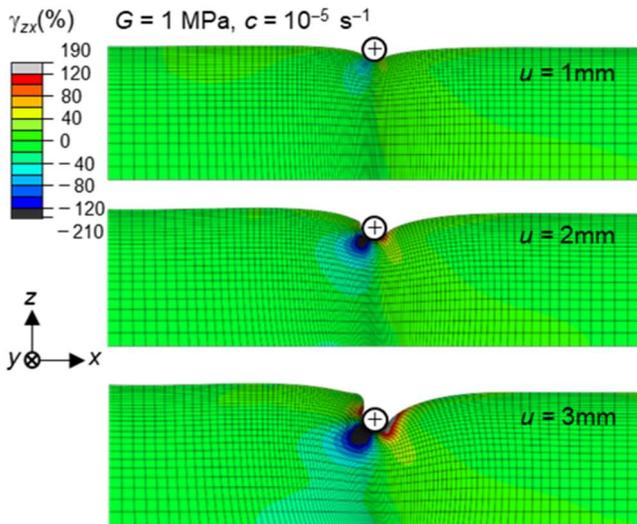


Fig. 3 Deformed configurations and shear strain distributions  $\gamma_{zx}$  at  $u = 1, 2,$  and  $3 \text{ mm}$ , respectively, for  $G = 1 \text{ MPa}$  and  $c = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ . Asymmetric deformation is enhanced by the increase of  $u$  because of the non-reciprocity and non-linearity of the NR gel.

人工粘性を制御するパラメータは減衰係数  $c \text{ (s}^{-1}\text{)}$ 、アワーグラスを制御するパラメータはアワーグラス剛性  $G \text{ (MPa)}$  となる。人工粘性では NR ゲルに単位密度を仮定して計算される粘性力が導入され、円筒インデンターの押し込み速度  $u/t = 3 \text{ mm/s}$  を基準として、減衰係数  $c$  を調整パラメータとして与える <sup>(10,15,16)</sup>。一方、アワーグラス制御では全体剛性法 <sup>(14)</sup> を採用するとき、アワーグラス変形モードに共役な力が設定され、UMAT を用いる場合 (2 節) にはアワーグラス剛性  $G$  を調整パラメータとして与える <sup>(10)</sup>。本研究では、調整パラメータとして  $c$  と  $G$  を考え、増分解析の安定化だけでなく、計算精度と効率に及ぼす影響をパラメトリックに解析する。

## 4. 解析結果

### 4.1. ノンレシプロカル特性

Fig. 3 には、解析例として、粘性係数に  $c = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ 、アワーグラス剛性に  $G = 1 \text{ MPa}$  を用いた場合の解析結果を示す。後述するように、このパラメータセットはアワーグラスモードを引き起こさずに計算精度の高い予測を可能とする (4.4 節)。増分解析も安定に進めることができ、押し込み深さが  $u =$

$3 \text{ mm}$  に至るすべての過程において収束解を得ることができる。押し込み深さが大きくなると左右非対称の変形が強調されて現れるようになり、内部のせん断ひずみ  $\gamma_{zx}$  の分布からもこの非対称性ははっきりと確認できる。円筒インデンターと NR ゲルの接触面では、NR ゲルは相対的に右側から左側にすべりを起こしており、非対称な変形の形成に寄与している。この特徴は実験 <sup>(1)</sup> でも同様に観察されている。

円筒インデンターと NR ゲルの接触面の左下のせん断ひずみが負の領域では、NR ゲルの主方向に変換すると (Fig. 1 と Fig. 2),  $x_1$  方向に圧縮ひずみ、 $x_3$  方向に引張ひずみが発生する。すなわち、ナノシートの座屈によるノンレシプロカル特性は、現象論的な非線形材料モデルを用いた有限要素解析によって適切に再現されていることが確認でき、結果として左右非対称変形を引き起こす。

### 4.2. 人工粘性の影響

Fig. 4 は人工粘性の影響を示しており、減衰係数  $c$  の値が増分解析の安定化と計算精度に及ぼす影響を示している。ここでは簡単のため、アワーグラス剛性を  $G = 0$  とした。反力  $F$  は円筒インデンターが NR ゲルから受ける力の大きさを表しており、押し込み深さが大きくなるに従って増加する。 $c = 0$  の応答は、人工粘性とアワーグラス制御を用いない場合であり、円筒インデンター直下の要素にアワーグラスモードが発生し、これを原因として反復計算の非収束が起こり、 $u = 1.16 \text{ mm}$  までしか解析を続けることができない。これは文献 <sup>(1)</sup> での解析結果と整合する。一方、減衰係数を増加させると、急激な変形が抑制される結果として、増分解析は収束解を得ることができるようになり、いずれの条件でも目標とした押し込み深さ  $u = 3 \text{ mm}$  までの解析に成功している。

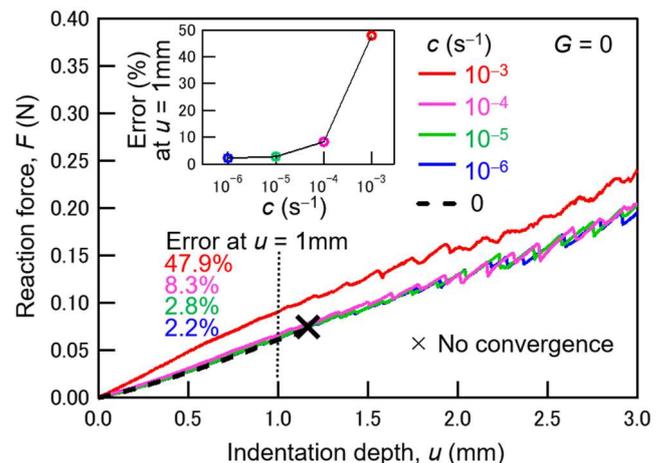


Fig. 4 Effect of damping factor  $c$  on reaction force  $F$  with  $G = 0$  (i.e., without hourglass stiffness). Reaction force error is defined by  $(F - F_0)/F_0 \times 100 \text{ (%)}$  at  $u = 1 \text{ mm}$ , where  $F_0$  is the reaction force obtained with  $c = 0$  and  $G = 0$ .

人工粘性の導入は非収束の問題に対して収束解を得るために大変有効であるが、この値を大きくし過ぎると粘性の影響が解析結果に顕著に現れるため注意が必要である <sup>(15)</sup>。本解析では、反力  $F$  の値が  $c = 0$  の場合と比較して過大な値を予測するようになる。とりわけ、 $c = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$  の場合に過大な反

力を予測することがわかる。人工粘性の導入によって引き起こされる反力誤差を定量化するため、 $u = 1 \text{ mm}$ における反力 $F$ を $c = 0$ かつ $G = 0$ における反力 $F_0$ を用いて定量化する ( $F_0$ は $1.16 \text{ mm}$ 以下でしか定義できないため)。すなわち、図中の誤差は $(F - F_0)/F_0 \times 100$  (%)として定義されており、減衰係数として $c = 10^{-6} \sim 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ の値を用いれば、誤差を数%以内に抑制して計算精度の高い解析を進めることができる。

減衰係数の導入によって解析される反力の応答には、のこぎり状のがたつきがみられることに注意が必要である。このがたつきはアワーグラスモードの発生に起因している。すなわち、人工粘性の導入はアワーグラスモードが発生しても収束解を得るために機能しているが、アワーグラスモードの発生を防ぐことはできず、内部のひずみや応力の分布には連続性が失われ、特異性が現れる。

### 4.3. アワーグラス剛性の影響

Fig. 5 は、減衰係数を $c = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ に固定して、アワーグラス剛性の増加が反力に及ぼす影響を示している。アワーグラス剛性の増加は反力誤差を増加させる傾向を有するが、これを代償として、反力の応答に現れるのこぎり状のがたつきを防ぐ役割のあることがわかる。すなわち、アワーグラス剛性を $G = 1 \sim 10 \text{ MPa}$ のレベルで増加させると、アワーグラスモードの発生を抑制できる。したがって、アワーグラスモードの発生を防ぎつつ、反力誤差を最小限にする値がアワーグラス剛性の適正值であると理解できる。

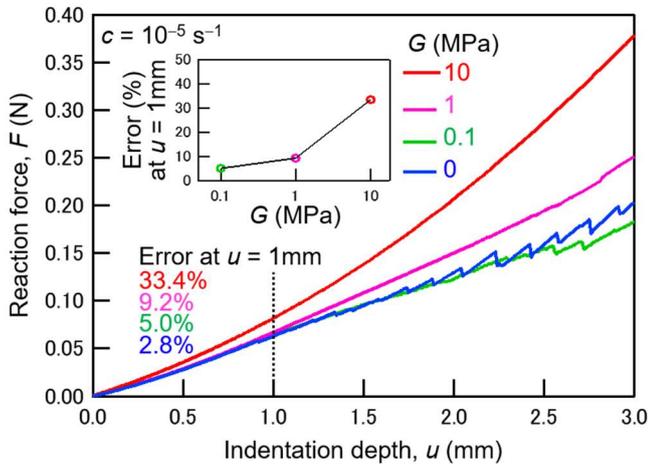


Fig. 5 Effect of hourglass stiffness  $G$  on reaction force  $F$  with  $c = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ . Reaction force error is defined by  $(F - F_0)/F_0 \times 100$  (%) at  $u = 1 \text{ mm}$ , where  $F_0$  is the reaction force obtained with  $c = 0$  and  $G = 0$ .

### 4.4. 計算精度と効率

減衰係数とアワーグラス剛性を調整パラメータとして、適正なパラメータ空間を調べることの重要性は明らかとなった。Fig. 6 には、これらのパラメータを変化させることによって得られる反力誤差のコンター図を示す。このコンター図は有限要素解析によって得られる計算点 (記号●) での値を内挿することによって作成された。さらに、アワーグラスモードが発生する計算点には記号△を追加で示す。この図は反力誤差に及ぼす減衰係数とアワーグラス剛性の相互作用を

示している。計算点での反力誤差と記号△より、アワーグラスモードの発生を防ぎつつ、反力誤差を低く抑えるためには、アワーグラス剛性は $G = 1 \text{ MPa}$  周辺、減衰係数は $c = 10^{-6} \sim 10^{-5} \text{ s}^{-1}$  周辺で構成されるパラメータ空間の値を用いることが適正であるといえる。

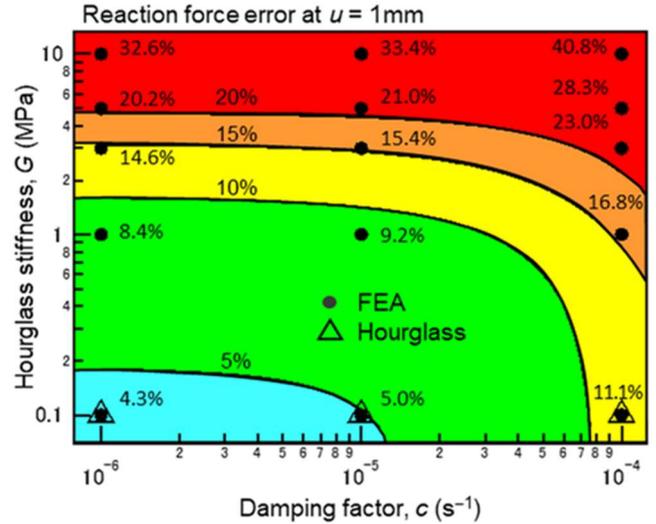


Fig. 6 Diagram of computational accuracy (i.e., reaction force error) as a function of damping factor  $c$  and hourglass stiffness  $G$ . Symbol ● shows the computational points obtained by finite element analysis whereas symbol △ shows the cases that causes hourglass deformation modes.

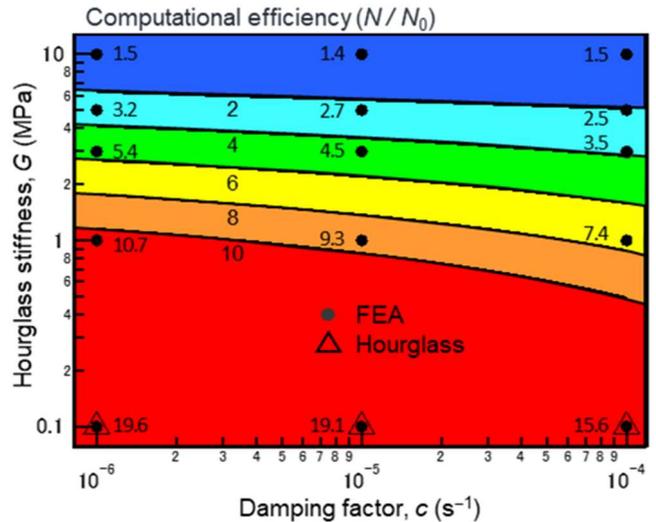


Fig. 7 Diagram of computational efficiency (i.e.,  $N/N_0$ ) as a function of damping factor  $c$  and hourglass stiffness  $G$ . Here  $N$  is the total number of increments needed to obtain  $u = 3 \text{ mm}$ , whereas  $N_0$  is the intermediate number of increments needed to obtain  $u = 1 \text{ mm}$  for  $c = 0$  and  $G = 0$ . Symbol ● shows the computational points obtained by finite element analysis whereas symbol △ shows the cases that causes hourglass deformation modes.

Fig. 7 には、同様のパラメータ空間において計算効率をコンター図として示す。計算効率を定義するため、 $u = 3 \text{ mm}$

までの解析に必要とされた増分計算回数を $N$ として、 $c = 0$ かつ $G = 0$ の場合に $u = 1$  mm までの解析に必要とされた増分計算回数を $N_0$ として正規化を行った。したがって、 $N/N_0$ の値が小さいほど計算効率に優れている。アワグラス剛性を増加させると計算効率は顕著に向上し、減衰係数の増加も効果はあるが二次的であることがわかる。

Fig. 6 と Fig. 7 の関係より、反力誤差と計算効率の間にはトレードオフの関係が成立している。この関係を回避することはできないが、目的に応じて計算精度と計算効率のバランスを調整できることは重要である。人工粘性とアワグラス制御の導入によって、収束解を得ることが困難であった大変形解析は収束可能となるため非常に大きな利点がある。

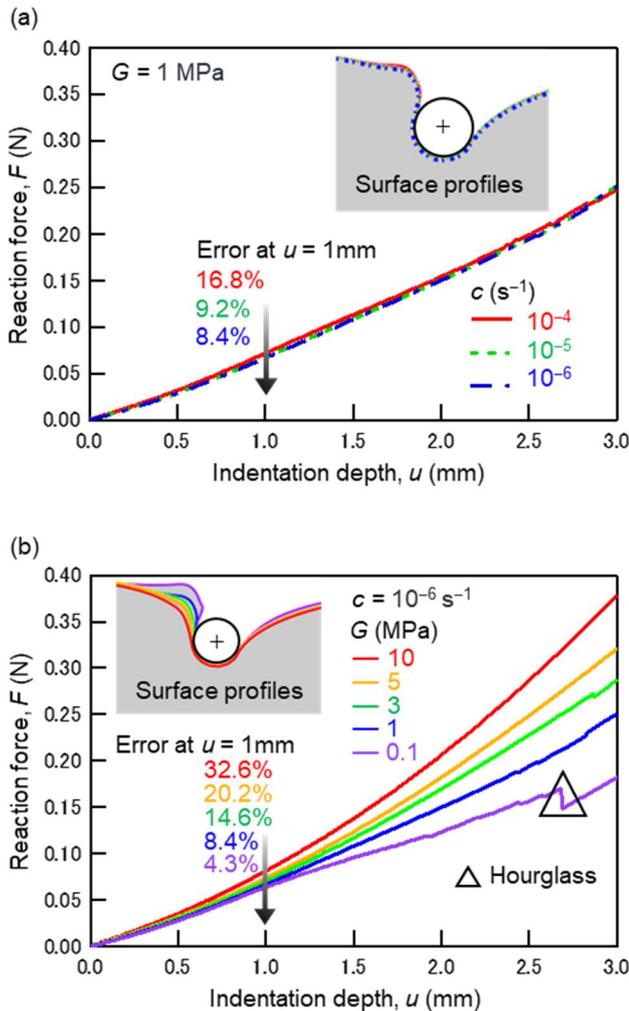


Fig. 8 Comparison of surface profiles at  $u = 3$  mm (a) for  $G = 1$  MPa and  $c = 10^{-6} \sim 10^{-4}$   $s^{-1}$  and (b) for  $G = 0.1 \sim 10$  MPa and  $c = 10^{-6}$   $s^{-1}$ .

#### 4.5. 表面形状の比較

ここまでの解析では反力を調べることによって、増分安定性や計算精度、計算効率について議論しており、変形形状の妥当性については議論していない。そこで Fig. 8 では、用いるパラメータセットが $u = 3$  mmにおける表面形状に及ぼす影響を比較する。Fig. 8(a)は $G = 1$  MPaかつ $c = 10^{-6} \sim 10^{-4}$   $s^{-1}$ を用いるときの結果であり、アワグラス剛性が適正な値

( $G = 1$  MPa)においては、表面形状の違いにほとんど差異のないことがわかる。一方、Fig. 8(b)は $G = 0.1 \sim 10$  MPa かつ  $c = 10^{-6}$   $s^{-1}$ を用いるときの結果であり、アワグラス剛性が $G = 1$  MPaから0.1 MPaに小さくなると、アワグラスモードが発生して反力の応答にはがたつきが現れる(記号 $\Delta$ )。これに対して、 $G = 1$  MPaから大きくなると反力誤差が増加するに従って、表面形状にも違いが顕著となる。

アワグラス剛性の適正値を議論する場合には、目標とする変形量を設定して、その変形過程にてアワグラスモードが発生しないようにアワグラス剛性を減少させることが必要となる。この傾向は計算効率の低下を伴う (Fig. 7)。したがって、表面形状の精度を議論する場合にも、計算誤差と計算効率はトレードオフの関係を有しており、人工粘性とアワグラス剛性は目的に応じて調整パラメータとして安定に機能することがわかった。

#### 5. 結 言

本研究では、NR ゲルの円筒押し込み大変形解析に人工粘性とアワグラス制御の及ぼす影響を調べ、増分解析の安定化と計算精度、計算効率について評価した。人工粘性の導入によって、過酷な大変形下においても増分解析は安定化し、収束解を求めることができる。しかしながら、アワグラスモードの発生を防ぐことはできず、したがって、ひずみや応力の分布には連続性が失われ、特異性が現れる。この問題はアワグラス制御の導入によって回避できる。これらのパラメータが計算精度と計算効率に及ぼす影響を幅広く調べ、減衰係数とアワグラス剛性の適正値を評価した。

計算誤差と計算効率の間にはトレードオフの関係があることは想像できることであるが、目的に応じて計算精度と計算効率のバランスを調整することができ、収束解を得ることが困難であった大変形解析が収束可能となることには大きな利点がある。本研究では適正なパラメータ空間について議論したが、最適なパラメータセットを同定する方法を考えることも今後の課題として有意義である。このような大変形解析が、実験結果を定性的だけでなく定量的に説明できるようになり、NR ゲルを工学応用するための検討に役立てられることが期待される。

#### 謝 辞

本研究はJST, CREST (JPMJCR22B1) の支援を受けて行われた。ここに記して謝意を表す。

#### 付 録

2節の非線形材料モデルにおいて、式(2)~(6)に含まれるヤング率( $E_1(\epsilon_{11}), E_3(\epsilon_{33})$ )とせん断剛性( $G_{31}(\gamma_{31})$ )の負荷ひずみ依存性を Fig. A.1 と Fig. A.2 にそれぞれ図示する。実験結果<sup>(1)</sup>を精度良く再現できるように折れ線で関数化されている。ただし、折れ線近似によるフィッティングは図示する範囲(ひずみ 10%)までであることに注意が必要である。すなわち、さらに大きなひずみ領域の応答は外挿して表現される。本論文では、有限要素解析における増分安定性や計算

効率, 計算精度に着目しており, 材料モデルとして外挿することの妥当性については議論しない.

