計算数理工学論文集 Vol. 23 (2023 年 11 月)，論文 No. 03-231124 JASCOME

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 [1], 山田　崇恭 [2]

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)

Is 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 [(1)]。

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 [(2)]。

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 [(3)]。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 [(2)] 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[(4)] や Allaire et al.[(5)] 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 [(6)–(10)]。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 [(11)]。これは例えば汎用的な有限要素法と比較して計算コス

2023 年 9 月 27 日受付，2023 年 11 月 3 日受理

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,[11] Colton and Kress,[12] Ammari et al.[13] 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 [11] 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。

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

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 $C^k_{2\pi}$ 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、$\mathcal{U}_{\mathrm{ad}}$ は $C^2_{2\pi}$ の開部分集合である。

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

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

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
- $\mathrm{isom}(X, Y)$: 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

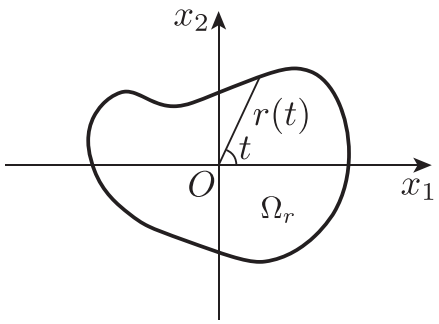

Fig. 1: Parameterized shape Ω_r.

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。

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

Banach 空間 X の開部分集合 U から Banach 空間 Y への写像 $F : U \to Y$ 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

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

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

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 $r \in \mathcal{U}_{\mathrm{ad}}$ 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 Ω_r を次式で定める。

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

周期関数 r が $r \in \mathcal{U}_{\mathrm{ad}}$ 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。

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

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

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

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

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 [11]。

$$u_r(x) = \int_{\partial\Omega_r} \frac{\partial G}{\partial\nu(y)}(x, y)v_r(y)\mathrm{d}s(y) \text{ in } \Omega_r \tag{9}$$

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。

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

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。

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

ここに、外向き単位法線ベクトルを

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

として

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

で定義した。このカーネル k_r は連続であり、特に

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

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、$r \in \mathcal{U}_{\mathrm{ad}}$ 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

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

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 $J : \mathcal{U}_{\mathrm{ad}} \times C_{2\pi} \to \mathbb{R}$ が (r, φ_r) で Fréchet 微分可能であると仮定し、$\mathcal{U}_{\mathrm{ad}} \ni r \mapsto J(r, \varphi_r) =: j(r)$ 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、$\mathcal{U}_{\mathrm{ad}} \ni r \mapsto g_r \in C_{2\pi}$ の Fréchet 微分について考える。$\hat{r} \in C_{2\pi}^2$ とすると

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

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 $\mathcal{U}_{\mathrm{ad}} \ni r \mapsto g_r \in C_{2\pi}$ の Fréchet 微分係数 $g_r' \in \mathcal{L}(C_{2\pi}^2, C_{2\pi})$ は

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

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 $K_r : C_{2\pi} \to C_{2\pi}$ を次式で定義する。

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

カーネル k_r は連続であるから $K_r : C_{2\pi} \to C_{2\pi}$ はコンパクト作用素である。また $\mathcal{U}_{\mathrm{ad}} \ni r \mapsto K_r \in \mathcal{L}(C_{2\pi}, C_{2\pi})$ 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 [11]。

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

ここに、カーネル k_r' は次式で定義される。

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

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。

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

また第二種 Fredholm 方程式 (8) の可解性に関する結果 [11] から任意の $r \in \mathcal{U}_{\mathrm{ad}}$ で $\frac{1}{2}I - K_r \in \mathrm{isom}(C_{2\pi}, C_{2\pi})$ である。よって Banach 空間上の逆写像の微分公式 (Lang,[15] 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 φ に関する J の Fréchet 微分係数が

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

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

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

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 $L : \mathcal{U}_{\mathrm{ad}} \times C_{2\pi} \times C_{2\pi} \to \mathbb{R}$ を次式で定義する。

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

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。

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

ここで K_r はコンパクト作用素であり従って $\frac{1}{2} I - K_r : C_{2\pi} \to C_{2\pi}$ 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。

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

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。

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

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 $j : \mathcal{U}_{\mathrm{ad}} \to \mathbb{R}$ 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

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

となる関数 ψ 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 [5] 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,[16] 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

$$
\begin{aligned}
H_{2\pi}^k := \Bigg\{ & \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_m \mathrm{e}^{\mathrm{i}mt} : c_m \in \mathbb{C}, \\
& \sum_{m=-\infty}^{\infty} (1 + m^2)^k |c_m|^2 < \infty \Bigg\}
\end{aligned}
\tag{31}
$$

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。

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

$$
\varphi_m = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \varphi(t) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}mt} \mathrm{d}t \tag{33}
$$

$$
\psi_m = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \psi(t) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}mt} \mathrm{d}t \tag{34}
$$

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。

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

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) を数値的に解く。まず $C_{2\pi}$ の $2N$ 次元部分空間として