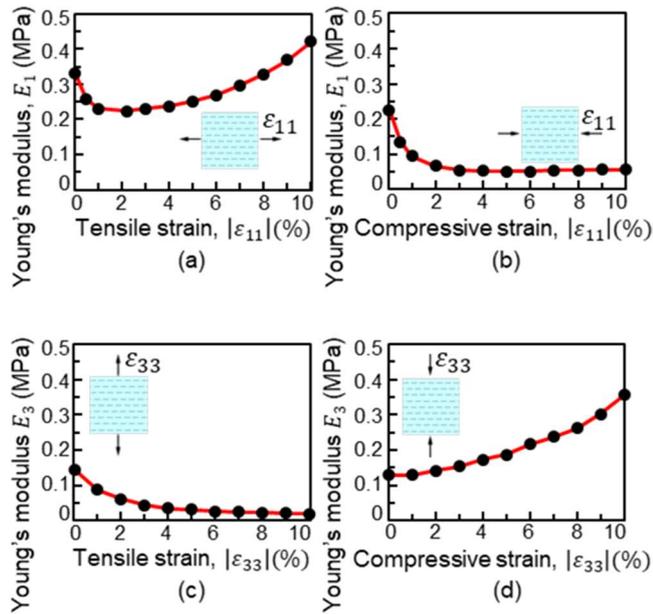


Fig. A.1 Young's moduli,  $E_1$  and  $E_3$ , under uniaxial tension and compression in the  $x_1$ - and  $x_3$ -directions. (a)  $E_1$  for  $\epsilon_{11} \geq 0$ , (b)  $E_1$  for  $\epsilon_{11} < 0$ , (c)  $E_3$  for  $\epsilon_{33} \geq 0$ , and (d)  $E_3$  for  $\epsilon_{33} < 0$ . Individual moduli are assumed as a function of the strain in the corresponding direction.

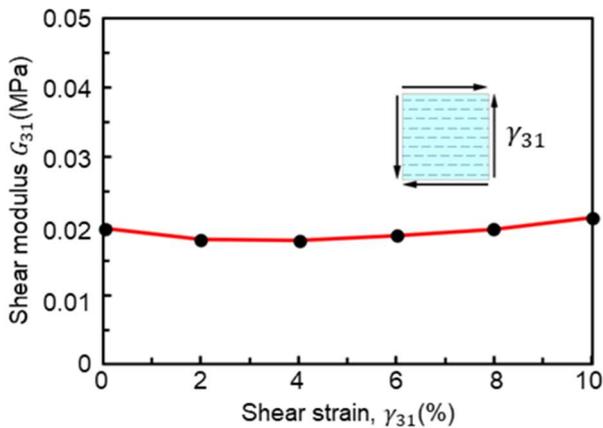


Fig. A.2 Shear modulus,  $G_{31}$ , as a function of shear strain  $\gamma_{31}$ . The modulus is also assumed as a function of the strain in the corresponding direction.

## 参考文献

- (1) X. Wang, Z. Li, S. Wang, K. Sano, Z. Sun, Z. Shao, A. Takeishi, S. Matsubara, D. Okumura, N. Sakai, T. Sasaki, T. Aida, Y. Ishida: Mechanical nonreciprocity in a uniform composite material, *Science*, **380**(2023), pp.192–198.
- (2) B. Sun, S.H. Kang: A mechanically one-way material, A material with asymmetric mechanical responses offers diverse potential applications, *Science*, **380**(2023), p.135.
- (3) <https://www.youtube.com/watch?v=PVhhZRYo2iY>
- (4) R.M. Jones: *Buckling of Bars, Plates, and Shells*, 2006, Bull Ridge Publishing.
- (5) R. Parnes, A. Chiskis: Buckling of nano-fibre reinforced composites: a re-examination of elastic buckling, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **50**(2002), pp.855–879.
- (6) C. Coulais, D. Sounas, A. Alù: Static non-reciprocity in mechanical metamaterials, *Nature*, **542**(2017), pp.461–464.
- (7) M. Brandenbourger, X. Locsin, E. Lerner, C. Coulais: Non-reciprocal robotic metamaterials, *Nature Communications*, **10**(2019), 4608.
- (8) M. Shaat: Nonreciprocal elasticity and the realization of static and dynamic nonreciprocity, *Scientific Reports*, **10**(2020), 21676.
- (9) M. Shaat, M.A. Moubarez, M.O. Khan, M.A. Khan, A. Alzo'ubi: Metamaterials with giant and tailorable nonreciprocal elastic moduli, *Physical Review Applied*, **14**(2020), 014005.
- (10) Abaqus 6.14 User Documentation, 2014, Dassault Systems SIMULIA Corporation.
- (11) P. Vannucci: *Anisotropic Elasticity*, 2018, Springer Nature.
- (12) L.R.G. Treloar: *The Physics of Rubber Elasticity*, Third Edition, 1975, Oxford University Press.
- (13) S. Bieber F. Auricchio, A. Reali, M. Bischoff: Artificial instabilities of finite elements for nonlinear elasticity: Analysis and remedies, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **124**(2023), pp.2638–2675.
- (14) D.P. Flanagan, T. Belytschko: A uniform strain hexahedron and quadrilateral with orthogonal hourglass control, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **17**(1981), pp.679–706.
- (15) D. Okumura, T. Inagaki, N. Ohno: Effect of prestrains on swelling-induced buckling patterns in gel films with a square lattice of holes, *International Journal of Solids and Structures*, **58**(2015), pp.288–300.
- (16) R. Hoshi, H. Miyoshi, S. Matsubara, D. Okumura: Effects of initial imperfection and mesh resolution on wrinkle and crease analyses, *Transactions of the JSME (in Japanese)*, **87**(2021), 21-00045.

# トポロジー導関数を用いた 3次元スカラー波動散乱場のクラック決定解析

## CRACK DETERMINATION USING TOPOLOGICAL DERIVATIVE IN 3-D SCALAR WAVE SCATTERING FIELD

吉川 仁<sup>1)</sup>, 林 正磨<sup>2)</sup>

Hitoshi YOSHIKAWA and Shouma RIN

1) 京都大学大学院情報学研究科 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: yskhit@i.kyoto-u.ac.jp)  
 2) コーエーテクモ (〒 223-8503 神奈川県横浜市港北区箕輪町 1-18-12, E-mail: )

A determination of cracks using topology optimization In 3-D scalar wave scattering field is considered. We introduce the cost function which is the misfit function between the observed data and the numerical data on the boundary of the domain having the cracks. We determine the cracks as the minimizer of the cost function using the topological derivative. The determination of two cracks having the less forecast information are shown in this paper.

**Key Words:** crack determination, topological derivative, TD-BIEM

### 1. 緒言

一般に行われている超音波非破壊評価では、探触子を材料表面に当て超音波を送受し、受信した波形データを用いて内部の欠陥やクラックの情報を推定している。工学材料や社会インフラを対象とするような実問題では、欠陥の有無だけでなく、欠陥の大きさや形状や個数を推定できることが好ましく、欠陥についての先験情報を与えない定量的な非破壊評価手法が求められている<sup>(1)(2)</sup>。

本研究では、トポロジー導関数を用いた定量的非破壊評価を考える。設計自由度が高いとされるトポロジー最適化を非破壊評価に応用した本手法では、欠陥の個数、位置、形状を定量的な指標に基づいて決定することができ、近年注目されている技術である。レベルセット法では、トポロジー導関数の分布をレベルセット関数とみなし、レベルセット関数の値がゼロとなる等高線(面)を欠陥の境界とし欠陥形状を決定する<sup>(3)</sup>。したがって、レベルセット法では欠陥の形状を解析することはできるが、厚みのないクラックの決定には向いていない。

Bonnet<sup>(4)</sup> や Bellis ら<sup>(5)</sup> は 3次元におけるトポロジー導関数を用いたクラック決定問題を解いているが、トポロジー導関数が負の小さな値を取る内点の集合の内部にクラックが存在する、といった大域的なクラック決定しか実現できていない。著者らは、Bonnet らの主張するクラックが存在し得る

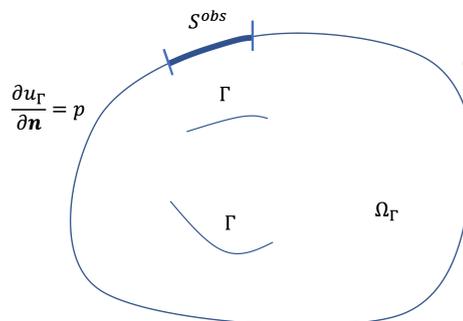


Fig. 1  $u_\Gamma$  についての初期値境界値問題

領域の中に、複数のクラックの候補を見つけ出し、候補クラックの中から正解クラックを選び出すことを試み、2次元スカラー波動場においてトポロジー導関数を用いて様々な種類のクラックの決定解析を行なった<sup>(6)</sup>。具体的には、Bonnet<sup>(4)</sup> が定式化した時間域のクラックによる波動散乱問題のトポロジー導関数を用いて得られたトポロジー導関数の分布から、複数のクラック候補を選び出し、目的関数を最小とする候補クラックの組み合わせを選び出す。そのようにして選ばれた候補クラックによりクラックの個数、位置、向きを決定する。さらに、個数、位置、向きが決定されたクラックのサイズをそれぞれ変化させ、目的関数が小さくなるようにクラックサイズを決定した。

本論文では、前報で示したトポロジー導関数を用いたクラックの決定手法が3次元スカラー波動場においても有用で

2023 年 10 月 12 日受付, 2023 年 10 月 27 日受理

あるのかを確認する。

## 2. スカラー波動問題におけるトポロジー導関数を用いたクラック決定解析

Fig. 1 に示すような複数のクラック  $\Gamma$  が内在する領域  $\Omega$  について次の初期値境界値問題を考える。

$$\begin{cases} \Delta u_\Gamma(\boldsymbol{\xi}, t) - \frac{1}{c^2} \ddot{u}_\Gamma(\boldsymbol{\xi}, t) = 0, & \boldsymbol{\xi} \in \Omega_\Gamma, 0 < t \\ \frac{\partial u_\Gamma}{\partial \mathbf{n}}(\boldsymbol{\xi}, t) = p(\boldsymbol{\xi}, t), & \boldsymbol{\xi} \in S, 0 < t \\ \frac{\partial u_\Gamma^\pm}{\partial \mathbf{n}^\pm}(\boldsymbol{\xi}, t) = 0, & \boldsymbol{\xi} \in \Gamma^\pm, 0 < t \\ u_\Gamma(\boldsymbol{\xi}, 0) = \dot{u}_\Gamma(\boldsymbol{\xi}, 0) = 0, & \boldsymbol{\xi} \in \Omega_\Gamma \end{cases} \quad (1)$$

ここに、 $\Omega_\Gamma = \Omega \setminus \Gamma$ 、 $S$  は領域  $\Omega$  の境界、 $c$  は波速、 $p$  は Neumann 条件で既知関数、 $(\cdot) = \frac{\partial}{\partial t}$ 、 $\frac{\partial}{\partial \mathbf{n}} = n_i(\boldsymbol{\xi}) \frac{\partial}{\partial \xi_i}$  で  $\mathbf{n}(\boldsymbol{\xi})$  は境界上の点  $\boldsymbol{\xi}$  における外向き法線ベクトル、 $\mathbf{n}^+$ 、 $\mathbf{n}^-$  はそれぞれクラック  $\Gamma$  の + 面 ( $\Gamma^+$ )、- 面 ( $\Gamma^-$ ) における法線ベクトル、 $u^\pm$  は  $u$  の  $\mathbf{n}^\pm$  方向からのクラック上への極限を表す。

クラックが正解の配置であるときの  $u_\Gamma$  の値が境界  $S$  の一部  $S^{\text{obs}}$  にて  $u^{\text{obs}}$  として計測されているとする。このとき、次の目的汎関数  $J(\Omega_\Gamma)$  を導入する。

$$J(\Omega_\Gamma) = \int_0^T \int_{S^{\text{obs}}} \varphi(u_\Gamma, \boldsymbol{\xi}, t) d\Gamma_\boldsymbol{\xi} dt, \quad (2)$$

$$\varphi(u_\Gamma, \boldsymbol{\xi}, t) = \frac{1}{2} \{u_\Gamma(\boldsymbol{\xi}, t) - u^{\text{obs}}(\boldsymbol{\xi}, t)\}^2 \quad (3)$$

この  $J(\Omega_\Gamma)$  の値が最小となるクラックの配置  $\Gamma$  を決定する問題を考える。

領域内の点  $\mathbf{x}^\circ$  に新たな長さ  $\varepsilon$  で単位法線ベクトル  $\mathbf{m}$  の向きを持つ微小なクラック  $D_\varepsilon(\mathbf{m})$  が発生した際の目的汎関数の変化率  $T$  を考える。

$$T(\mathbf{x}^\circ, \mathbf{m}) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon^3} \{J(\Omega_{\Gamma_\varepsilon(\mathbf{m})}) - J(\Omega_\Gamma)\} \quad (4)$$

この  $T$  をトポロジー導関数と呼ぶ。ここに、 $\Gamma_\varepsilon(\mathbf{m}) = \Gamma \cup D_\varepsilon(\mathbf{m})$ 、 $\Omega_{\Gamma_\varepsilon(\mathbf{m})} = \Omega_\Gamma \setminus D_\varepsilon(\mathbf{m})$  である。正解のクラック配置において点  $\mathbf{x}^\circ$  に法線  $\mathbf{m}$  方向のクラックが存在しているのであれば、 $J(\Omega_{\Gamma_\varepsilon(\mathbf{m})})$  は小さくなり、トポロジー導関数  $T(\mathbf{x}^\circ, \mathbf{m})$  は負の値となるはずである。この考えに基づいて、トポロジー導関数の分布とその値を用いてクラックを決定することを考える。

次の  $\hat{u}_\Gamma$  についての随伴問題を考える。

$$\begin{cases} \Delta \hat{u}_\Gamma(\boldsymbol{\xi}, t) - \frac{1}{c^2} \ddot{\hat{u}}_\Gamma(\boldsymbol{\xi}, t) = 0, & \boldsymbol{\xi} \in \Omega_\Gamma, 0 < t < T \\ \frac{\partial \hat{u}_\Gamma}{\partial \mathbf{n}}(\boldsymbol{\xi}, t) = \frac{\partial \varphi}{\partial u_\Gamma}(u_\Gamma(\boldsymbol{\xi}, T-t), \boldsymbol{\xi}, T-t), & \boldsymbol{\xi} \in S^{\text{obs}}, 0 < t < T \\ \frac{\partial \hat{u}_\Gamma}{\partial \mathbf{n}}(\boldsymbol{\xi}, t) = 0, & \boldsymbol{\xi} \in S \setminus S^{\text{obs}}, 0 < t < T \\ \frac{\partial \hat{u}_\Gamma^\pm}{\partial \mathbf{n}^\pm}(\boldsymbol{\xi}, t) = 0, & \boldsymbol{\xi} \in \Gamma^\pm, 0 < t < T \\ \hat{u}_\Gamma(\boldsymbol{\xi}, 0) = \dot{\hat{u}}_\Gamma(\boldsymbol{\xi}, 0) = 0, & \boldsymbol{\xi} \in \Omega_\Gamma \end{cases} \quad (5)$$

このとき、トポロジー導関数は次のように表される (4)。

$$T(\mathbf{x}^\circ, \mathbf{m}) = \hat{u}_{\Gamma, i} * u_{\Gamma, j}(\mathbf{x}^\circ, t) \mathcal{B}_{ij} \quad (6)$$

さらに、クラックが微小な円形平面の場合、 $\mathcal{B}$  は次式のように求められる。

$$\mathcal{B} = \frac{8}{3}(\mathbf{m} \otimes \mathbf{m}) \quad (7)$$

ここで、法線  $\mathbf{m}$  によるトポロジー導関数  $T(\mathbf{x}^\circ, \mathbf{m})$  の最小値を考える。 $T(\mathbf{x}^\circ, \mathbf{m})$  が最小となるときの法線  $\mathbf{m}$  を  $\mathbf{m}^{\text{min}}$  とする。式 (6), (7) より  $T(\mathbf{x}^\circ, \mathbf{m})$  は次式で表される。

$$T(\mathbf{x}^\circ, \mathbf{m}) = \mathbf{m}^T \mathcal{S} \mathbf{m} \quad (8)$$

ここに、 $\mathcal{S}_{ij} = \frac{8}{3} \hat{u}_{\Gamma, i} * u_{\Gamma, j}(\mathbf{x}^\circ, t)$  であり、“\*” は時間に関する畳み込みを表す。 $\mathbf{m}$  は単位ベクトルなので  $|\mathbf{m}| = 1$  であるため、次式で表されるラグランジェ関数  $L$  の極値問題を考えれば良い。

$$L(\mathbf{m}, \lambda) = \mathbf{m}^T \mathcal{S} \mathbf{m} - \lambda(|\mathbf{m}| - 1) \quad (9)$$

$L$  が極値をとる条件は次式で表される。

$$(\mathcal{S} + \mathcal{S}^T) \mathbf{m} - \lambda \mathbf{m} = 0 \quad (10)$$

式 (10) は  $\mathbf{m}$  が  $\mathcal{S} + \mathcal{S}^T$  の固有ベクトルであることを示す。 $\mathcal{S} + \mathcal{S}^T$  の単位固有ベクトルの中で  $T(\mathbf{x}^\circ, \mathbf{m})$  の値を最も小さくする  $\mathbf{m}$  が  $\mathbf{m}^{\text{min}}$  である。

本研究では境界要素法を用いた数値解析により、 $u_\Gamma$ 、 $\hat{u}_\Gamma$  を数値的に求め、領域の内点  $\mathbf{x}^\circ$  において法線方向  $\mathbf{m}^{\text{min}}$  を向いた微小クラックを発生させたときのトポロジー導関数  $T(\mathbf{x}^\circ, \mathbf{m}^{\text{min}})$  を計算する。

## 3. トポロジー導関数を用いたクラック決定解析の手順

以下にトポロジー導関数を用いたクラック決定解析の手順を示す。

1. クラックが存在しうる領域内部の格子点上で式 (6) で表されるトポロジー導関数の最小値とそれを与える  $\mathbf{m}^{\text{min}}$  を求める。
2. 1 で求めたトポロジー導関数の値が、ある閾値以下となる格子点を繋ぎ合わせ三角要素を作り、三角形要素同士を連結させたもののうち、一定以上の大きさのものをクラックの候補とする。各クラックの候補の存在を仮定して目的汎関数  $J$  を計算し、そのクラックが存在しないときと比べて目的汎関数  $J$  の値が小さくなる場合のみクラックを発生させる。ここで、三角形要素に関する閾値については3つの頂点  $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}$  が次の条件 a, b を満たしていることとする。

a.

$$\begin{cases} \max_{i \in \{1, 2, 3\}} |x_i - y_i| \leq \Delta x \\ \max_{i \in \{1, 2, 3\}} |y_i - z_i| \leq \Delta x \\ \max_{i \in \{1, 2, 3\}} |z_i - x_i| \leq \Delta x \end{cases} \quad (11)$$

b.

$$\begin{cases} |m_x^{\min} \cdot h| \geq K \\ |m_y^{\min} \cdot h| \geq K \\ |m_z^{\min} \cdot h| \geq K \end{cases} \quad (12)$$

ここに、 $\Delta x$  は格子間距離、 $m_x^{\min}, m_y^{\min}, m_z^{\min}$  はそれぞれ点  $x, y, z$  における  $m^{\min}$ 、 $h$  は三角形要素の単位法線ベクトル、 $K$  は適当な定数である。また、複雑な形状をもつクラックの発生を防ぐため、辺  $e_{lm}$  を共有している隣接する三角形要素  $l, m$  について次の条件 c, d を満たしていることとする。

c.

$$h_l \cdot h_m \geq M \quad (13)$$

d. 辺  $e_{lm}$  は三角形要素  $l, m$  以外の三角形要素の一边とならない。

ここに、 $M$  は適当な定数である。

3. 手順 2 で発生させたクラックを配置に持つ領域におけるトポロジー導関数を計算し、2 での条件  $a \sim d$  を満たすようにクラックを 1 要素分延長する。

4. 3 を繰り返す。条件  $a \sim d$  を満たすようにクラックを延長できない場合は計算を終了する。各繰り返し step 毎に目的汎関数を計算し、その値が最小となるクラックの配置を最終的な計算結果とする。

#### 4. 数値解析結果

Fig. 2 に示すような原点中心の一辺 2 の立方体内部にクラックが存在するような無限領域を考える。入射波として 3 方向から次の平面波を入射する。

$$u_I(\mathbf{x}, t) = u_0 \left\{ 1 - \cos 2\pi \left( t - \frac{|x_I - d|}{c} \right) \right\}, \quad \frac{|x_I - d|}{c} \leq t \leq 1 + \frac{|x_I - d|}{c}, \quad I = 1, 2, 3 \quad (14)$$

ここに、 $u_0 = 0.1, c = 1, d = 2$  とする。対象が無限領域のため、観測点は原点を中心とした 1 辺 5 の立方体の各頂点  $\mathbf{x}^m, m = 1, \dots, 8$  とする。観測点  $\mathbf{x}^m$  にて  $u_I^{\text{obs}}(\mathbf{x}^m, t)$  を計測し、次の目的汎関数の最小化問題を考える。

$$J(\Omega_\gamma) = \frac{1}{2} \sum_{I=1}^3 \sum_{m=1}^8 \int_{-\infty}^{\infty} |u_{rI}(\mathbf{x}^m, t) - u_I^{\text{obs}}(\mathbf{x}^m, t)|^2 dt \quad (15)$$

##### 4.1. 数値例 1

Fig. 3 に示すように、正解のクラックを  $(0.25, 0.1, 0.5), (-0.25, 0.1, 0), (0.25, -0.6, -0.25), (-0.25, -0.6, -0.75)$  の 4 点を頂点とする一辺 0.5 の平行四辺形 1 つとし、そのクラックを決定する解析を行った。時間ステップ幅を 0.15、時間ステップ数を 70、手順 2 での閾値を  $K = 0.9, M = 0.5$  とした。

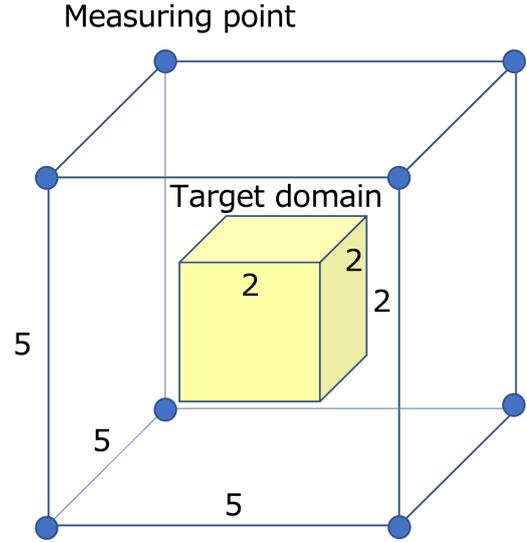


Fig. 2 対象領域と観測点

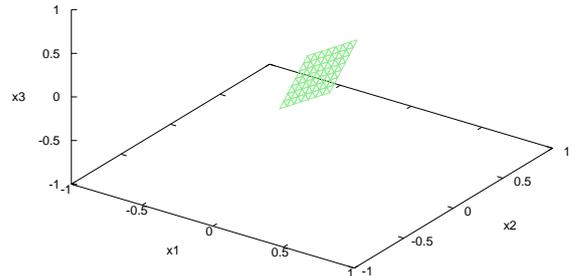


Fig. 3 正解のクラック (数値例 1)

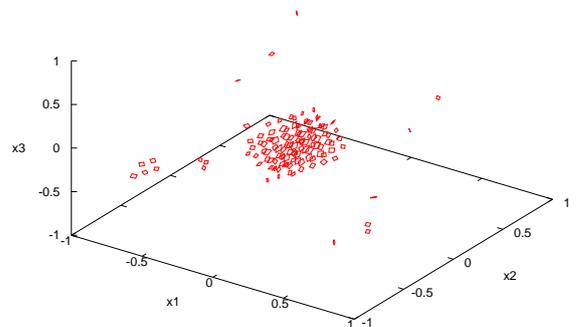


Fig. 4 手順 1 でのトポロジー導関数の計算結果

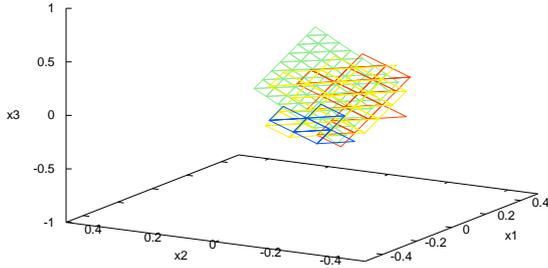


Fig. 5 候補クラック  $\Gamma_1$ (赤),  $\Gamma_2$ (黄),  $\Gamma_3$ (青) と正解のクラック (黄緑) との位置関係

クラックが存在する一辺2の立方体を対象領域とし、その内部の  $25 \times 25 \times 25 = 15625$  点の格子点  $\mathbf{x}^o$  でのトポロジー導関数  $T(\mathbf{x}^o, \mathbf{m}^{\min})$  を計算した。結果を Fig. 4 で示す。Fig. 4 では、各点  $\mathbf{x}^o$  でのトポロジー導関数の値と  $\mathbf{m}_x^{\min}$  の向きを持つ平面要素をプロットしている。この平面要素は  $\mathbf{m}_x^{\min}$  を法線に持ち、次式の辺長の正方形である。

$$\frac{|T(\mathbf{x}, \mathbf{m}_x^{\min})|}{|\min_{\mathbf{y} \in \mathcal{X}} T(\mathbf{y}, \mathbf{m}_y^{\min})|} \Delta x \quad (16)$$

ここに、 $\mathcal{X}$  は全格子点の集合を表す。つまり、トポロジー導関数の絶対値が大きいものほど、大きな正方形として表している。ただし、見やすさのため式 (16) での値が  $0.5\Delta x$  以下の点での平面要素はプロットしていない。図を確認すると、正解の位置に近い点での平面要素が大きく表示されていることがわかる。

手順2におけるクラックの候補と各クラックの存在を仮定した場合の目的汎関数の値をそれぞれ Fig. 5、Fig. 6、Table 1 で示す。なお、候補を絞るためメッシュの連結の数が5つ以上のものを選んでいく。Fig. 5 に示すようにクラックの候補を  $\Gamma_1$ 、 $\Gamma_2$ 、 $\Gamma_3$  と名付ける。Table 1 を確認すると、クラック  $\Gamma_1$  のみが存在する場合に目的汎関数の値が最も小さくなった。これより、クラック  $\Gamma_1$  のみを発生させることとする。なお、表中の"—" は、目的汎関数の値がクラックが存在しないとして求めた値よりも大きな値となった場合を表している。手順3の操作を繰り返し行い、クラック  $\Gamma_1$  の延長を図る。手順3の繰り返しにおいて、8ステップ以降は目的関数が大きくなったため、8つの要素を付け加えたクラック形状を推定クラックとする。手順3の操作後のクラックと正解のクラックとの比較を Fig. 7、Fig. 8 に示す。最終的に十分な精度でクラックの位置と向きを特定できていることがわかるが、形状やサイズについては必ずしも十分な精度で決定できたとは言えない結果である。

#### 4.2. 数値例 2

2つの大きさの異なるクラックに対しての決定解析を行う。Fig. 9 に示すように、 $(-0.2, 0.5, 1)$ 、 $(-0.2, 0, 0.5)$ 、 $(-0.7, 0, 0)$ 、

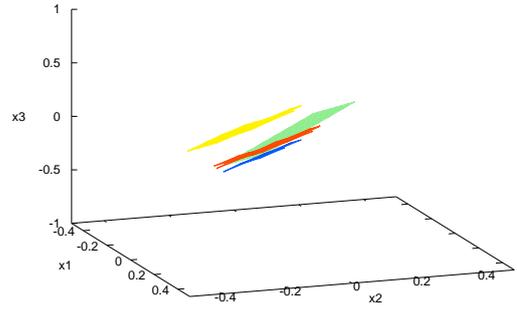


Fig. 6 候補クラック  $\Gamma_1$ (赤),  $\Gamma_2$ (黄),  $\Gamma_3$ (青) と正解のクラック (黄緑) との位置関係 [別視点]

Table 1 各クラック候補に対する目的汎関数の値

存在を仮定するクラック	目的汎関数の値
なし	$7.008 \times 10^{-7}$
$\Gamma_1$	$2.097 \times 10^{-7}$
$\Gamma_2$	$3.937 \times 10^{-7}$
$\Gamma_3$	$7.044 \times 10^{-7}$
$\Gamma_1, \Gamma_2$	—
$\Gamma_1, \Gamma_3$	$2.484 \times 10^{-7}$

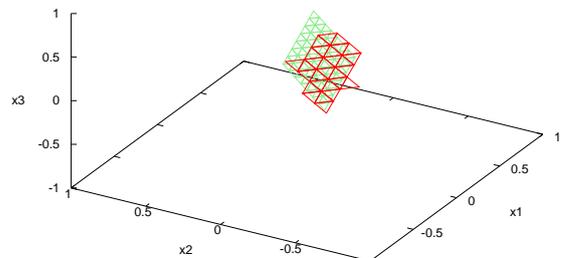


Fig. 7 要素延長後のクラック (赤) と正解のクラック (黄緑)

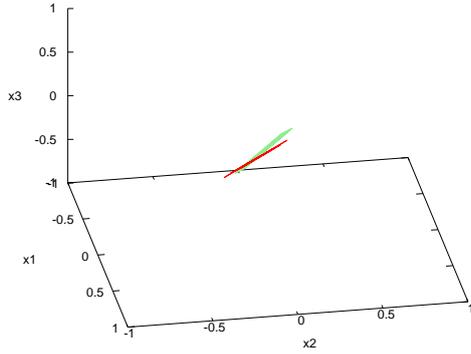


Fig. 8 要素延長後のクラック (赤) と正解のクラック (黄緑)[別視点]

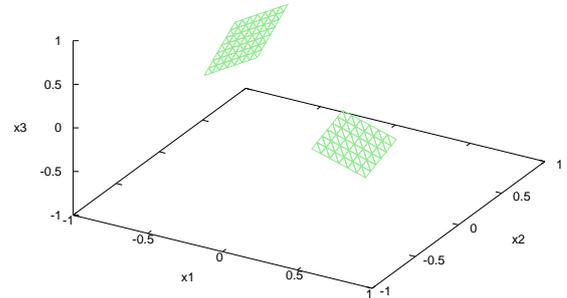


Fig. 9 正解のクラック (数値例 2)

( $-0.7, 0.5, 0.5$ ) の 4 点を頂点とする一辺  $0.5$  の平行四辺形と、 $(0.3, -0.6, 0)$ ,  $(0.3, -0.2, 0.2)$ ,  $(0.7, -0.2, 0)$ ,  $(0.7, -0.6, -0.2)$  の 4 点を頂点とする一辺  $0.4$  の平行四辺形を正解のクラックとする。他のパラメータについては、数値例 1 と同様にした。各格子点でのトポロジー導関数の大きさに比例した一辺を持つ平面要素のプロットを Fig. 10 にて示す。2つの正解クラック間にあるいくつかの格子点においても平面要素が表示されているが、特に正解に近い位置の点で大きく表示されていることがわかる。

クラックの候補の配置と各候補クラックの存在を仮定した場合の目的汎関数の値をそれぞれ Fig. 11、Fig. 12、Table 2 にて示す。Fig. 11、Fig. 12 に示すようにクラックの候補を  $\Gamma_1$ 、 $\Gamma_2$ 、 $\Gamma_3$ 、 $\Gamma_4$ 、 $\Gamma_5$  と名付ける。Fig. 11、Fig. 12 から分かるように、2つの正解クラック間の格子点では候補となるクラックは発生しなかった。Table 2 より、目的関数を小さくする候補クラックの組  $\Gamma_1$ 、 $\Gamma_4$  を選び出し、手順 3 でのクラックの延長操作を行う。手順 3 の繰り返しにおいて、14 ステップ以降は目的関数が大きくなったため、14 個の要素を付け加えたクラック形状を推定クラックとする。Fig. 13、Fig. 14 で示す通り、大きさの異なる複数のクラックに対しても十分な精度でクラックの個数とそれぞれのクラックの正しい配置と向きを決定できている。しかし、数値例 1 と同様、クラックのサイズと形状の決定は十分とは言えない結果となった。

## 5. 結論

3次元領域におけるクラック波動散乱問題においてトポロジー導関数を用いたクラック決定解析を行なった。クラックの個数を未知とするような先験情報の少ないクラック決定解析に対しても定性的ではあるが十分な精度でその位置と向きを決定することができた。クラックの向きや位置の結成精度の定量評価は今後の課題である。しかし、Fig. 4 や Fig. 10 で示した平面要素を取り囲む領域の中にクラックが存在するとした Bonnet らの大域的な決定解析に比べて、クラック

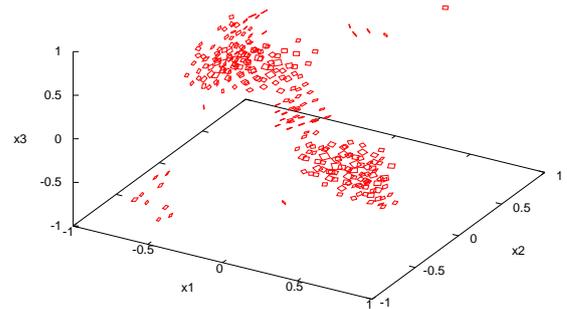


Fig. 10 手順 1 でのトポロジー導関数の計算結果

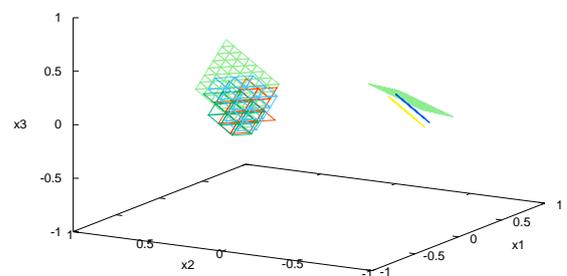


Fig. 11 候補クラック  $\Gamma_1$ (青),  $\Gamma_2$ (黄),  $\Gamma_3$ (赤),  $\Gamma_4$ (水),  $\Gamma_5$ (緑) と正解のクラック (黄緑) との位置関係

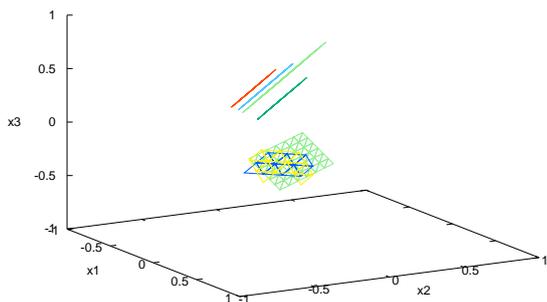


Fig. 12 候補クラック  $\Gamma_1$ (青),  $\Gamma_2$ (黄),  $\Gamma_3$ (赤),  $\Gamma_4$ (水),  $\Gamma_5$ (緑) と正解のクラック (黄緑) との位置関係 [別視点]

Table 2 各クラック候補に対する目的汎関数の値

存在を仮定するクラック	目的汎関数の値
なし	$4.921 \times 10^{-6}$
$\Gamma_1$	$4.177 \times 10^{-6}$
$\Gamma_2$	$4.438 \times 10^{-6}$
$\Gamma_3$	$4.668 \times 10^{-6}$
$\Gamma_4$	$4.069 \times 10^{-6}$
$\Gamma_5$	$5.140 \times 10^{-6}$
$\Gamma_1, \Gamma_4$	$3.340 \times 10^{-6}$
$\Gamma_2, \Gamma_4$	$3.667 \times 10^{-6}$
$\Gamma_3, \Gamma_4$	$4.204 \times 10^{-6}$
$\Gamma_4, \Gamma_5$	—
$\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_4$	$3.356 \times 10^{-6}$

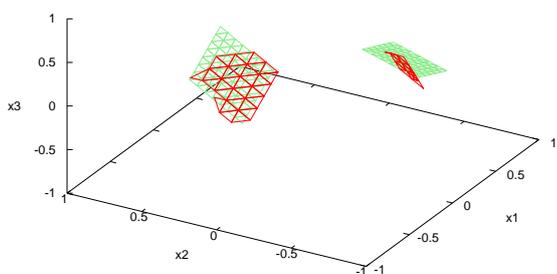


Fig. 13 要素延長後のクラック (赤) と正解のクラック (黄緑)

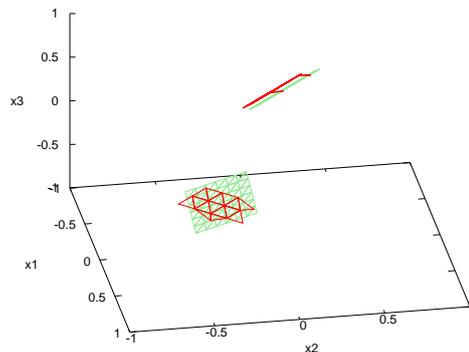


Fig. 14 要素延長後のクラック (赤) と正解のクラック (黄緑)[別視点]

ク位置の決定精度はかなり向上していると言えよう。

また、数値例2のように、大きさの異なる複数のクラックを対象とした場合でも、本手法が有用であると確認できた。しかし、クラックのサイズや形状の決定の精度は十分とは言えない結果となった。

今回行った数値解析例では、平行四辺形のクラックの決定を試みた。波動散乱を考えた場合、平行四辺形の頂点付近で散乱される波動成分は、平行四辺形の中央部分で散乱される波動成分よりも少ない。このため、計測データには頂点部分の情報あまり含まれていない。このことが原因で、クラックのサイズと形状の決定精度が悪くなったと思われる。よりクラック端の情報に着目したクラック決定手法の導入などが今後の課題として挙げられる。また、3節で示したクラック決定手順におけるパラメータの決め方という点にも課題が残る。本研究では、手順2での候補となるクラックに許容するメッシュ連結数の下限や隣接するメッシュ間の角度など、多くの閾値を設定している。これらの値はある程度天下りの決めており、閾値次第では意図しない結果となる可能性を捨てきれない。数学的な根拠に基づいたパラメータの設定が必要になるだろう。

## 参考文献

- (1) 廣瀬 壮一: 定量的超音波非破壊評価とその周辺技術, 応用力学論文集, Vol. 7, pp. 3-12, 2004.
- (2) J.D. Achenbach: Quantitative nondestructive evaluation, Int. J. Solids and Structures, Vol. 37, pp. 13-27, 2000.
- (3) 吉川 仁, 寺沢 龍: 3次元スカラー波動問題における時間域境界積分方程式法を用いたトポロジー最適化による散乱体決定解析, 土木学会論文集 A2(応用力学), Vol. 71, No. 2, pp. I.71-I.78, 2015.
- (4) M. Bonnet: Topological sensitivity for 3D elastodynamic and acoustic inverse scattering in the time do-

main, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 195, No. 45, pp. 2876-2891, 2006.

- (5) C. Bellis, M. Bonnet: Crack identification by 3D time-domain elastic or acoustic topological sensitivity, C.R.Mecanique, Vol. 337, pp.124-130, 2009.
- (6) 服部潤也, 吉川仁: 2次元散乱波動場におけるトポロジー導関数を用いた様々なクラックの決定解析, 土木学会論文集 A2(応用力学), Vol. 73, No. 2, pp. L255-L262, 2017.



## 均質化解析によるノンレシプロカルゲルの引張・圧縮非対称性評価

TENSION-COMPRESSION ASYMMETRY EVALUATION OF A NONRECIPROCAL GEL BY  
HOMOGENIZATION ANALYSIS布施 卓馬<sup>1)</sup>, 松原 成志朗<sup>2)</sup>, 永島 壮<sup>3)</sup>, 奥村 大<sup>4)</sup>

Takuma FUSE, Seishiro MATSUBARA, So NAGASHIMA and Dai OKUMURA

- 1) 名古屋大学大学院工学研究科 (〒464-8603 名古屋市千種区, E-mail: fuse.takuma.b8@s.mail.nagoya-u.ac.jp)
- 2) 名古屋大学大学院工学研究科 (〒464-8603 名古屋市千種区, E-mail: seishiro.matsubara@mac.nagoya-u.ac.jp)
- 3) 名古屋大学大学院工学研究科 (〒464-8603 名古屋市千種区, E-mail: so.nagashima@mac.nagoya-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, E-mail: dai.okumura@mac.nagoya-u.ac.jp)

A nonreciprocal gel consisting of hydrogel and nanosheet exhibits mechanical nonreciprocity, which has potential applications in mechanical engineering. An earlier study has revealed that this mechanical nonreciprocity is triggered by the tension-compression asymmetry resulting from the microscopic buckling behavior of nanosheets during compressive deformation, but the relevant influencing factors remain unknown. In this study, we investigate the microscopic buckling behavior and the resultant tension-compression asymmetry in a nonreciprocal gel subjected to uniaxial conditions. Eigenvalue buckling and post-buckling analyses equipped with computational homogenization are performed on a unit cell modeled as an elastic bilayer for which ratios of Young's modulus and thickness are parameterized. The results confirm that selecting a dilute microscopic buckling with the characteristic wavelength or a non-dilute microscopic buckling with the infinite wavelength hinges on the ratios of Young's modulus and thickness, which is consistent with the theoretical solution for the buckling behavior of a layered composite. We also elucidate that the tension-compression asymmetry is more pronounced as the Young's modulus ratio increases or the thickness ratio decreases.

**Key Words:** Nonreciprocity, Buckling, Gels, Composites, Homogenization

## 1. 緒 言

近年, 負荷方向に依存してノンレシプロカルな力学挙動を示す材料が注目されている<sup>(1)</sup>. これらは力学的エネルギーの伝達制御や変換が可能であり, 特定方向への物質輸送といった非対称システムの開発を促進させると期待されている. ノンレシプロカルな力学挙動を示す材料として, これまでに長方形フレームを基本単位とするフィッシュボーン構造<sup>(2-4)</sup>やマイクロロボットをはりで接続したメタマテリアル<sup>(5,6)</sup>が開発されている. しかし, これらは所望のノンレシプロカル性に応じて緻密な微視的(マイクロ)構造の設計を必要とし, 実用に供する段階には至っていない.