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

を選ぶ。V_h の基底として、節点を $t = t_j := \pi j / N$ $(j = 0, 1, \ldots, 2N-1)$ とする以下の Lagrange 基底関数 $L_j \in V_h$ $(j = 0, \ldots, 2N-1)$ 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 $\Phi_j^r \in \mathbb{R}$ $(j = 0, \ldots, 2N-1)$ 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。

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

ここに、係数行列は次式で与えられる。

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

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。

$$\begin{aligned}U_h := \mathrm{span}\{&1, \cos t, \cos 2t, \ldots, \cos(M-1)t \\ &\sin t, \sin 2t, \ldots, \sin(M-1)t\}\end{aligned} \tag{43}$$

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

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

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。

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

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。

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

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

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

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

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 $l : U \to \mathbb{R}$ 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 $w_1, \ldots, w_M$ により構成される部分空間

$$X_h = \mathrm{span}\{w_1, w_2, \ldots, w_M\} \tag{50}$$

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

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

ここに、$l'(w) \in X^*$ は $l : U \to \mathbb{R}$ 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 $j : \mathcal{U}_{\mathrm{ad}} \to \mathbb{R}$ にこの discretize-then-optimize 法を適用すると次式を得る。

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

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

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

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 $r_0 \in \mathcal{U}_{\mathrm{ad}}$ となるように与えて、以下のアルゴリズムで $r_1, r_2, \ldots \in U_h$ を計算する。

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

ここで、ステップ幅 $\varepsilon_i > 0$ は $r_{i+1} \in \mathcal{U}_{\mathrm{ad}}$ 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

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

を満たすようにステップ幅 ε_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

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

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

ε	$\langle j'(r), \hat{r}\rangle_{C^2_{2\pi}}$	$j(r+\hat{r}) - j(r)$
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

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

となり、また式 (28) 右辺第一項は次式となる。

$$\begin{aligned}
&\langle \mathrm{d}_r J(r,\varphi), \hat{r}\rangle_{C^2_{2\pi}} \\
&= \int_0^{2\pi} \frac{1}{2\pi|\bar{x}-h_r(\tau)|^2}\Bigg[|h'_{\hat{r}}(\tau)|\nu_{\hat{r}}(\tau)\cdot(\bar{x}-h_r(\tau)) \\
&\quad - |h'_r(\tau)|\nu_r(t)\cdot h_{\hat{r}}(t) + \frac{2(\bar{x}-h_r(\tau))\cdot h_{\hat{r}}(\tau)}{|x-h_r(\tau)|^2} \\
&\quad \times |h'_r(\tau)|\nu_r(\tau)\cdot(\bar{x}-h_r(\tau))\Bigg]\varphi(\tau)\mathrm{d}\tau
\end{aligned} \tag{59}$$

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

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

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。

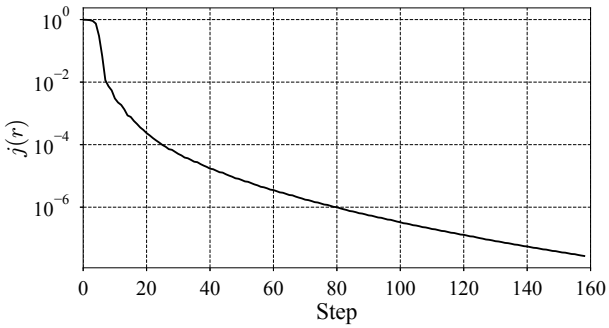

Fig. 2: Convergence history of the objective functional j.

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 $\|\nabla_h j(r)\|_{H^k_{2\pi}} < 10^{-4}$、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 $H^k_{2\pi} = L^2[0,2\pi] \not\subset C^2_{2\pi}$ 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)

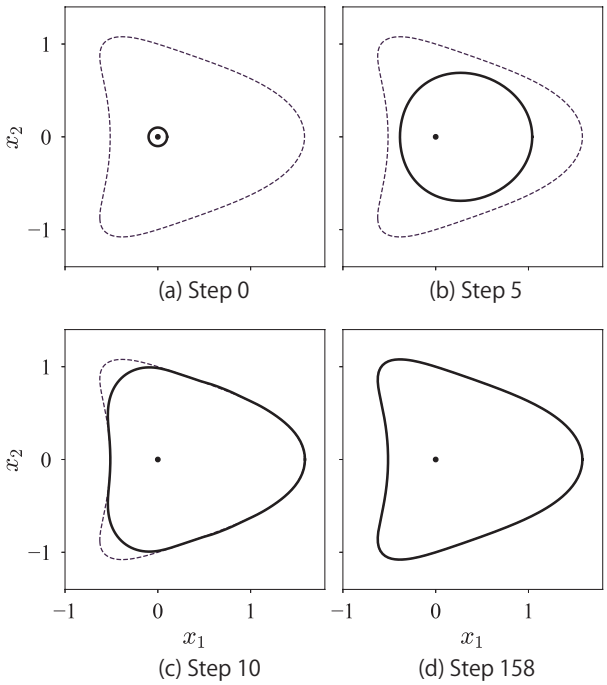

Fig. 3: Obtained shapes during the shape optimization for $k = 3$. The dotted lines represent the zero isoline of f. The dot indicates the observation point $\bar{x} = (0, 0)^T$.