Liu ら<sup>(7)</sup>は, ハイドロゲル中でナノシートを磁気配向させることで, 所望の方向にノンレシプロカルな力学挙動を発生させることが可能なノンレシプロカルゲル(NRゲル)を開発した. 本材料に特徴的な引張・圧縮非対称性は, 引張と圧縮負荷の方向に依存して弾性率が数十倍異なる性質であり

<sup>(8,9)</sup>, 多様な負荷条件下でノンレシプロカルな力学挙動を発生させる<sup>(10)</sup>.

実験事実として, NRゲルの引張・圧縮非対称性は, ナノシートのマイクロ座屈挙動に起因することが明らかとなっている. 一方で, マイクロ座屈挙動の起点や座屈後のマイクロ構造の変形, さらにはマイクロ座屈挙動を反映した巨視的(マクロ)な力学応答の引張・圧縮非対称性に対する定量化は十分でない. これらを支配する影響因子の解明は, NRゲルの設計自由度をさらに増やし, 実用に展開するために重要である.

複合材料のマイクロ座屈挙動は, 多孔質体を代表例として古くから研究がなされてきた<sup>(11-13)</sup>. マイクロ座屈挙動に対する座屈点や座屈後変形に関する議論は成熟の域に達しているが, 引張・圧縮非対称性の機構理解に重要なマイクロ座屈挙動とマクロな力学応答との関係性については未解明な部分が多い.

そこで本研究では, 単軸負荷条件が課されたNRゲルの周期構造単位(ユニットセル)に対して均質化解析を実施し, マイクロ座屈挙動と引張・圧縮非対称性に関わる影響因子を評価する. ユニットセルはハイドロゲルとナノシートの二層弾

性体としてモデル化し、各構成材料の厚さ比とヤング率比をパラメータとする。ユニットセルの座屈固有値解析では、マイクロ座屈のエネルギー的に優れた波長（優先波長）を評価する。また、得られた優先波長と座屈モードを用いて座屈後解析と均質化を実施し、マクロな力学応答としての引張・圧縮非対称性を評価する。一連の解析を通して、厚さ比とヤング率比に応じて、ユニットセルの全体もしくはナノシートのみが座屈するパターンが選択され、得られた結果は層状複合材料を対象とした理論解<sup>(14)</sup>と良好に一致することを示す。また、厚さ比が小さく、ヤング率比が大きいほど、NRゲルの引張・圧縮非対称性が顕著になることも示す。

## 2. 解析方法

厚さ  $H_g$  のハイドロゲルに厚さ  $H_s$  のナノシートが埋め込まれた NRゲルのユニットセルを Fig.1 に示す。実際の NRゲルは複数の短いナノシートが一定の間隔で整列するマイクロ構造を有しているが、本研究では簡単に面内寸法が NRゲルと同じである一枚のナノシートが層状に配置されるマイクロ構造を仮定する。水平方向の寸法  $L$  はマイクロ座屈挙動によるリクルパターンが1波長分だけ生じるように設定し、以後、波長と呼称する。また、ハイドロゲルとナノシートの材料挙動は、それぞれ微圧縮 neo-Hookean 超弾性体（ヤング率:  $E_g$ , ポアソン比:  $\nu_g=0.49$ ）と線形弾性体（ヤング率:  $E_s$ , ポアソン比:  $\nu_s=0.4$ ）に従うと仮定する。

NRゲルのユニットセルに対する均質化解析は、汎用有限要素解析ソフトウェア ABAQUS<sup>(15-17)</sup>を用いて実施する。Fig.2 にユニットセルの解析モデルと境界条件を示す。解析モデルのハイドロゲルとナノシートは、それぞれ4節点低減積分平面ひずみハイブリッド要素（CPE4RH）と4節点平面ひずみ要素（CPE4）を用いて離散化する。解析モデルには周期境界条件を課し、マクロな単軸荷重は解析モデル境界面上の節点群と多点拘束で結ばれた外部節点の節点荷重もしくは節点変位を制御することによって考慮する。後者の場合では、マクロひずみ  $\varepsilon$  を入力として、 $L$  との積を外部節点への強制変位として作用する。また、マクロ応力  $\sigma$  は、外部節点の反力をユニットセル境界面の面積で除して求める。これらの方法は、マクロ物理量をマイクロ物理量の体積平均によって算出する操作に等価であり、均質化理論に厳密に整合する。最後に、均質化法における許容条件として、解析モデル左下

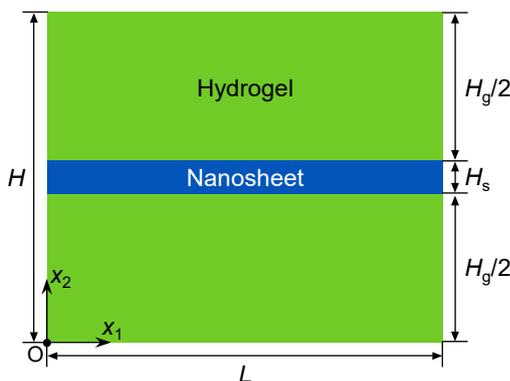


Fig.1 Unit cell of a NR gel.

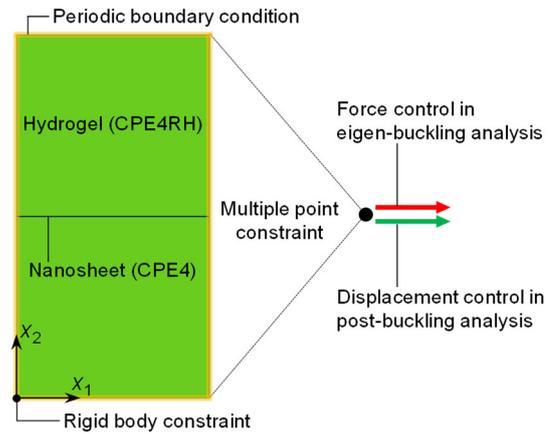


Fig.2 Numerical model of a unit cell with boundary condition. Macroscopic force and displacement are applied to the numerical model via an external node (black marker) connected with the boundary surfaces of the numerical model by multiple point constraint.

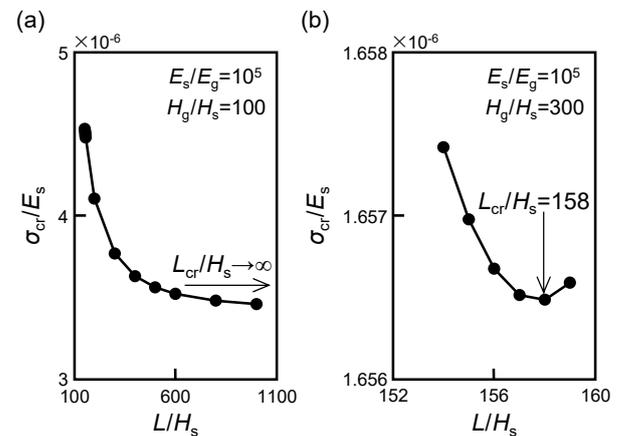


Fig.3 Normalized buckling stress,  $\sigma_{cr}/E_s$ , as a function of the normalized wavelength,  $L/H_s$ , in the cases of (a)  $E_s/E_g=10^5$ ,  $H_g/H_s=100$  and (b)  $E_s/E_g=10^5$ ,  $H_g/H_s=300$ . While the priority wavelength,  $L_{cr}/H_s$ , is undetermined in the case (a),  $L_{cr}/H_s$  has the characteristic value of 158 in the case (b).

の節点を完全拘束して剛体運動を拘束する。

計算結果の無次元化は、寸法については  $H_s$  を用い、応力については  $E_s$  を用いる。また、ヤング率比と厚さ比をそれぞれ  $E_s/E_g=10^3\sim 10^6$ ,  $H_g/H_s=10^2\sim 10^3$  の範囲で設定し、これらがマイクロ座屈挙動や引張・圧縮非対称性に及ぼす影響をパラメトリックに調査する。

ユニットセルの座屈点と座屈モードを求めるために座屈固有値解析を実施する。本解析では、外部節点の節点荷重を制御しながら座屈点を探索する。また、波長  $L$  をパラメトリックに変化させて各々の  $E_s/E_g$  と  $H_g/H_s$  の組み合わせに対応する座屈応力  $\sigma_{cr}$  を求め、最小の  $\sigma_{cr}$  に対応する優先波長  $L_{cr}$  を探索する。Fig.3 に、 $E_s/E_g=10^5$ ,  $H_g/H_s=100$  の場合（図中(a)）と  $E_s/E_g=10^5$ ,  $H_g/H_s=300$  の場合（図中(b)）に対する  $\sigma_{cr}/E_s$  と  $L/H_s$  の関係を示す。前者では、 $\sigma_{cr}/E_s$  が  $L/H_s$  に対して単調減

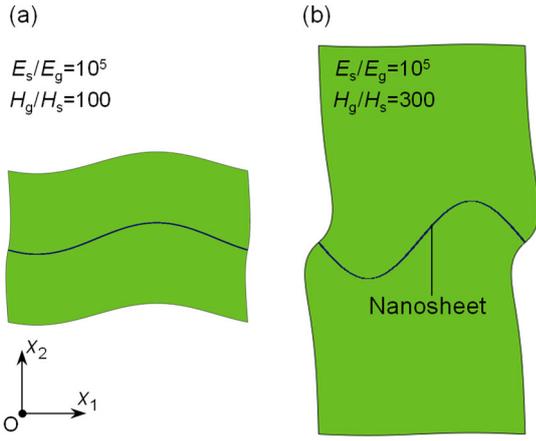


Fig.4 Deformed configurations of buckled unit cells in the cases of (a)  $E_s/E_g=10^5$ ,  $H_g/H_s=100$  (Non-dilute system) and (b)  $E_s/E_g=10^5$ ,  $H_g/H_s=300$  (Dilute system). The global buckling pattern emerges in the non-dilute system, whereas the nanosheet is only buckled in the dilute system.

少であり、正規化優先波長  $L_{cr}/H_s$  が無限長となる一方で、後者では、 $\sigma_{cr}/E_s$  が最小値をとる  $L/H_s=158$  が優先波長となる。

Fig.4 に示すように、対応する座屈モードは、それぞれユニットセル全体の座屈 (図中(a)) とナノシートのみの座屈 (図中(b)) を表現し、本研究では前者を非希薄系、後者を希薄系のマイクロ座屈挙動として分類する。

座屈固有値解析で得られた座屈モードと  $L_{cr}$  を用いて座屈後解析を実施する。具体的には、水平方向寸法  $L_{cr}$  のユニットセルに座屈モードを初期不整として与えた後、外部節点に強制変位を作用させる計算を実施する。そして、得られたマクロ応力・ひずみ関係から NR ゲルの引張・圧縮非対称性を評価する。

### 3. 座屈固有値解析の結果

様々なヤング率比  $E_s/E_g$  と厚さ比  $H_g/H_s$  の組み合わせについて座屈固有値解析を実施し、得られた結果を用いてマイクロ座屈挙動を希薄系と非希薄系に分類したものを Fig.5 に示す。ここで、図中青色の境界線は、理論式

$$\frac{H_g}{H_s} = \frac{1 - \nu_f^*}{\nu_f^*} \quad (1)$$

$$\nu_f^* = \frac{1}{2(1 + \nu_g)} \left\{ \frac{(1 + \nu_g)(3 - 4\nu_g)}{3(1 - \nu_g)} \right\}^{\frac{2}{3}} \left( \frac{E_s}{E_g} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (2)$$

で表される  $H_g/H_s$  と  $E_s/E_g$  の関係をプロットしたものであり、マイクロ座屈挙動を希薄系 (図中水色) と非希薄系 (図中橙色) に分類する<sup>(14)</sup>。式(1), (2)は、ハイドロゲルのポアソン比  $\nu_g$  に依存し、 $E_s/E_g$  が小さい、もしくは  $H_g/H_s$  が大きいほどマイクロ座屈挙動が希薄系になりやすいことを示している。

Fig.5 より、数値的に求めたマイクロ座屈挙動の分類は、理論式を用いた分類と概ね一致した。本理論式は微小変形の仮定の下で Euler-Bernoulli はり理論に基づき導出されたものであ

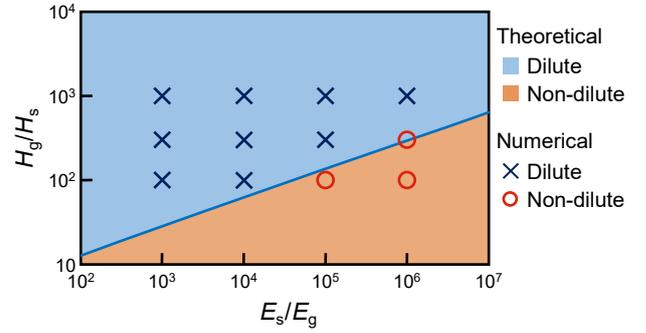


Fig.5 Classification of microscopic buckling into dilute and non-dilute systems for each combination of Young's modulus ratio,  $E_s/E_g$ , and thickness ratio,  $H_g/H_s$ . The blue line indicates the theoretically predicted boundary between dilute and non-dilute systems using Eqs. (1), (2). Numerical results are in good agreement with the theoretical prediction except for the case of  $E_s/E_g=10^6$ ,  $H_g/H_s=300$ .

るが、構造力学的な仮定をしない超弾性体についても幅広い  $E_s/E_g$  と  $H_g/H_s$  の範囲で理論解と整合する結果が得られることがわかった。しかし、 $E_s/E_g=10^6$ ,  $H_g/H_s=300$  の組み合わせについては異なる結果となった。これは、本パラメータセットが境界線近傍の値であり、先に挙げた基盤理論の違いが座屈モードや  $L_{cr}$  の評価に差を生み、結果としてマイクロ座屈挙動の判定に影響を及ぼしたことが原因であると考えられる。

次に、希薄系のマイクロ座屈挙動について、ユニットセルの優先波長  $L_{cr}$  の計算結果と理論解を比較する。Fig.6 に、3種の  $H_g/H_s$  に対する正規化優先波長  $L_{cr}/H_s$  と  $E_s/E_g$  の関係を示す。ここで、図中黒色の破線は、次式で示される  $E_s/E_g$  が十分に大きい場合における  $L_{cr}$  の理論式<sup>(14)</sup>をプロットしたものである。

$$\frac{L_{cr}}{H_s} = \pi \left\{ \frac{(1 + \nu_g)(3 - 4\nu_g)}{3(1 - \nu_g)} \frac{E_s}{E_g} \right\}^{\frac{1}{3}} \quad (3)$$

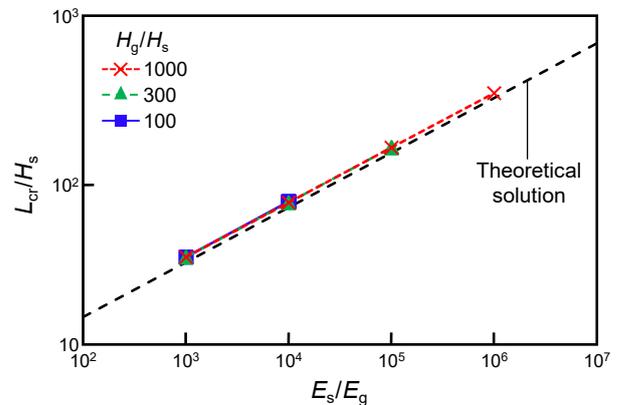


Fig.6 Comparison of priority wavelength,  $L_{cr}/H_s$ , of a unit cell in the dilute system between theoretical solution and numerical results for each combination of Young's modulus ratio,  $E_s/E_g$ , and thickness ratio,  $H_g/H_s$ . Numerical results are in good agreement with the theoretical solution.

座屈固有値解析を通して得られた優先波長は、理論式と良く一致することがわかる。特に、本解析結果は、式(3)で示される  $L_{cr}/H_s$  が  $H_g/H_s$  に無関係に決定することも正しく予測できている。以上の結果より、 $L_{cr}$  についても幅広い  $E_s/E_g$  と  $H_g/H_s$  の範囲で理論解と整合する結果が得られることがわかった。

最後に、希薄系のマイクロ座屈挙動について、座屈ひずみ  $\epsilon_{cr}$  の計算結果と理論解を比較する。計算では、マクロ応力・ひずみ関係に線形性が認められる引張ひずみ  $\epsilon=0.01\%$  をユニットセルに作用し、得られたマクロ応力を  $\epsilon$  で除することでマクロなヤング率を計算する。そして、座屈固有値解析を通して得られた座屈応力  $\sigma_{cr}$  をマクロなヤング率で除することで  $\epsilon_{cr}$  を求める。一方、ヤング率比  $E_s/E_g$  が十分に大きいとする仮定の下で、 $\epsilon_{cr}$  の理論式<sup>(4)</sup>は次式で表される。

$$\epsilon_{cr} = \left\{ \frac{(1 + \nu_g)(3 - 4\nu_g) E_s}{3(1 - \nu_g) E_g} \right\}^{-\frac{2}{3}} \quad (4)$$

本式は、ハイドロゲルのポアソン比  $\nu_g$  に依存し、 $E_s/E_g$  が大きいほど、 $\epsilon_{cr}$  が小さくなることを示している。

上述の手順で計算した  $\epsilon_{cr}$  と理論解との比較を Fig.7 に示す。計算で求めた  $\epsilon_{cr}$  は、幅広い  $E_s/E_g$  について理論解と良く一致している。特に、式(4)で示される  $\epsilon_{cr}$  が厚さ比  $H_g/H_s$  に無関係であることも正しく評価できている。この結果は、本研究で実施した座屈固有値解析が正しく座屈点を評価することを示すものであり、先に比較したマイクロ座屈挙動の分類や優先波長の結果とあわせて、座屈固有値解析は正しく実施されていることが示された。

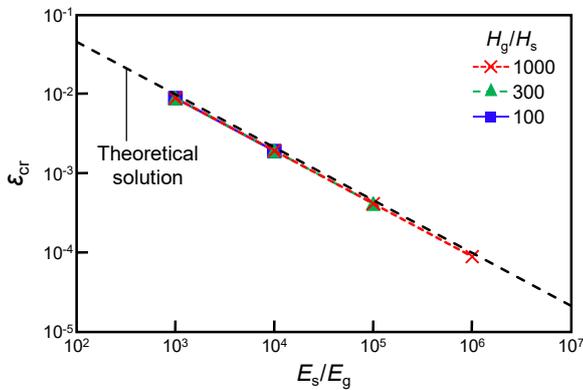


Fig.7 Comparison of buckling strain,  $\epsilon_{cr}$ , of a unit cell in the dilute system between theoretical solution and numerical results for each combination of Young's modulus ratio,  $E_s/E_g$ , and thickness ratio,  $H_g/H_s$ . Numerical results are in good agreement with the theoretical solution.

#### 4. 座屈後解析の結果

Fig.8 に、マイクロ座屈挙動が非希薄系となる場合について、それぞれ大きさ  $|\epsilon| = (0.1, 0.2)$  の圧縮ひずみ (図中(a)) と引張ひずみ (図中(b)) を作用したときのユニットセルの変形と水平方向のマイクロひずみ成分  $\epsilon_{mic}$  の分布を示す。ユニットセルは圧縮負荷を受けて全体が座屈して正弦波状に変形した後、正弦波の振幅が大きくなるように変形が進展することが確

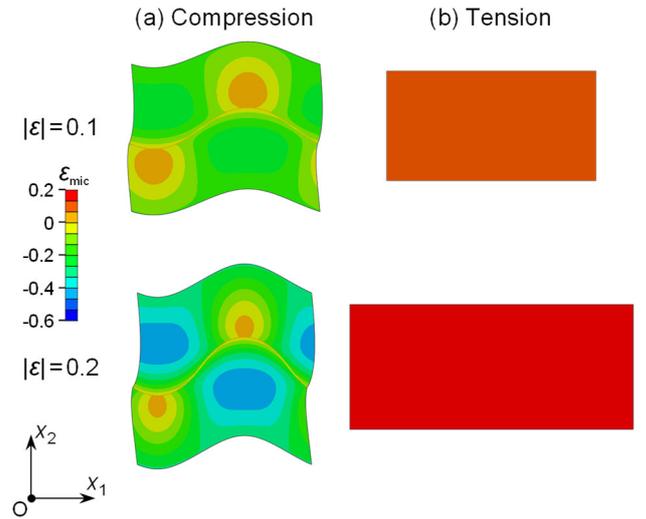


Fig.8 Deformed configurations with the distributions of the microscopic horizontal axial strain,  $\epsilon_{mic}$ , for the unit cells with the wavelength,  $L=158$ , subjected to (a) compressive and (b) tensile axial macroscopic strains,  $|\epsilon|=(0.1,0.2)$ , in the non-dilute system.

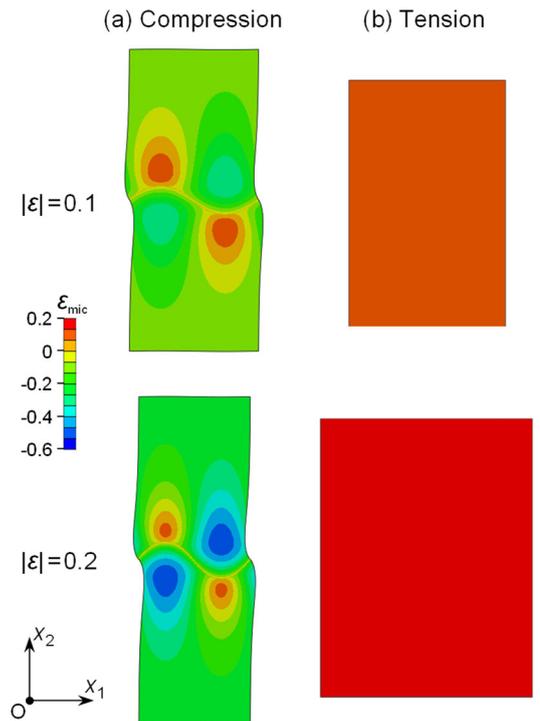


Fig.9 Deformed configurations with the distributions of the microscopic horizontal axial strain,  $\epsilon_{mic}$ , for the unit cells subjected to (a) compressive and (b) tensile axial macroscopic strains,  $|\epsilon|=(0.1,0.2)$ , in the dilute system.

認できる。一方で、引張負荷に対してユニットセルは座屈せず、一樣な変形状態を保持することがわかる。このような圧縮負荷と引張負荷に対するマイクロ座屈挙動の発生有無がマクロ応力に反映されて引張・圧縮非対称性として表れる。ここで、Fig.8 に示すユニットセルの波長は  $L=158$  に設定した

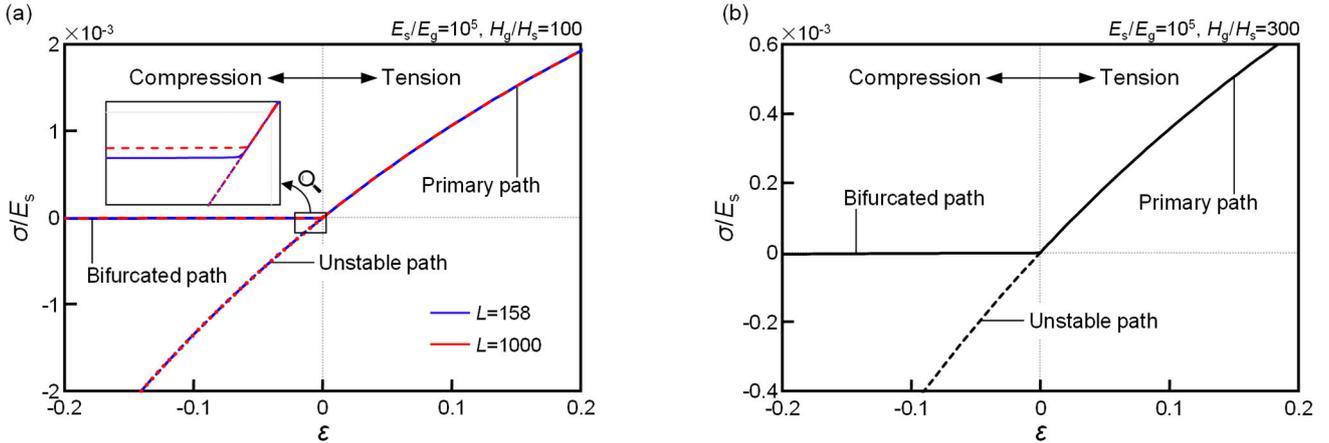


Fig.10 Normalized macroscopic axial stress,  $\sigma/E_s$ , as a function of the macroscopic axial strain,  $\epsilon$ , for the cases of (a)  $E_s/E_g=10^5$ ,  $H_g/H_s=100$ ,  $L/H_s=(158, 1000)$  in the non-dilute system and (b)  $E_s/E_g=10^5$ ,  $H_g/H_s=300$ ,  $L/H_s=158$  in the dilute system. The inset in the figure (a) shows the relationship between  $\sigma/E_s$  and  $\epsilon$  in the vicinity of buckling points. Due to the microscopic buckling of a unit cell,  $\sigma/E_s$  takes a small value on the bifurcated path, leading to the emergence of the tension-compression asymmetry of a NR gel.

が、非希薄系では優先波長が無窮大であるため、対応する座屈応力はこの波長で収束しないことに注意する。

Fig.9に、マイクロ座屈挙動が希薄系となる場合について、それぞれ大きさ $|\epsilon|=(0.1, 0.2)$ の圧縮ひずみ(図中(a))と引張ひずみ(図中(b))を作用したときのユニットセルの変形と水平方向のマイクロひずみ成分 $\epsilon_{mic}$ の分布を示す。希薄系についても、圧縮負荷に対してユニットセルが座屈し、正弦波状の変形が進展する一方で、引張負荷に対しては座屈せずに一般的な変形状態が保持される。非希薄系と希薄系の相違点は、ユニットセル全体が座屈するか、ナノシートのみが座屈するかであり、座屈後の負荷が進展するほどユニットセルの変形形状に強く現れる。

Figs.8, 9のマイクロな力学挙動を反映したマクロ応力・ひずみ関係をFig.10に示す。ここで、図中(a), (b)は、それぞれ非希薄系と希薄系についての結果を示している。引張負荷に対してユニットセルは座屈しないため、対応するマクロ応力は主経路上の値を取ることがわかる。一方、圧縮負荷に対してマクロ応力は、最初、主経路上の値をとるものの、座屈点を越えるとユニットセルが不安定となり、不整によって分岐経路上に遷移した後は、ほぼ無応力状態を保ち続ける。また、非希薄系と希薄系のマクロ応力は、主経路・分岐経路に関わらず同様の軌跡を描き、両者ともに引張・圧縮非対称性が明確であることがわかる。

一方で、主経路上では非希薄系のマクロ応力は希薄系のマクロ応力の約3倍となった。これは、設定した $H_g/H_s$ が希薄系と非希薄系で3倍異なることを反映したものである。 $H_g/H_s$ が大きいほど、ナノシートの体積分率は小さく、マイクロ座屈挙動は希薄系に分類される傾向にあるため、主経路上のマクロ応力は非希薄系の方が大きな値を取り得ると考えられる。

Fig.10(a)の差し込み図に示す非希薄系のマクロ応力に着目すると、分岐経路上のマクロ応力は、波長 $L$ が大きくなるほど小さな値を取ることがわかる。これは、非希薄系の場合では優先波長 $L_{cr}$ が求まらず、波長 $L$ に対して座屈応力 $\sigma_{cr}$ が単

調減少することが原因である。そのため、非希薄系の場合では、マクロな力学応答の引張・圧縮非対称性も波長 $L$ に対して収束せず、定量的な評価ができない。

そこで本研究では、マイクロ座屈挙動が希薄系となる場合について、引張・圧縮非対称性を定量的に評価する。定量評価に際して、それぞれ大きさ $|\epsilon|=(0.1, 0.2)$ の圧縮ひずみと引張ひずみに対する応答マクロ応力の傾きからヤング率を計算する。引張方向のヤング率を $K_T$ 、圧縮方向のヤング率を $K_C$ とし、これらの比 $K_T/K_C$ を引張・圧縮非対称性の定量指標とする。

厚さ比 $H_g/H_s$ に対して、ひずみ $|\epsilon|=(0.1, 0.2)$ について $K_T/K_C$ をヤング率比 $E_s/E_g$ の関数としてプロットした結果をFig.11に示す。まず、 $E_s/E_g$ と $H_g/H_s$ に関わらず、 $K_T/K_C$ は $\epsilon$ が大き

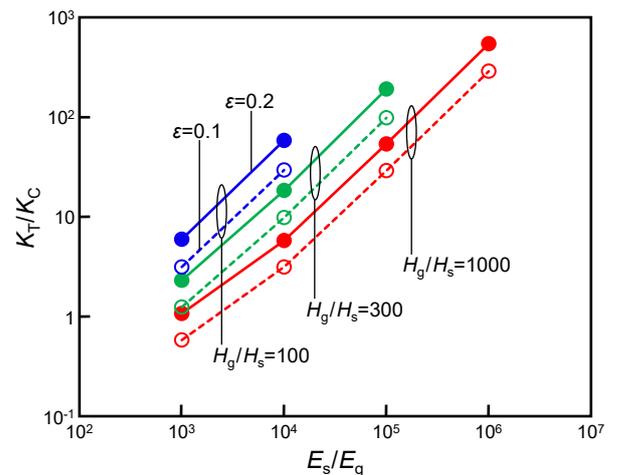


Fig.11 Quantification of the tension-compression asymmetry by the ratio between instantaneous Young's moduli,  $K_T$  and  $K_C$ , of a unit-cell in the dilute system subjected to macroscopic tensile and compressive axial strains,  $|\epsilon|=(0.1, 0.2)$ ,  $K_T/K_C$ , for each combination of Young's modulus ratio,  $E_s/E_g$ , and thickness ratio,  $H_g/H_s$ .

くなるにつれて大きな値を取る。このため、NR ゲルに作用する負荷が大きいほど、引張・圧縮非対称性は顕著になることがわかる。

また、 $K_T/K_C$ は $E_s/E_g$ と $H_g/H_s$ に依存し、 $E_s/E_g$ が大きい、もしくは $H_g/H_s$ が小さいほど、引張・圧縮非対称性が顕著になることがわかる。これは、引張方向のマクロ応力が同様の傾向を有することに起因する。NR ゲルは、 $E_s/E_g$ が十分に大きな値をとるため、引張方向のマクロ応力の主要因はナノシートから発生するマイクロ応力である。 $E_s/E_g$ の増加は、ナノシートの剛性の増加を意味し、 $H_g/H_s$ の減少は、ナノシートの体積分率の増加をもたらす。したがって、これらの要因により、引張方向のヤング率 $K_T$ は、より大きな値を取ることであり、結果として引張・圧縮非対称性が顕著になる。

## 5. 結 言

本研究では、単軸負荷条件が課されたNR ゲルのユニットセルに対して均質化解析を実施し、マイクロ座屈挙動と引張・圧縮非対称性に関わる影響因子を評価した。座屈固有値解析では座屈応力と優先波長を求め、マイクロ座屈挙動をユニットセル全体が座屈する非希薄系とナノシートのみが座屈する希薄系に分類した。得られた結果は、層状複合材料を対象とする理論解と整合し、本研究で実施した座屈固有値解析は、NR ゲルのマイクロ座屈挙動を正しく評価することがわかった。

続いて、座屈モードと優先波長を入力とする座屈後解析と均質化を実施して、NR ゲルのマクロ応力・ひずみ関係を求めた。非希薄系・希薄系に関わらず、引張・圧縮負荷に対するマイクロ座屈挙動の有無に呼応してマクロ応力・ひずみ関係に明確な引張・圧縮非対称性が現れることがわかった。また、希薄系について、ひずみ $|\epsilon|=(0.1, 0.2)$ の変形状態における瞬間的なヤング率の比を指標として引張・圧縮非対称性を定量的に評価した。NR ゲルが高負荷の状態、または構成材料の厚さ比 $H_g/H_s$ が小さく、ヤング率比 $E_s/E_g$ が大きいほど、引張・圧縮非対称性が顕著になることがわかった。

本研究で得られた成果は、所望の引張・圧縮非対称性を有するNR ゲルを作製するうえで有用な情報を提供し、NR ゲルの工学的な応用展開を促進するものである。今後は、実測値との比較・検討を交えながら解析手法を洗練することで、さらに信頼性のあるNR ゲルの設計支援技術の確立が期待される。

## 謝 辞

本研究は、JST、CREST (JPMJCR22B1) の支援を受けたものである。ここに記して謝意を表する。

## 参考文献

- (1) B. Sun, S.H. Kang: A mechanically one-way material, *Science*, **380**(2023), p.135.
- (2) C. Coulais, D. Sounas, A. Alu: Static non-reciprocity in mechanical metamaterials, *Nature*, **542**(2017), pp.461–464.
- (3) M. Shaat: Nonreciprocal elasticity and the realization of static and dynamic nonreciprocity, *Scientific Reports*, **10**(2020), 21676.

- (4) M. Shaat, M.A. Moubarez, M.O. Khan, M.A. Khan, A. Alzo'ubi: Metamaterials with Giant and Tailorable Nonreciprocal Elastic Moduli, *Physical Review Applied*, **14**(2020), 014005.
- (5) M. Brandenbourger, X. Locsin, E. Lemer, C. Coulais: Non-reciprocal robotic metamaterials, *Nature Communications*, **10**(2019), 4608.
- (6) G. Librandi, E. Tubaldi, K. Bertoldi: Programming nonreciprocity and reversibility in multistable mechanical metamaterials, *Nature Communications*, **12**(2021), 3454.
- (7) M. Liu, Y. Ishida, Y. Ebina, T. Sasaki, T. Hikima, M. Takata, T. Aida: An anisotropic hydrogel with electrostatic repulsion between cofacially aligned nanosheets, *Nature*, **517**(2015), pp.68–72.
- (8) K. Sano, Y. Ishida, T. Aida: Synthesis of anisotropic hydrogels and their applications, *Angewandte Chemie International Edition*, **57**(2018), pp.2532–2543.
- (9) K. Sano, Y.O. Arazoe, Y. Ishida, Y. Ebina, M. Osada, T. Sasaki, T. Hikima, T. Aida: Extra-large mechanical anisotropy of a hydrogel with maximized electrostatic repulsion between cofacially aligned 2D electrolytes, *Angewandte Chemie International Edition*, **57**(2018), pp.12508–12513.
- (10) X. Wang, Z. Li, S. Wang, K. Sano, Z. Sun, Z. Shao, A. Takeishi, S. Matsubara, D. Okumura, N. Sakai, T. Sasaki, T. Aida, Y. Ishida: Mechanical nonreciprocity in a uniform composite material, *Science*, **380**(2023), pp.192–198.
- (11) N. Ohno, D. Okumura, H. Noguchi: Microscopic symmetric bifurcation condition of cellular solids based on a homogenization theory of finite deformation, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **50**(2002), pp.1125–1153.
- (12) D. Okumura, N. Ohno, H. Noguchi: Post-buckling analysis of elastic honeycombs subject to in-plane biaxial compression, *International Journal of Solids and Structures*, **39**(2002), pp.3487–3503.
- (13) D. Okumura, N. Ohno, H. Noguchi: Elastoplastic microscopic bifurcation and post-bifurcation behavior of periodic cellular solids, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **52**(2004), pp.641–666.
- (14) R. Parnes, A. Chiskis: Buckling of nano-fibre reinforced composites: a re-examination of elastic buckling, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **50**(2002), pp.855–879.
- (15) Abaqus 6.14 User Documentation, Dassault Systems SIMULIA Corporation, (2014).
- (16) D. Okumura, J. Sugiura, H. Tanaka, Y. Shibutani: Buckling and postbuckling of etching-induced wiggling in a bilayer structure with intrinsic compressive stress, *International Journal of Mechanical Sciences*, **141**(2018), pp.78–88.
- (17) S. Kikuchi, S. Matsubara, S. Nagashima, D. Okumura: Diversity of the bifurcations and deformations on films bonded to soft substrates: Robustness of the herringbone pattern and its cognate patterns, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **159**(2022), 104757.

## クリースの発達過程に対する影響因子の調査

## INVESTIGATION OF INFLUENCING FACTORS ON THE PROCESS OF CREASE EVOLUTION

石田 竜也<sup>1)</sup>, 永島 壮<sup>2)</sup>, 松原 成志朗<sup>3)</sup>, 奥村 大<sup>4)</sup>

Tatsuya ISHIDA, So NAGASHIMA, Seishiro MATSUBARA and Dai OKUMURA

- 1) 名古屋大学大学院工学研究科 (〒464-8603 名古屋市千種区, E-mail: ishida.tatsuya.f0@s.mail.nagoya-u.ac.jp)
- 2) 名古屋大学大学院工学研究科 (〒464-8603 名古屋市千種区, E-mail: so.nagashima@mac.nagoya-u.ac.jp)
- 3) 名古屋大学大学院工学研究科 (〒464-8603 名古屋市千種区, E-mail: seishiro.matsubara@mac.nagoya-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, E-mail: dai.okumura@mac.nagoya-u.ac.jp)

We study the evolution of crease in an elastomer under three different loading conditions. Two-dimensional finite element analysis is performed by combining a non-linear perturbation approach to find a bifurcation solution for the flat surface in a metastable state. A generalized plane strain element is used to impose plane strain, uniaxial, and equibiaxial conditions on the elastomer. The solution is the deformation path for crease evolution, and the path ends at the critical strain for creasing  $\epsilon_C$ . The depth and self-contact length of the creases, which are indicators of crease evolution, are described as functions of powers with constants and scaling exponents, which are expressed as linear functions of the crease interval.

**Key Words:** Surface instability, Creasing, Bifurcation, Elastomers, Finite element analysis

## 1. 緒言

弾性材料は、圧縮負荷を受けると表面不安定現象<sup>(1),(2)</sup>を発生し、自由表面にしわを形成する。しわの形態は多様であるが、代表的な形態としてリンクルやクリースが挙げられる。リンクルは、自由表面の法線方向に発生する滑らかな起伏であり、クリースは、自由表面の内側に向かって生じるヒンジ状の折れ曲がりである。いずれも生体器官<sup>(3)</sup>に遍在する自律パターンであることから、リンクルとクリースの発生・発達過程を理解することは、形態形成機構の解明において重要である。

Biot は、圧縮下の非圧縮 neo-Hookean 半無限弾性体に対して、リンクルの発生を予測する分岐理論を構築した<sup>(4),(5)</sup>。そして、平面ひずみ条件下では、リンクル発生ひずみの理論値が  $\epsilon_W = 0.456$  であることを明らかにした。一方、大変形と自己接触を伴うクリースは、従来の分岐座屈理論では同定できない特殊な変形モードであり、その発生・発達過程を説明できる理論は未だ存在しない。そのため、クリースの発生ひずみは、実験値として  $\epsilon_C \approx 0.35$ <sup>(6)</sup> であることが報告されるにとどまり、クリースの発生ひずみがリンクルの発生ひずみを下回る機構は未解明であった。

このような状況の中、Hohlfeld と Mahadevan は、 $\epsilon_C$  と  $\epsilon_W$  の間のひずみ領域において、クリースが発生し得るメタ安定状態が存在することを有限要素解析により示し、クリースへの

分岐経路の存在を明らかにした<sup>(7),(8)</sup>。さらに、Yang らは、非線形摂動法を用い、メタ安定状態で摂動力を導入することにより、所望の圧縮状態でクリースを誘起できることを示した<sup>(9)</sup>。以上のように、クリース発生機構への理解が深まりつつある。その一方で、クリースの発達に着目した研究は少なく、全容解明への期待が高まっている<sup>(10)</sup>。

そこで本研究は、有限要素解析により、クリースの発達過程に対する影響因子を調査することを目的とした。特に、発達過程に及ぼす幾何学条件の影響を調べた。2章では、解析モデルと3つの異なる荷重条件、すなわち、平面ひずみ、単軸、および等二軸条件について説明する。3章では、解析結果を示す。非線形摂動法により、メタ安定状態から分岐解を求め、クリースの発達経路を解析する。4章では、解析結果の評価を行う。クリースの発達を特徴付けるクリース深さと自己接触長さがべき関数で表されることを示す。さらに、べき関数の定数とスケーリング指数がクリース間隔の線形関数であることを示す。最後に5章では結言を述べる。

## 2. 解析方法

有限要素解析は、ABAQUS (Abaqus 6.14 User Documentation, 2014) を用いて行う。弾性体は、非圧縮性の neo-Hookean 超弾性体モデルに従うと仮定する。初期寸法は、幾何学的な欠陥のない高さ  $H$  と長さ  $L$  で表される (Fig. 1(a))。弾性体を等距離のクリースが並ぶ無限構造の最小単位と見なした場合、初期長さは、未変形状態において隣接した2つのクリース間隔

に相当する。無次元化したクリース間隔 $L/H$ をパラメータとし、3.0から5.0の範囲において変化させる。Fig. 1(b)に示すように、クリースの発生は弾性体表面の中心で起こると仮定し、構造全体の右半分を計算領域として選択する。ここで、クリース上面における垂直方向の節点座標の最大値と最小値の差をクリース深さ $\delta$ として定義する。