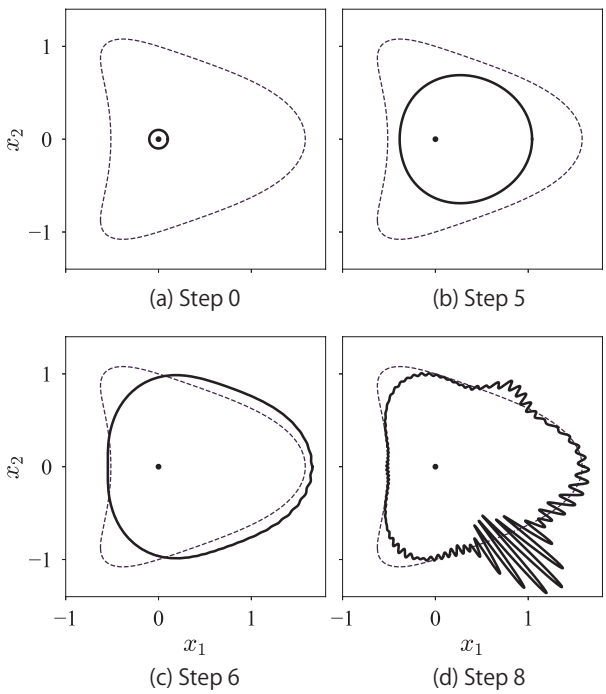

Fig. 4: Obtained shapes during the shape optimization for $k = 0$. The dotted lines represent the zero isoline of f. The dot indicates the observation point $\bar{x} = (0, 0)^T$.

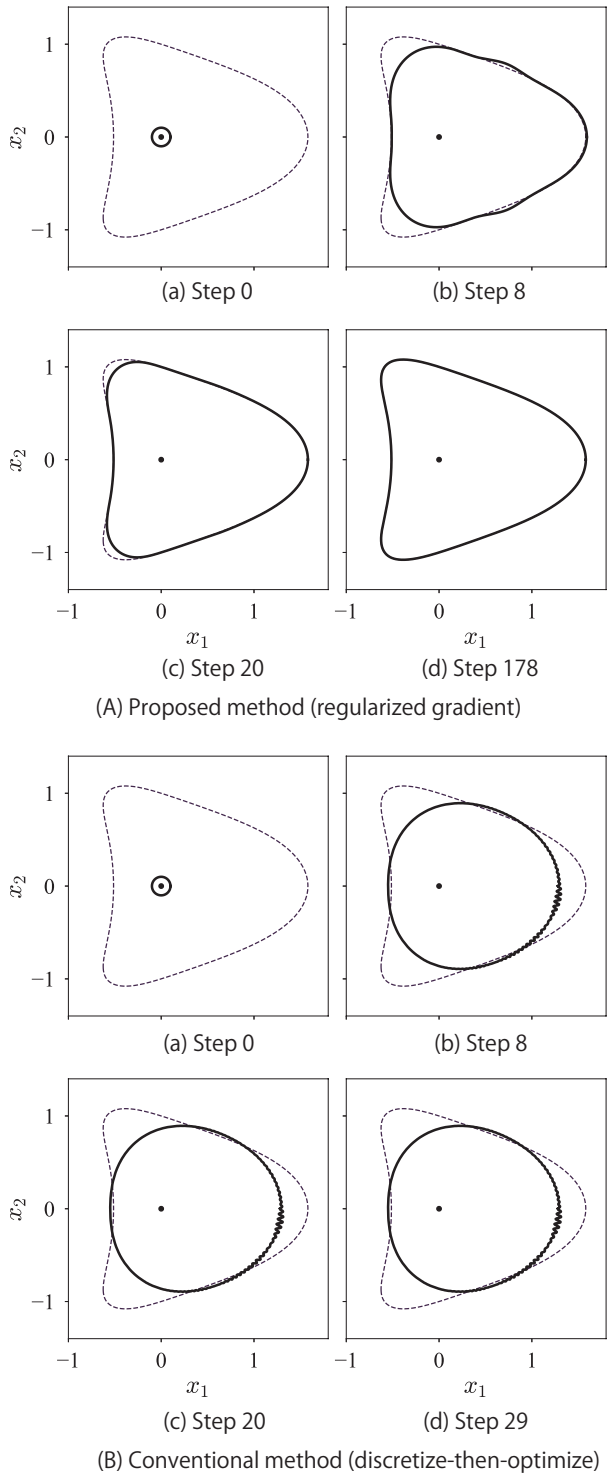

Fig. 5: Obtained shapes during the shape optimization with the regularized-gradient approach (A) and discretize-then-optimize method (B). The dotted lines represent the zero isoline of f. The dot indicates the observation point $\bar{x} = (0, 0)^T$.

任意の $r \in \mathcal{U}_{\mathrm{ad}}$ 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[12] 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.