Fig. 1(c)は、一般化平面ひずみ要素 (CPE4GRH) を用いて分割した計算領域の境界条件と要素を示している<sup>(11)</sup>。上面は拘束せず、下面を鉛直方向に拘束する。クリースが鏡像対称であることを考慮し、左側に摩擦のない剛性壁を配置することにより、クリースの発生・発達に伴う上面の自己接触を模倣する。右側境界に強制変位 $\bar{u}$ を加えることにより、弾性体全体に均一な圧縮ひずみ $\varepsilon_G = -2\bar{u}/L$ が付与される。要素分割数 $N$ は、全要素が $H/N$ の正方形になるように定義される。Fig. 1(c)は、 $N = 20$ の例を示している。

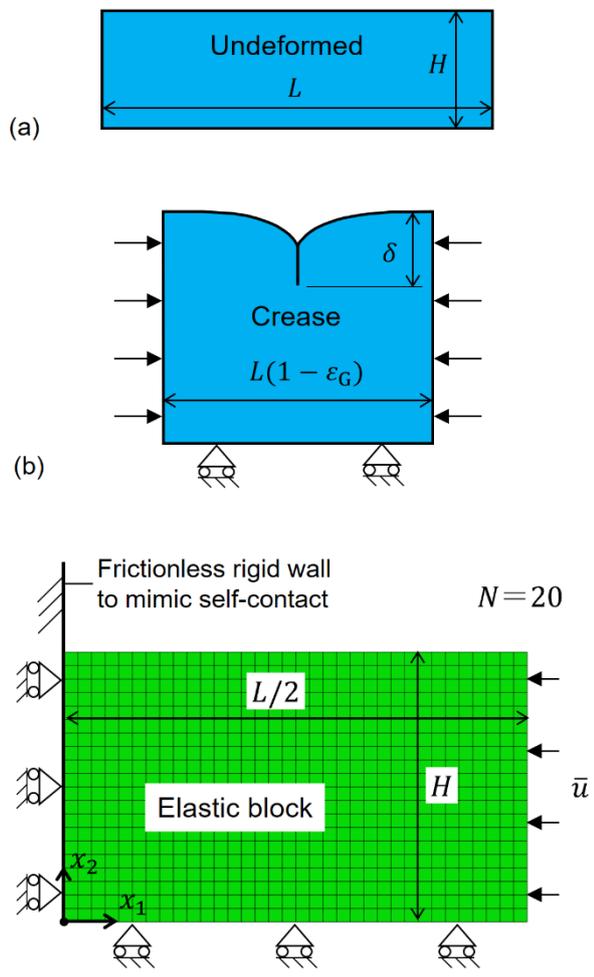


Fig.1 Schematic illustrations and a finite element model of an elastic block. (a) Undeformed state of an elastic block with height  $H$  and length  $L$ . (b) Crease state on a bifurcated path at the global compressive strain  $\varepsilon_G$ . The crease depth  $\delta$  is an indicator of crease evolution. (c) Boundary conditions and finite element mesh for half of the elastic block. The global compressive strain  $\varepsilon_G$  is defined as  $\varepsilon_G = -2\bar{u}/L$ . The mesh resolution  $N$  means that the elastic block is divided into a square mesh with side lengths of  $H/N$  (the sample case for  $N = 20$  is shown here).

本研究では、平面ひずみ、単軸、および等二軸条件におけるクリースの発達過程について調べる。CPEG4RH は、通常節点と幾何学モデルを構成するすべての共成要素で共有される参照節点から構成され、2次元の弾性体に上記の条件を課すために利用できる。参照節点の自由度は、面外方向の変位 $u_{x_3}$ と面内方向の角度 $(\phi_{x_1}, \phi_{x_2})$ である。これらの自由度は、2つの境界面間の相対的な配置を制御し、面外方向の要素形状を決定する。条件 $(\phi_{x_1}, \phi_{x_2})=0$ を課すとき、現在の要素幅 $w$ は次式のように表される。

$$w = W + u_{x_3} \quad (1)$$

初期幅 $W$ については、本研究では $W/H = 1.0$ に固定されている。 $u_{x_3}$ に制約を与えない場合は単軸圧縮となり、 $u_{x_3} = \bar{u}W/L$ を強制すると等二軸圧縮となる。

解析においては、左境界上面に負の $x_2$ 方向の非線形摂動力 $f$ を導入する。 $\varepsilon_G$ の固定値が $\varepsilon_W$ と $\varepsilon_C$ の間に位置するメタ安定状態においては、クリースの発生後に $f$ を除去してもクリースは消滅せず、 $f = 0$ で分岐解が見出される。クリースが発生すると自己接触が生じるため、摂動力は非線形になる。摂動力を除去した後、平衡点からの $\varepsilon_G$ の増減によって分岐経路を解析する。

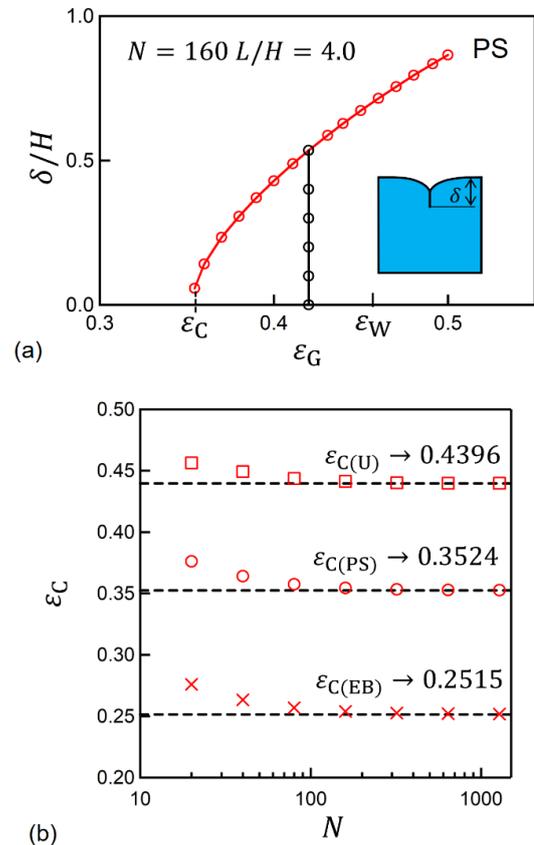


Fig. 2 Results obtained by the finite element analysis. (a) Crease depth  $\delta/H$  as a function of the global compressive strain  $\varepsilon_G$ . (b) Critical strain for creasing  $\varepsilon_C$  under plane strain (PS), uniaxial (U), and equibiaxial (EB) conditions for various values of the mesh resolution  $N$ .

### 3. 解析結果

まず、平面ひずみ条件における正規化したクリーズ深さ  $\delta/H$  と圧縮ひずみ  $\varepsilon_G$  の関係を Fig. 2(a) に示す。赤線はクリーズの変形経路を、黒線は  $\varepsilon_G = 0.42$  における摂動解析の結果を表している。メタ安定状態 ( $\varepsilon_C < \varepsilon_G < \varepsilon_W$ ) においては、任意の圧縮ひずみで摂動解析を実施することにより分岐解が得られ、クリーズの変形経路を明らかにすることができる。なお、クリーズ深さが 0 となる前に解析が終了するが、このときの圧縮ひずみをクリーズ発生ひずみ  $\varepsilon_C$  とする。

次に、平面ひずみ (PS)、単軸 (U)、および等二軸 (EB) 条件におけるクリーズ発生ひずみ  $\varepsilon_C$  と要素分割数  $N$  の関係を Fig. 2(b) に示す。いずれの負荷条件においても、 $N = 640$  のときに十分な収束性を示し、 $\varepsilon_{C(PS)} = 0.3524$ 、 $\varepsilon_{C(U)} = 0.4396$ 、 $\varepsilon_{C(EB)} = 0.2515$  が得られた。これらの値は、先行研究で報告されている  $\varepsilon_{C(PS)} = 0.35 - 0.361$  (7),(9),(12)、 $\varepsilon_{C(U)} = 0.438 - 0.44$  (9),(12)、 $\varepsilon_{C(EB)} = 0.25 - 0.264$  (12),(13) とよく一致している。そこで、以下では、 $N = 640$  において得られた結果について述べる。

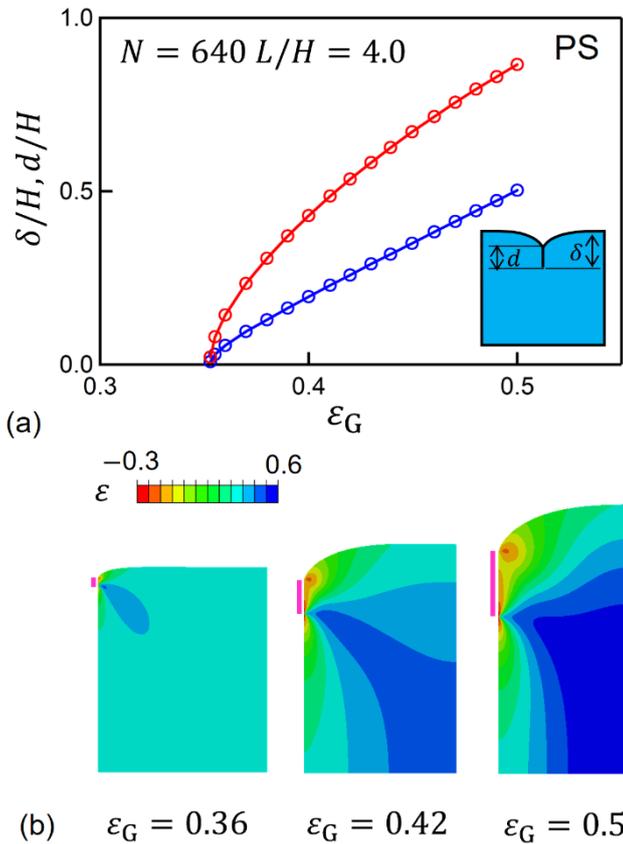


Fig. 3 The crease deformation path under the plane strain condition. (a) Crease depth  $\delta/H$  and self-contact length  $d/H$  as a function of  $\varepsilon_G$  for  $N = 640$  and  $L/H = 4.0$ . The red and blue plots denote the crease depth and self-contact length, respectively. (b) Deformation shape obtained at  $\varepsilon_G = 0.36, 0.42$ , and  $0.5$ . The regions of self-contact caused by creasing are highlighted in pink. The distributions of  $\varepsilon$  are depicted using the local compressive strain in the same direction as  $\varepsilon_G$ .

平面ひずみ条件におけるクリーズの変形経路を Fig. 3(a) に示す。赤線はクリーズ深さ  $\delta/H$  を、青線は自己接触長さ  $d/H$  を表している。圧縮ひずみの増加に伴い、クリーズ深さおよび自己接触長さがいずれも増大している。ここで、 $\varepsilon_G = 0.36, 0.42, 0.5$  における変形の様子を Fig. 3(b) に示す。自己接触領域をピンク線で示し、圧縮方向の局所ひずみ  $\varepsilon$  をコンター図で表す。これらの図より、クリーズは、圧縮ひずみが局所的に大きくなり、クリーズ深さと自己接触長さが増加しながら発達していく過程が明らかになった。

単軸および等二軸条件下のクリーズ変形経路と変形形状をそれぞれ Fig. 4 と Fig. 5 に示す。Fig. 3 に示した平面ひずみ条件の結果と同様に、自己接触領域をピンク線で示し、圧縮方向の局所ひずみ  $\varepsilon$  をコンター図で表す。圧縮ひずみの増加に伴い、クリーズが発達していく様子がわかる。なお、Fig. 3(b), 4(b), 5(b) の変形形状は、未変形状態を基準に図の縮尺を調整している。得られた変形形状の大小関係から、本研究において、一般化平面ひずみ要素を用いることにより、3つの異なる負荷条件が正しく再現されていることを確認できた。

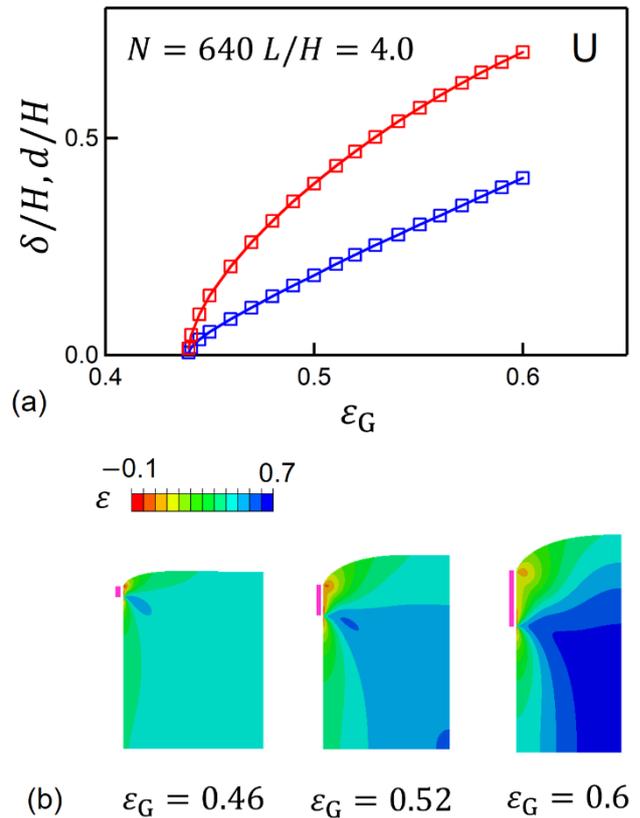
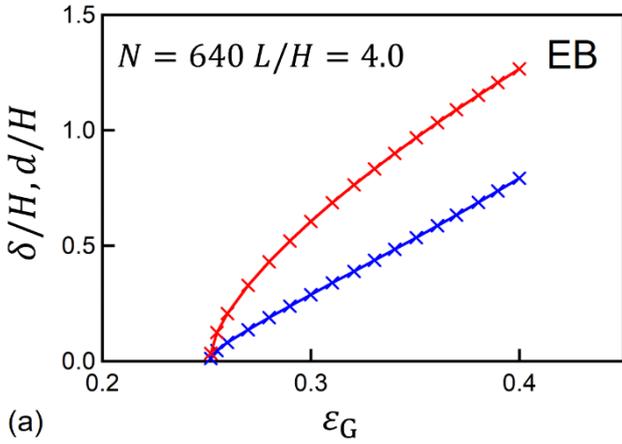


Fig. 4 The crease deformation path under the uniaxial condition. (a) Crease depth  $\delta/H$  and self-contact length  $d/H$  as a function of  $\varepsilon_G$ . The red and blue plots denote the crease depth and self-contact length, respectively. (b) Deformation shape obtained at  $\varepsilon_G = 0.46, 0.52$ , and  $0.6$ . The regions of self-contact caused by creasing are highlighted in pink. The distributions of  $\varepsilon$  are depicted using the local compressive strain in the same direction as  $\varepsilon_G$ .



(a)

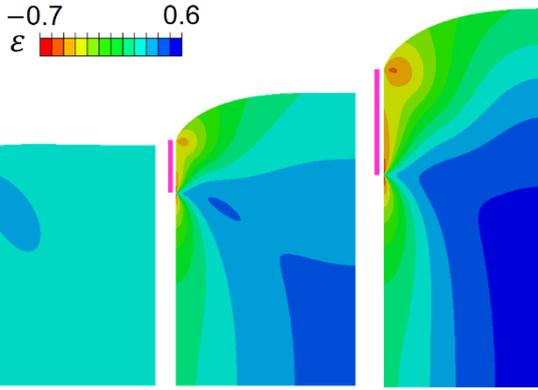
(b)  $\varepsilon_G = 0.26$     $\varepsilon_G = 0.32$     $\varepsilon_G = 0.4$ 

Fig. 5 The crease deformation path under the equibiaxial condition. (a) Crease depth  $\delta/H$  and self-contact length  $d/H$  as a function of  $\varepsilon_G$ . The red and blue plots denote the crease depth and self-contact length, respectively. (b) Deformation shape obtained at  $\varepsilon_G = 0.26, 0.32$ , and  $0.4$ . The regions of self-contact caused by creasing are highlighted in pink. The distributions of  $\varepsilon$  are depicted using the local compressive strain in the same direction as  $\varepsilon_G$ .

#### 4. 解析結果の評価

各負荷条件におけるクリース深さ $\delta/H$ と圧縮ひずみ $\varepsilon_G$ の関係を Fig. 6(a)に、自己接触長さ $d/H$ と圧縮ひずみ $\varepsilon_G$ の関係を Fig. 6(b)に示す。グラフ内の○, □, ×印のプロットは、それぞれ平面ひずみ, 単軸, および等二軸条件の解析結果を表しており、赤, 青, 緑色は、それぞれクリース間隔 $L/H = 5.0, 4.0, 3.0$ を表している。ここで、クリース深さ $\delta/H$ と自己接触長さ $d/H$ が、それぞれ以下のべき関数で表されると仮定する。

$$\delta/H = C_\delta(\varepsilon_G - \varepsilon_C)^{k_\delta} \quad (2)$$

$$d/H = C_d(\varepsilon_G - \varepsilon_C)^{k_d} \quad (3)$$

なお、 $C_\delta, C_d$ は定数、 $k_\delta, k_d$ はスケーリング指数である。

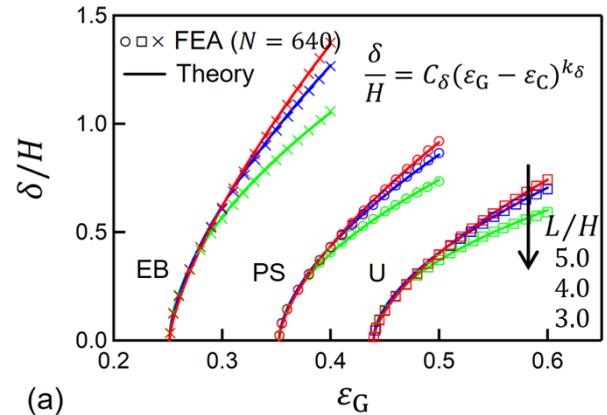
まず、式(2), (3)から得られるクリース深さと自己接触長さを Fig. 6 のグラフ内に実線で示す。いずれの負荷条件および

クリース間隔においても、解析結果とよく一致している。次に、定数 $C_\delta, C_d$ およびスケーリング指数 $k_\delta, k_d$ とクリース間隔 $L/H$ の関係を Fig. 7 に示す。定数とスケーリング指数のいずれも負荷条件によらずクリース間隔 $L/H$ に対して単調増加しているが、スケーリング指数 $k$ は、定数 $C$ に比べてクリース間隔の依存性が低いことがわかる。以上の結果より、定数およびスケーリング指数は、式(4), (5)に示すクリース間隔 $L/H$ の線形関数で表される。Table 1 は、各負荷条件における係数 $a_{\delta,d}, b_{\delta,d}, i_{\delta,d}, j_{\delta,d}$ をまとめたものである。

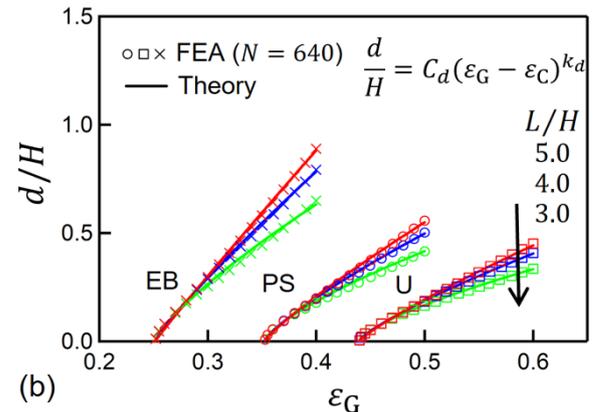
$$C_{\delta,d} = a_{\delta,d}L/H + b_{\delta,d} \quad (4)$$

$$k_{\delta,d} = i_{\delta,d}L/H + j_{\delta,d} \quad (5)$$

以上の結果は、クリース間隔 $L/H$ と圧縮ひずみ $\varepsilon_G$ を適切に設定することにより、所望のクリース深さ $\delta/H$ と自己接触長さ $d/H$ を有したクリースの発生を再現することが可能になることを示唆する。



(a)



(b)

Fig. 6 Comparison of the results obtained by finite element analysis (FEA) and theoretical equations for (a) crease depth  $\delta/H$  and (b) self-contact length  $d/H$  under the plane strain (PS), uniaxial (U), and equibiaxial (EB) conditions. The symbols ○, □, and × denote the FEA results obtained under PS, U, and EB conditions, respectively. Solid lines shown in (a) and (b) indicate the results obtained using Equations (2) and (3), respectively. The results are presented for the crease intervals  $L/H = 5.0$  (red),  $4.0$  (blue), and  $3.0$  (green).

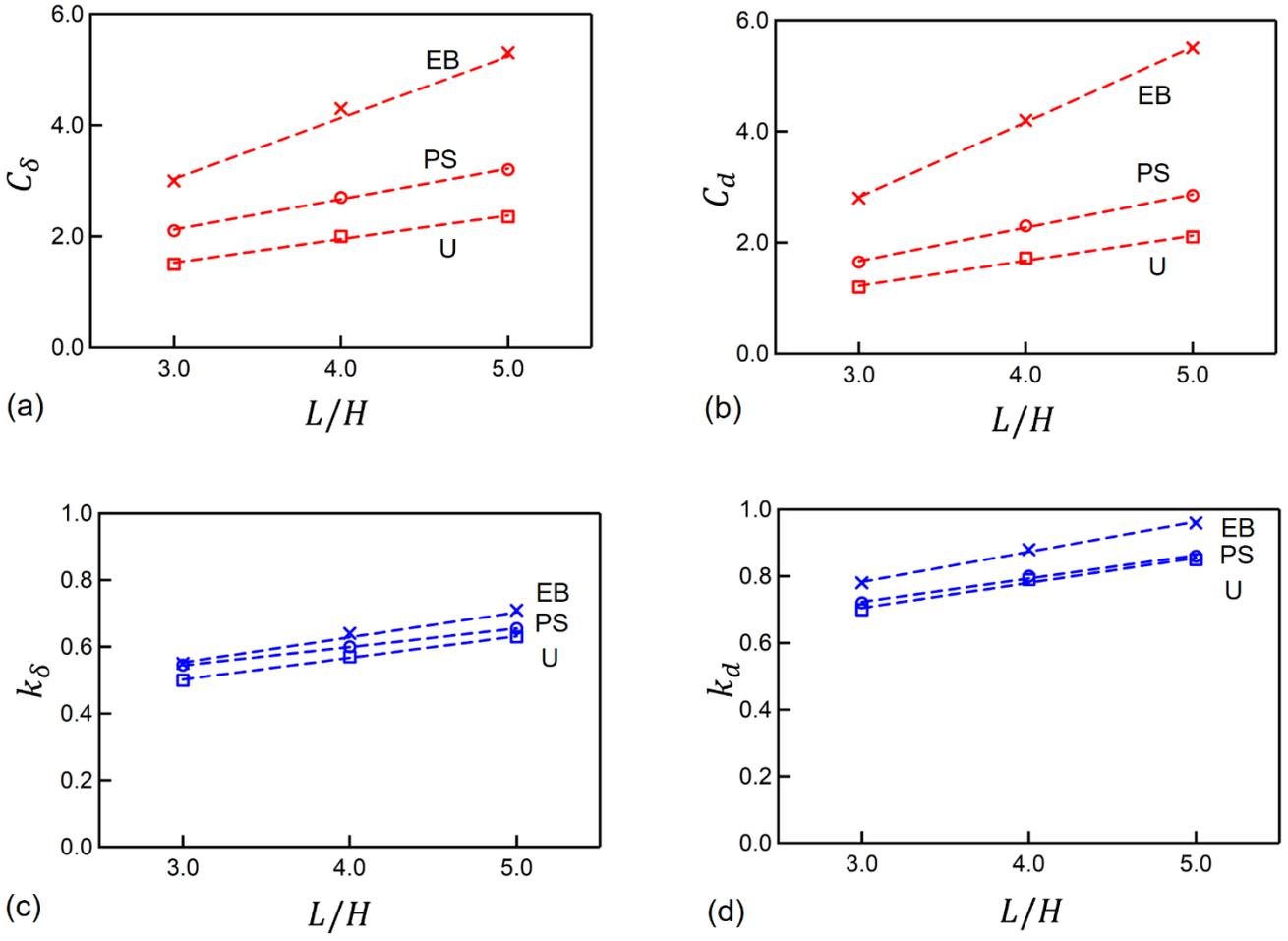


Fig. 7 Constants and scaling exponents as a function of the crease interval. (a,b) Constants (a)  $C_\delta$  and (b)  $C_d$  determined from the results shown in Fig. 6 are plotted as a function of the crease interval  $L/H$ . (c,d) Scaling exponents (c)  $k_\delta$  and (d)  $k_d$  obtained from the results shown in Fig. 6 are plotted as a function of the crease interval  $L/H$ . Symbols  $\circ$ ,  $\square$ , and  $\times$  denote the values under plane strain (PS), uniaxial (U) and equibiaxial (EB) conditions, respectively. The dotted lines show the linear approximation.

Table 1 Coefficients  $a_{\delta,d}$ ,  $b_{\delta,d}$ ,  $i_{\delta,d}$ , and  $j_{\delta,d}$  in Equations (4) and (5) determined under PS, U, and EB conditions.

	$a_\delta$	$a_d$	$b_\delta$	$b_d$	$i_\delta$	$i_d$	$j_\delta$	$j_d$
PS	0.55	0.60	0.48	-0.13	0.055	0.07	0.38	0.51
U	0.43	0.45	0.25	-0.13	0.065	0.075	0.31	0.48
EB	1.15	1.35	-0.4	-1.23	0.08	0.09	0.31	0.51

## 5. 結 言

本研究では、有限要素解析により、クリースの発達過程に対する影響因子を調査した。一般化平面ひずみ要素を用い、平面ひずみ、単軸、および等二軸条件におけるクリースの発達過程を調査した。非線形摂動力法により、メタ安定状態から分岐解を求め、クリースが発達する分岐経路を解析した。クリース発生ひずみと要素分割数の関係より、既存の研究とよく一致するクリース発生ひずみの値が得られた。解析結果より、クリース深さと自己接触長さはべき関数で表され、その定数とスケーリング指数がクリース間隔の線形関数であることを明らかにした。クリース発達過程においては、クリース間隔がクリース深さや自己接触長さに影響を及ぼすことがわかった。本研究で獲得した知見は、クリースの発達過程への理解を深め、形態形成機構の解明につながると考えられる。

## 謝 辞

本研究の一部は JSPS 科研費 JP22K18284 の助成を受けて行われた。ここに記して謝意を表す。

## 参考文献

- (1) A. Mallouris, A. Yiacooumettis, V. Thomaidis, A. Karayiannakis, C. Simopoulos, D. Kakagia, A. K. Tsaroucha: A record of skin creases and folds, *European Journal of Plastic Surgery*, **35**(2012), pp. 847–854.
- (2) B. Li, Y. P. Cao, X. Q. Feng, H. Gao: Mechanics of morphological instabilities and surface wrinkling in soft materials: a review, *Soft Matter*, **8**(2012), pp. 5728–5745.
- (3) R. S. Hill, C. A. Walsh: Molecular insights into human brain evolution, *Nature*, **437**(2005), pp. 64–67.
- (4) M. A. Biot: Surface instability of rubber in compression, *Applied Scientific Research*, **12**(1963), pp. 168–182.
- (5) M. A. Biot: Mechanics of incremental deformations: theory of elasticity and viscoelasticity of initially stressed solids and fluids, including thermodynamic foundations and applications to finite strain, 1965, Wiley.
- (6) A. N. Gent, I. S. Cho: Surface instabilities in compressed or bent rubber blocks, *Rubber Chemistry and Technology*, **72**(1999), pp. 253–262.
- (7) E. Hohlfeld, L. Mahadevan: Unfolding the sulcus, *Physical Review Letters*, **106**(2011), 105702.
- (8) E. Hohlfeld, L. Mahadevan: Scale and nature of sulcification patterns, *Physical Review Letters*, **109**(2012), 025701.
- (9) P. Yang, Y. Fang, Y. Yuan, S. Meng, Z. Nan, H. Xu, H. Imtiaz, B. Liu, H. Gao: A perturbation force based approach to creasing instability in soft materials under general loading conditions, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **151**(2021), 104401.
- (10) R. Hoshi, H. Miyoshi, S. Matsubara, D. Okumura: Effects of initial imperfection and mesh resolution on wrinkle and crease analyses, *Transactions of the JSME (in Japanese)*, **87**(2021), 21-00045.
- (11) S. Matsubara, A. Ogino, S. Nagashima, D. Okumura: Computational and physical aspects for the occurrence of crease in an elastomer under general loading conditions, in revision.
- (12) W. Hong, X. Zhao, Z. Suo: Formation of creases on the surfaces of elastomers and gels, *Applied Physics Letters*, **95**(2009), 111901.
- (13) S. Cai, D. Chen, Z. Suo, R. C. Hayward: Creasing instability of elastomer films, *Soft Matter*, **8**(2012), pp. 1301–1304.

# 1次元熱方程式に対する有限要素法における Hilbert 変換と基底関数の拡張を用いた安定化について

On stabilisation of a finite element method for the heat equation in 1D  
using the Hilbert transformation and expansion of a basis function

新納 和樹<sup>1)</sup>, 竹内 祐介<sup>2)</sup>

Kazuki NIINO and Yusuke TAKEUCHI

1) 京都大学大学院情報学研究科 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: niino@i.kyoto-u.ac.jp)

2) 京都大学大学院情報学研究科 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: takeuchi@acs.i.kyoto-u.ac.jp)

This paper proposes a stabilisation method for a finite element method using the Hilbert-type operator for the heat equation. We show that the operator is identical to the original Hilbert-type operator  $\mathcal{H}_T$  up to a compact perturbation. Through a numerical example, it is also verified that the proposed method can control the computational cost and accuracy in a trade-off manner by changing parameters contained in the definition of the proposed operator.

**Key Words:** Finite element method (FEM), Space-time method, Heat equation, Hilbert-type transformation

## 1. 序論

時間域の線形偏微分方程式に対する安定な数値解法について、古くから様々な研究が行われてきた。近年、特に熱方程式や波動方程式を対象とする有限要素法において、Hilbert 型変換を用いた安定化手法<sup>(1, 2)</sup>が提案され、盛んに研究されている。この方法は、空間方向だけでなく時間方向にも変分形式を用いて離散化を行い、変分形式における任意関数を適切な関数空間から選ぶことで、その双線形形式  $a(u, v)$  が強圧性

$$a(u, u) \geq C\|u\|^2$$

を、最大の係数  $C$  (すなわち  $C = 1$ ) で満たすようにする、というアイデアに基づく方法である。特に熱方程式、すなわち時間微分に関する双線形形式では、任意関数  $v$  を Hilbert 変換型の作用素  $\mathcal{H}_T$  (この作用素の具体的な定義は 2 節で与える。  $T$  は時刻の最大値) の像空間から取ることで、上の条件が満たされることが示された<sup>(1, 3)</sup>。我々のグループでは作用素  $\mathcal{H}_T$  を直接計算するとその実装が煩雑になることから、類似のより実装が容易な作用素  $\tilde{\mathcal{H}}_\infty$  を用いることでも安定化が実現できることを示した<sup>(4)</sup>。一方で Steinbach and Missoni は、関数の台を適当に拡張することで Hilbert 変換  $\mathcal{H}$  が作用素  $\mathcal{H}_T$  とコンパクト作用素を除いて等しいことを示した<sup>(5)</sup>。

そこで本稿では、Hilbert 型変換  $\mathcal{H}_T$  とコンパクト作用素を除いて等しい、新たな作用素  $\mathcal{H}_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2}$  を導入する。この作用素はパラメータ  $\varepsilon_1, \varepsilon_2$  を含む作用素であり、このパラメータを適切に設定することで Hilbert 変換  $\mathcal{H}$  と一致することから、Steinbach and Missoni の Hilbert 変換の拡張と言える。また我々の先行研究<sup>(4)</sup>の数値解法では、用いた作用素  $\tilde{\mathcal{H}}_\infty$  が「コンパクト作用素を除いて作用素  $\mathcal{H}_T$  に等しい」という性質を満たさないが、本稿で提案する作用素  $\mathcal{H}_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2}$  はこの性質を満たすため、提案法はより妥当性の高い手法であると言える。実際簡単な数値計算例を通して、提案法が計算量・精度の両面において  $\tilde{\mathcal{H}}_\infty$  を用いる従来法より優れていることを示す。また提案法におけるパラメータを適宜変更することで、精度と計算時間がトレードオフの関係で変化し、最も精度を重視するパラメータが Hilbert 変換  $\mathcal{H}$  に対応することも数値例を通して示す。

本稿の構成は以下のとおりである。2 節で本稿で扱う熱方程式とその変分形式の定式化、および各種 Hilbert 型変換の定義を行う。3 節では、2 節で定義した各作用素の満たす関係を示す。4 節で改めて本稿で提案する有限要素法の安定化法の定式化を与える。5 節で数値計算例を示し、最後に 6 節で結論と今後の課題を述べる。

2023 年 10 月 13 日受付, 2023 年 10 月 26 日受理

## 2. 熱方程式と変分形式

1次元熱方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t), \quad (x, t) \in (x_1, x_2) \times (0, \infty) \quad (1)$$

を満たす関数  $u$  を, 境界条件

$$u(x_1, t) = g_1(t)$$

$$u(x_2, t) = g_2(t)$$

および初期条件

$$u(x, 0) = 0$$

の下で求める問題を考える.

この問題を有限要素法を用いて数値的に解く場合, 熱方程式 (1) の空間変数  $x$  に関する変分方程式

$$\int_{x_1}^{x_2} v(x) \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) dx = - \int_{x_1}^{x_2} \frac{dv}{dx}(x) \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) dx$$

を時刻  $t$  に関する常微分方程式と見なし, 適当な差分法を用いる方法が広く用いられる. ここに  $v(x)$  は任意関数である. 本稿では  $w(x, t)$  を任意関数とし熱方程式 (1) の時空間に関する変分方程式

$$\int_0^T \int_{x_1}^{x_2} w(x, t) \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) dx dt = - \int_0^T \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial w}{\partial x}(x, t) \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) dx dt \quad (2)$$

を考える. 時間方向の変分方程式を考える利点として, 最適なテスト空間による変分法により, 時間方向に安定な数値解法を構成できることが挙げられる. 最適なテスト空間による変分法とは, 任意関数  $w$  を適切な関数空間から選ぶことで, 考える変分方程式の双線形形式が最も強い意味の強圧性を満たすようにする方法である. 例えば与えられた  $g$  に対する  $f$  に関する初期値問題

$$\begin{aligned} \frac{df}{dt}(t) &= g(t) \\ f(0) &= 0 \end{aligned}$$

に対する変分方程式

$$\int_0^T h(t) \frac{df}{dt}(t) dt = \int_0^T h(t) g(t) dt \quad (3)$$

において,

$$h(t) = \mathcal{H}_T \tilde{f} := \int_0^T K_T(s, t) \tilde{f}(s) ds$$

$$K_T(s, t) = \frac{1}{2T} \left\{ \frac{1}{\sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{s-t}{T}\right)} + \frac{1}{\sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{s+t}{T}\right)} \right\}$$

とする. ここに  $f$  は Cauchy の主値積分である. このとき変分方程式 (3) の双線形形式

$$\tilde{a}(\tilde{f}, f) = \int_0^T (\mathcal{H}_T \tilde{f})(t) \frac{df}{dt}(t) dt$$

は, 適当な関数空間を考えることで

$$a(f, f) = \|f\|$$

を満たすことが知られている<sup>(1, 3)</sup>. これは強圧性  $a(f, f) \geq C\|f\|^2$  を  $C = 1$  で満たすという意味で, 最も強い条件の強圧性を満足すると捉えることができる. また  $K_T$  に対して  $T \rightarrow \infty$  の極限を取ると

$$K_\infty(s, t) := \lim_{T \rightarrow \infty} K_T(s, t) = \frac{1}{\pi} \left( \frac{1}{s-t} + \frac{1}{s+t} \right)$$

となるので, 形式的に作用素  $\mathcal{H}_\infty$  を

$$(\mathcal{H}_\infty \varphi)(t) = \int_0^\infty K_\infty(s, t) \varphi(s) ds$$

と定義する. この作用素  $\mathcal{H}_\infty$  が Hilbert 変換

$$(\mathcal{H}\varphi)(t) := \int \frac{1}{t-s} \varphi(s) ds$$

と似ているために Hilbert 型変換と呼ばれる.

先行研究<sup>(4)</sup> では, 作用素に含まれる被積分関数の特異性が等しいことから,  $\mathcal{H}_T$  の代わりに, 作用素

$$(\tilde{\mathcal{H}}_\infty \varphi)(t) := \int_0^T K_\infty(s, t) \varphi(s) ds$$

を用いる方法を提案した. 本稿では Steinbach and Missoni<sup>(5)</sup> のアイデアをベースに新たに  $\mathcal{H}_T$  とコンパクト作用素を除いて等しい作用素を導出し, これを用いた安定な有限要素法を提案する.

### 3. 各作用素の関係

本節では2節で導入した各作用素が満たす関係性について述べる. 3.1節および3.2節では, Steinbach and Missoni<sup>(5)</sup> に基づき作用素  $\mathcal{H}_T, \mathcal{H}_\infty, \mathcal{H}$  の関係性を示し, 特に  $\mathcal{H}_T$  と  $-\mathcal{H}$  がコンパクト作用素を除いて等しいことを示す. 3.3節では  $\mathcal{H}$  とコンパクト作用素を除いて等しい作用素  $\mathcal{H}_{e_1}^2$  を導入する. なお, 本節では  $T$  を正数として,  $t \in (0, T)$  とする.

#### 3.1. 作用素 $\mathcal{H}$ と $\mathcal{H}_\infty$ の関係

本小節では作用素  $\mathcal{H}$  と  $\mathcal{H}_\infty$  の関係について述べる. 2節で導入した作用素  $\mathcal{H}_\infty$  は, 次のように変形できる:

$$\begin{aligned} (\mathcal{H}_\infty \varphi)(t) &= \int_0^\infty K_\infty(s, t) \varphi(s) ds \\ &= \frac{1}{\pi} \int \frac{\varphi(s)}{s-t} ds + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{\varphi(s)}{s+t} ds \end{aligned} \quad (4)$$

この式の第二項について,  $s \rightarrow -\sigma$  の変数変換を行うと

$$\frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{\varphi(s)}{s+t} ds = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^0 \frac{\varphi(-\sigma)}{\sigma-t} d\sigma$$

となる. よって関数  $\tilde{\varphi}$  を

$$\tilde{\varphi}(s) := \begin{cases} \varphi(s) & \text{for } s \in [0, \infty) \\ -\varphi(-s) & \text{for } s \in (-\infty, 0) \end{cases}$$

と定義することで, (4) 式は

$$\begin{aligned} (\mathcal{H}_\infty \varphi)(t) &= \frac{1}{\pi} \int \frac{\varphi(s)}{s-t} ds + \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^0 \frac{-\varphi(-s)}{s-t} ds \\ &= -(\mathcal{H}\tilde{\varphi})(t) \end{aligned} \quad (5)$$

となる.

### 3.2. 作用素 $\mathcal{H}_\infty$ と $\mathcal{H}_T$ の関係

関数  $\varphi$  を、区間  $[0, T]$  で定義され  $\varphi(0) = 0$  を満たす関数とする。この  $\varphi$  に対して区間  $[0, \infty)$  で定義される関数  $\bar{\varphi}$  を以下の様に定義する:

$$\bar{\varphi}(s) := \begin{cases} \varphi(s) & \text{for } s \in [0, T] \\ \varphi(2T - s) & \text{for } s \in (T, 2T) \\ 0 & \text{for } [2T, \infty) \end{cases}$$

この  $\bar{\varphi}$  に作用素  $\mathcal{H}_\infty$  を作用させると、

$$\begin{aligned} (\mathcal{H}_\infty \bar{\varphi})(t) &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{\bar{\varphi}(s)}{s-t} \frac{2s}{s+t} ds \\ &= \frac{1}{\pi} \left\{ \int_0^T \frac{\varphi(s)}{s-t} ds + \int_0^T \frac{\varphi(s)}{s+t} ds \right. \\ &\quad \left. + \int_T^{2T} \frac{\varphi(2T-s)}{s-t} ds + \int_T^{2T} \frac{\varphi(2T-s)}{s+t} ds \right\} \end{aligned}$$

となる。第 3, 4 項目の区間  $(T, 2T)$  における積分において、 $\sigma = 2T - s$  の変数変換を施すと、

$$\begin{aligned} (\mathcal{H}_\infty \bar{\varphi})(t) &= \frac{1}{\pi} \int_0^T \varphi(s) \left\{ \frac{1}{s-t} + \frac{1}{s+t} \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2T-s-t} + \frac{1}{2T-s+t} \right\} ds \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^T \varphi(s) \left\{ \frac{2T}{(s-t)(2T-(s-t))} \right. \\ &\quad \left. + \frac{2T}{(s+t)(2T-(s+t))} \right\} ds \end{aligned}$$

となる。ここで作用素  $B$  を

$$\begin{aligned} (B\varphi)(t) &:= (\mathcal{H}_T\varphi)(t) - (\mathcal{H}_\infty \bar{\varphi})(t) \\ &= \int_0^T (k_1(s, t) + k_2(s, t))\varphi(s) ds \end{aligned} \quad (6)$$

と定義する。ここに

$$\begin{aligned} k_1(s, t) &:= \frac{1}{2T} \frac{1}{\sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{s-t}{T}\right)} - \frac{1}{\pi} \frac{2T}{(s-t)(2T-(s-t))} \\ k_2(s, t) &:= \frac{1}{2T} \frac{1}{\sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{s+t}{T}\right)} - \frac{1}{\pi} \frac{2T}{(s+t)(2T-(s+t))} \end{aligned}$$

である。  $k_1, k_2$  は  $s, t \in (0, T)$  において有界かつ連続であるため、  $B$  はコンパクト作用素である。したがって作用素  $\mathcal{H}_T$  と  $\mathcal{H}_\infty$  は、式 (6) の意味においてコンパクト作用素を除いて等しいことがわかる。

さらに式 (5) より、  $-\mathcal{H}$  と  $\mathcal{H}_T$  も次の式の意味においてコンパクト作用素を除いて等しいと言える。

$$\mathcal{H}_T\varphi = -\mathcal{H}\bar{\varphi} + B\varphi$$

ここに  $\bar{\varphi}$  は、区間  $(0, T)$  で定義される関数  $\varphi$  を用いて

$$\bar{\varphi}(s) := \begin{cases} \varphi(s) & \text{for } s \in (0, T) \\ \varphi(2T - s) & \text{for } s \in (T, 2T) \\ -\varphi(-s) & \text{for } s \in (-T, 0) \\ -\varphi(2T + s) & \text{for } s \in (-2T, -T) \\ 0 & \text{else} \end{cases} \quad (7)$$

で表される関数である。

### 3.3. 作用素 $\mathcal{H}$ と $\mathcal{H}_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2}$ の関係

前節の結果より、有限要素法の安定化のために  $\mathcal{H}_T$  の代わりに、作用素

$$\mathcal{H}\bar{\varphi} = \int_{-\infty}^\infty \frac{\varphi(s)}{s-t} ds = \int_{-2T}^{2T} \frac{\varphi(s)}{s-t} ds$$

を用いる方法が考えられるが、時刻  $t$  が  $t \in (0, T)$  であることを利用して、分解

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} + \mathcal{K}$$

を考える。ここに

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} \bar{\varphi} &:= \int_{-\varepsilon_1}^{T+\varepsilon_2} \frac{\bar{\varphi}(s)}{s-t} ds, \\ \mathcal{K} \bar{\varphi} &:= \left( \int_{-2T}^{-\varepsilon_1} + \int_{T+\varepsilon_2}^{2T} \right) \frac{\varphi(s)}{s-t} ds, \end{aligned} \quad (8)$$

$\varepsilon_1 \in (0, 2T]$ ,  $\varepsilon_2 \in (0, T]$  である。実際、作用素  $\mathcal{K}$  内の核関数  $1/(s-t)$  は  $t \in (0, T)$ ,  $s \in (-2T, -\varepsilon_1)$  または  $s \in (T+\varepsilon_2, 2T)$  において有界連続であるため、作用素  $\mathcal{K}$  はコンパクトである。

以上より、作用素  $\mathcal{H}_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2}$  を  $\mathcal{H}_T$  の代わりに用いた有限要素法の安定化が考えられる。なお、 $\varepsilon_1, \varepsilon_2$  の値は、それぞれの最大値  $\varepsilon_1 = 2T$ ,  $\varepsilon_2 = T$  において  $\mathcal{H}_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} = \mathcal{H}$  であるため、大きく取るほど安定化の効果が大きくなる一方で、計算が必要な積分の範囲が増えるため計算量が增大すると考えられる。逆に  $\varepsilon_1, \varepsilon_2$  を小さく取ると、安定化の効果が弱まり計算量が小さくなることが予想される。また  $\varepsilon_1, \varepsilon_2$  の値をどれ程小さくとっても  $\mathcal{K}$  はコンパクトであるが、数値計算においてはあまりに小さく取ると安定化の効果が損なわれると考えられる。5 節で具体的な数値例を用い、上記の考察に関する検証を行う。

### 4. 提案する有限要素法とその実装

3 節の結果に従い、作用素  $\mathcal{H}_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2}$  を用いた有限要素法の定式化を行う。区間  $(x_1, x_2)$  および  $(0, T)$  をそれぞれ  $N_x, N_t$  個の区間に等分割し、これらの各頂点上で定義された区分線形基底をそれぞれ  $\psi_i(x)$ ,  $\varphi_m(t)$  とする ( $i = 0, \dots, N_x$ ,  $m = 0, \dots, N_t$ )。式 (2) の変分形式において、未知関数  $u$  をこれらの基底関数を用いて

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{N_t} \sum_{j=0}^{N_x} u_j^n \psi_j(x) \varphi_n(t)$$

と内挿し、任意関数  $w$  として、 $w(x, t) = \psi_i(x)(\mathcal{H}_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} \bar{\varphi}_m)(t)$  を代入すると、

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{N_t} \sum_{j=0}^{N_x} u_j^n \left\{ \int_0^T \int_{x_1}^{x_2} \psi_i(x) (\mathcal{H}_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} \bar{\varphi}_m)(t) \psi_j(x) \frac{\partial \varphi_n(t)}{\partial t} dx dt \right. \\ \left. + \int_0^T \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \psi_i(x)}{\partial x} (\mathcal{H}_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} \bar{\varphi}_m)(t) \frac{\partial \psi_j(x)}{\partial x} \varphi_n(t) dx dt \right\} \end{aligned}$$

を得る。ただし関数  $\bar{\varphi}_m$  は、 $(0, T)$  で定義された区分線形基底  $\varphi_m$  に対して、式 (7) で定義された拡張を適用した関数で

ある. この式に (8) を代入することで,

$$\sum_{n=1}^{N_t} \sum_{j=0}^{N_x} u_j^n \left\{ \int_0^T \frac{\partial \varphi_n(t)}{\partial t} \int_{-\varepsilon_1}^{T+\varepsilon_2} \frac{\tilde{\varphi}_m(s)}{s-t} ds dt \int_{x_1}^{x_2} \psi_i(x) \psi_j(x) dx \right. \\ \left. + \int_0^T \varphi_n(t) \int_{-\varepsilon_1}^{T+\varepsilon_2} \frac{\tilde{\varphi}_m(s)}{s-t} ds dt \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \psi_i}{\partial x}(x) \frac{\partial \psi_j}{\partial x}(x) dx \right\} \quad (9)$$

を得る.

数値計算を行う際,  $\varepsilon_i$  の値は時間方向の分割幅  $\Delta t = T/N_t$  の整数倍  $\varepsilon_i = k_i \Delta t$  とする. 式 (9) の未知数は  $u_j^n$  ( $j = 1, \dots, N_x - 1, n = 1, \dots, N_t$ ) であり, その個数は  $(N_x - 1)N_t$  であるため, 解くべき線形方程式のサイズは  $k_i$  に依存しない. 一方, 式 (9) 中の各積分は, 分割した要素毎に計算を行うが, 線形方程式の係数行列を計算するために必要な時間方向の積分は

$$\int_{\Delta t_1} \frac{\partial \varphi_n(t)}{\partial t} \int_{\Delta t_2} \frac{\tilde{\varphi}_m(s)}{s-t} ds dt, \quad \int_{\Delta t_1} \varphi_n(t) \int_{\Delta t_2} \frac{\tilde{\varphi}_m(s)}{s-t} ds dt$$

である. ここに  $\int_{\Delta t_i}$  ( $i = 1, 2$ ) は, 時間方向の分割のある要素上での積分である. 式 (9) より,  $\Delta t_1$  は  $N_t$  個,  $\Delta t_2$  は  $N_t + k_1 + k_2$  個の要素上で計算する必要がある. 一方, 式 (9) 中の空間方向積分に対応する行列は, サイズ  $N_x$  の疎行列であるため,  $N_x, N_t$  が十分大きいとき, その計算量は時間方向積分に要する計算量と比べて十分に小さい. 以上より, 係数行列の全ての非零要素を直接計算する場合, その計算量は概ね  $N_t(N_t + k_1 + k_2)$  に比例すると考えられる.

また 3.3 節で述べた通り,  $\varepsilon_1 = 2T, \varepsilon_2 = T$  とすることで, 式 (9) は作用素  $\mathcal{H}$  を用いた有限要素法<sup>(5)</sup> に一致する. また我々のグループが以前行った  $\tilde{\mathcal{H}}_\infty$  を用いた方法<sup>(4)</sup> は, 3.2 節の結果より, 式 (9) において  $\varepsilon_1 = T, \varepsilon_2 = 0$  とした方法と一致することがわかる.

## 5. 数値計算例

本節では以下の問題に対して数値計算を行った.

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t), \quad (x, t) \in (-1, 1) \times (0, 1) \\ u(-1, t) = t^2 \\ u(1, t) = t^2 \\ u(x, 0) = 0$$

この問題は解析解が

$$u_{\text{ana}}(x, t) = t^2 + 4 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{(k+1)}}{\alpha_k^3} \cos(\alpha_k x) \left( t + \frac{e^{-\alpha_k^2 t} - 1}{\alpha_k^2} \right),$$

$$\alpha_k = \frac{\pi}{2} + k\pi$$

であることが知られている<sup>(6)</sup>.

本節で比較を行った有限要素法は以下の 3 つの方法である.

**Approach 1**  $\mathcal{H}_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} \tilde{\varphi}$  をテスト関数に用いる提案法 (式 (9) において,  $\varepsilon_i = k_i \Delta t$  ( $i = 1, 2$ ) とする方法に対応.  $k_1, k_2$  の値については, 各数値計算結果で示す.)

**Approach 2**  $\mathcal{H} \tilde{\varphi}$  をテスト関数に用いる方法<sup>(5)</sup> (式 (9) において,  $\varepsilon_1 = -2T, \varepsilon_2 = T$  とする方法と同値.)

**Approach 3**  $\tilde{\mathcal{H}}_\infty \varphi$  をテスト関数に用いる従来法<sup>(4)</sup> (式 (9)

において,  $\varepsilon_1 = -T, \varepsilon_2 = 0$  とする方法と同値.)

上記の数値解法に加えて, 空間方向の離散化に有限要素法, 時間方向の離散化に差分法 (陰解法) を用いる従来法:

$$\int_0^T \psi_i(x) \frac{\sum_{j=0}^{N_x} u_j^{k+1} \psi_j(x) - \sum_{j=0}^{N_x} u_j^k \psi_j(x)}{\Delta t} dx \\ = - \sum_{j=0}^{N_x} u_j^{k+1} \int_0^T \frac{\partial \psi_i}{\partial x}(x) \frac{\partial \psi_j}{\partial x}(x) dx$$

との比較も行った. 数値計算において, 積分の計算は全て解析的に行い, 線形方程式の求解には LU 分解に基づく直接解法を用いた. また Approach 1 における  $\varepsilon_1, \varepsilon_2$  の値は, 時間方向の刻み幅を  $\Delta t = T/N_t$ ,  $k_1, k_2$  を正の整数として  $\varepsilon_i = k_i \Delta t$  ( $i = 1, 2$ ) とした.

まず Approach 2 の妥当性の確認および差分法との比較のために, いくつかの分割数  $N_t, N_x$  に対する Approach 2 と差分法の相対誤差を確認した. それぞれの数値解法の各時刻  $t$  における数値解の相対誤差

$$\sqrt{\frac{\sum_{j=1}^{N_x} |u_j^n - u_{\text{ana}}(x_j, t_n)|^2}{\sum_{j=1}^{N_x} |u_{\text{ana}}(x_j, t_n)|^2}} \quad (10)$$

を示した図を Fig. 1 に, 時空間での  $l_2$  相対誤差

$$\sqrt{\frac{\sum_{n=0}^{N_t} \sum_{j=1}^{N_x} |u_j^n - u_{\text{ana}}(x_j, t_n)|^2}{\sum_{n=0}^{N_t} \int_{j=1}^{N_x} |u_{\text{ana}}(x_j, t_n)|^2}} \quad (11)$$

を示した表を Table 1 に示す. ここに  $t_n = n \Delta t$ ,  $x_j = -1 + j h_x$  は, それぞれ時空間分割の  $n, j$  番目の節点の座標である. Fig. 1, Table 1 より Approach 2 では時空間方向の分割数が増加するほど精度が向上しており, また同程度の分割数の差分法と比べてより良い精度を示していることがわかる.

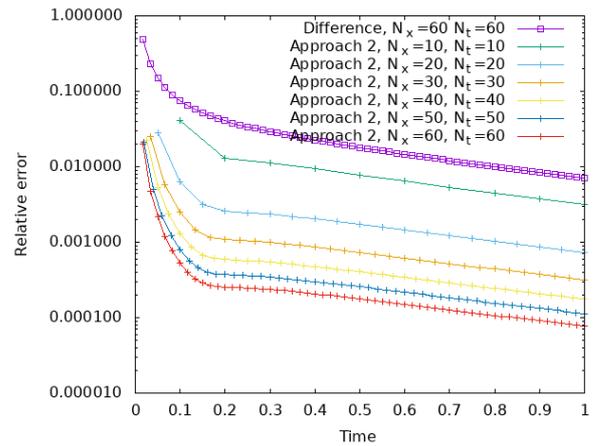


Fig. 1 Relative errors in (10) of Approach 2 and the difference method.

次に Approach 1 のパラメータ  $k_1, k_2$  の検証および Approach 2, 3 との比較のための数値計算を行った. Fig. 2 は  $k_2 = N_t$  で固定し, 積分範囲の下限に対応する  $k_1$  を様々な値に取った Approach 1 と Approach 2, 3 の相対誤差をプロットした図である. Fig. 2 より Approach 3 は Approach 1, 2 と

Table 1  $L_2$  relative errors in (11) of Approach 2 and the difference method.

Approach 2	$N_x = N_t = 10$	$4.058 \times 10^{-3}$
	$N_x = N_t = 20$	$9.618 \times 10^{-4}$
	$N_x = N_t = 30$	$4.204 \times 10^{-4}$
	$N_x = N_t = 40$	$2.346 \times 10^{-4}$
	$N_x = N_t = 50$	$1.495 \times 10^{-4}$
	$N_x = N_t = 60$	$1.034 \times 10^{-4}$
Difference method	$N_x = N_t = 60$	$9.840 \times 10^{-3}$

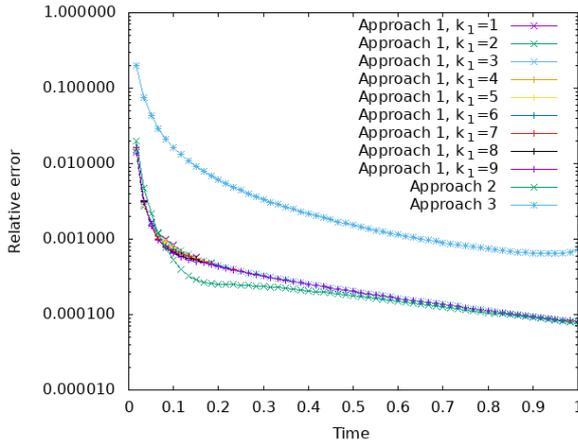


Fig. 2 Relative errors in (10) of Approach 1, 2 and 3.

比較して精度が悪い。Approach 3 は式 (9) において  $\varepsilon_2 = 0$  (すなわち  $k_2 = 0$ ) とした方法であり,  $\varepsilon_2$  を正の値に取ることが本質的に重要であることがこの結果からもわかる。また Approach 1 の積分範囲の下限に対応する  $k_1$  に関しては, 精度への影響があまり大きくないこともわかる。

次に Approach 1 の積分範囲の上限に対応する  $k_2$  の検証のために,  $k_1 = 1$  で固定し, 様々な  $k_2$  に対する Approach 1 の相対誤差を Fig. 3 に示す。Fig. 3 より比較した方法の内, Approach 2 の精度が最もよく, Approach 1 では  $k_2$  の値を大きくする程, 精度が Approach 2 に近づいていることがわかる。  $k_2$  の値を大きくする程, Approach 1 において計算が必要な積分の範囲が大きくなるため, 計算量と精度がトレードオフの関係になっていると言える。また  $k_2 = 0$  の Approach 1 および Approach 3 は, 他の解法と比較して精度が悪く, この結果からも  $k_2$  を正に取ることの重要性がわかる。

## 6. 結論

本稿では, 作用素  $\mathcal{H}_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2}$  を用いた熱方程式に対する有限要素法の安定化手法について述べた。この作用素が元の Hilbert 変換型作用素  $\mathcal{H}_T$  とコンパクト作用素を除いて等しいことを示した。また数値例により, パラメータ  $\varepsilon_1, \varepsilon_2$  を変更することで計算量と精度をトレードオフの関係でコントロールできることも確かめた。作用素  $\mathcal{H}_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2}$  に関する行列は密行列になるため, 高速多重極法などを用いて高速化することが今

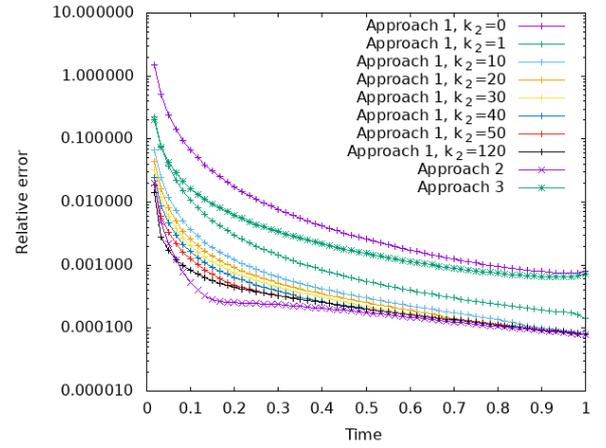


Fig. 3 Relative errors in (10) of Approach 1, 2 and 3.

後の課題として挙げられる。また本稿では基底関数として時空間それぞれの基底関数のテンソル積を用いた一次元の熱方程式という極めて単純な問題を扱ったが, 時空間の区分線形基底を用いる方法や, 空間の次元として高次の空間を考えるなど, より一般的な問題への本手法の適用も今後の課題である。本稿では簡単な数値例を通して, 提案手法のパラメータ  $\varepsilon_i$  を調節し積分範囲を広げることで精度が向上することを確認したが, この点に関する理論的な裏付けは得られておらず, 様々な問題に対してこの性質が成り立つかを調べることも今後の課題である。

## 参考文献

- (1) Olaf Steinbach: Space-time finite element methods for parabolic problems, Computational methods in Applied Mathematics, Vol.15, No.4, PD551-566, 2015.
- (2) Truman Ellis, Jesse Chan and Leszek Demkowicz: Robust DPG methods for transient convection-diffusion, In *Building Bridges: Connections and Challenges in Modern Approaches to Numerical Partial Differential Equations*, pp. 179-203, Springer, 2016.
- (3) Olaf Steinbach, Marc Zank: Coercive space-time finite element methods for initial boundary value problems, Berichte aus dem Institut für Angewandte Mathematik, 2018.
- (4) 新納和樹, 半澤美紗樹, Olaf Steinbach: Hilbert 型変換を用いた一次元熱方程式に対する有限要素法について, 計算数理工学論文集 Vol.19, 19-191201, 2019.
- (5) Olaf Steinbach, Agnese Missoni: A note on a modified Hilbert transform, *Applicable Analysis* Vol.102, pp. 2583-2590, 2023.
- (6) Patrick James Noon: The single layer heat potential and Galerkin boundary element methods for the heat equation, Thesis in the University of Maryland, 1988.



© 著者 2023

本論文集に収録されているすべての論文は、原著論文として計算数理工学論文集 第 23 卷 (2023) に発表されたもので、著作権は著者に属し、特に断らない限りクリエイティブ・コモンズ・ライセンスの CC BY NC ND を採用しています (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>)。

© The author(s) 2023

All the articles in this volume are originally published in Transactions of the Japan Society for Computational Methods in Engineering, Vol.23, 2023, under the terms of the Creative Commons Attribution License CC BY NC ND (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>) unless otherwise noted. The copyright of each article belongs to the author(s).

## 計算数理工学論文集 第 23 卷

---

令和 5 年 11 月 24 日発行  
編集発行：日本計算数理工学会

(問合せ先)  
〒464-8603 名古屋市千種区不老町  
名古屋大学大学院工学研究科 機械システム工学専攻 計算力学研究グループ 内  
日本計算数理工学会・事務局  
TEL: 052-789-2780  
FAX: 052-789-3123

(ホームページ)  
<http://www.matsumoto.nuem.nagoya-u.ac.jp/jascome/>

---

**Printed in Japan / ISSN 1348-5245**