

Building-Cube 法に基づく 大規模非定常流れのトポロジー最適化

Topology Optimizaion of Large-Scale Transient Flow
based on the Building-Cube Method

勝又稜平¹⁾西口浩司²⁾干場大也³⁾加藤準治⁴⁾
Ryohei Katsumata, Koji Nishiguchi, Hiroya Hoshiba, Junji Kato

¹⁾名古屋大学 大学院工学研究科 (〒 464-8603 愛知県名古屋市千種区不老町名古屋大学工学部 8 号館北棟 3 階,

E-mail: katsumata.ryohei.a3@s.mail.nagoya-u.ac.jp)

²⁾博(工) 名古屋大学 大学院工学研究科 准教授, E-mail: kojinishiguchi@nagoya-u.ac.jp

³⁾博(工) 名古屋大学 大学院工学研究科 助教, E-mail: hiroyahoshiba@nagoya-u.ac.jp

⁴⁾Dr.-Ing. 名古屋大学 大学院工学研究科 教授, E-mail: junjikato@civil.nagoya-u.ac.jp

Recently, topology optimization methods have been applied not only to structural problems but also to fluid flow problems. Our research focuses on topology optimization for unsteady flows, which are important from an engineering point of view. However, unsteady flow topology optimization requires a fine mesh and hence a huge computational cost. Therefore, we propose a large-scale unsteady flow topology optimization based on the building-cube method (BCM), which is suitable for massively parallel computing. BCM is one of the hierarchical Cartesian mesh methods and is confirmed to have good scalability. The governing equations are discretized by a cell-centered finite volume method based on the BCM, and the sensitivity of the objective function is computed by a sensitivity analysis based on the continuous adjoint method. Several numerical examples will be used to discuss its applicability to large-scale computations.

Key Words : Topology optimization, Unsteady flow, Building-cube method, Finite volume method

1. 緒言

トポロジー最適化は、物理的・数学的な理論に基づいて最適な設計を行う手法の一つであり、最も自由度の高い設計を可能とする最適化手法である。固体力学問題を対象として発展してきたトポロジー最適化は、近年は流体・熱伝導・電磁気・音響など、様々な物理現象に対してその理論が拡張されている。

流体問題のトポロジー最適化は、定常 Stokes 流を対象としたトポロジー最適化 [1] から、定常の Navier-Stokes 流を対象としたもの [2] へと拡張されていった。Zhou ら [3] は、レベルセット法を用いて定常 Navier-Stokes 流のトポロジー最適化を行っている。以上の流体トポロジー最適化の研究では、定常状態が仮定されている。

それらに対して、Deng ら [4] や Kreissl ら [5] は非定常流に対するトポロジー最適化手法を提案している。非定常流に対しても、レベルセット法を用いてトポロジー最適化を行った例 [6][7] が存在する。こういった非定常流体に対するトポロジー最適化では、定常流と比べて大きな計算コストが必要となるため、既往の研究 [8] では最大でも約 50 万の格子解像度となっており、扱うことのできる非定常流体問題は限られている。したがって、より広範な非定常流体問題のトポロジー最適化を行うために、大規模計算に適した手法、すなわち並列化効率の高い数値解法が必要である。

一方、近年の並列計算機の指數関数的性能向上により、高解像度の計算メッシュを用いた並列計算が可能と

なりつつある。そういった大規模計算に有効な手法として、階層型直交メッシュ法の一種である building-cube 法 (building-cube method; BCM) [9] が提案されている。高い並列化効率を有し、メッシュの局所細分化による複雑形状のメッシュ生成が容易であることから、Navier-Stokes 流 [10][11][12] や流体・固体連成問題 [13][14] のシミュレーションにおいて、近年注目を集めている。BCM の並列化性能に関する研究 [15] では、Wiener スケーリングで高い並列化効率を誇ることが報告されている。

以上の背景を踏まえ、我々は大規模並列計算に適する BCM を用いた非定常流れトポロジー最適化手法を提案する。トポロジー最適化における非定常 Navier-Stokes 方程式は、BCM に基づくセル中心有限体積法により離散化する。目的関数の感度は随伴変数法に基づく連続的感度解析によって求める。

2. 支配方程式

計算領域 $\Omega \subset \mathbb{R}^N (N = \{2, 3\})$ において、位置 $x \in \Omega$ および時刻 $t \in [0, T]$ における速度、圧力、外力をそれぞれ \mathbf{u} , p , \mathbf{f} とする。このとき、非定常・非圧縮性流れの支配方程式である、運動方程式 (Navier-Stokes 方程式) および連続の式は以下の式で表せる。

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \mu \nabla \cdot [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^\top] + \mathbf{f}, \quad \text{in } \Omega \times [0, T] \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad \text{in } \Omega \times [0, T] \quad (2)$$

ここで、 ρ は質量密度、 μ は粘性係数である。速度には、以下の初期条件 \mathbf{u}_0 を与える。

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{u}_0(\mathbf{x}), \quad \text{in } \Omega \quad (3)$$

また、ディリクレ境界 Γ_D およびノイマン境界 Γ_N において、以下の境界条件 \mathbf{u}_D および \mathbf{g} を与える。

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}_D(\mathbf{x}, t), \quad \text{on } \Gamma_D \times [0, T] \quad (4)$$

$$\{-p\mathbf{I} + \mu[\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^\top]\} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{g}(\mathbf{x}, t), \quad \text{on } \Gamma_N \times [0, T] \quad (5)$$

ここで、 \mathbf{I} は単位テンソル、 \mathbf{n} は境界 $\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N$ における外向き単位法線ベクトルである。

固体領域については、先行研究 [1] において、速度 $\mathbf{u} = \mathbf{0}$ となるように埋め込み境界法に基づく仮想的な外力を与える手法が提案されている。これを密度法によるトポロジー最適化に適用し、以下の式で表される仮想外力を計算領域 Ω に与える。

$$\mathbf{f} = -\alpha\mathbf{u} \quad (6)$$

ここで、 α は固体を多孔質体として仮定したときの透過抵抗係数を表す。透過抵抗係数 α は、各計算セルの流体体積率を表す最適化設計変数 $\gamma(\mathbf{x}) \in [0, 1]$ ($\gamma = 0$ のとき固体、 $\gamma = 1$ のとき流体) を用いて次式で表される。

$$\alpha(\gamma) = \alpha_{\min} + (\alpha_{\max} - \alpha_{\min}) \frac{q(1-\gamma)}{q+\gamma} \quad (7)$$

ここで、 α_{\min} 、 α_{\max} はそれぞれ α の最小値、最大値であり、 $q (> 0)$ は式 (7) で表される α の補間関数において、凸性を制御するためのパラメータである。 $\alpha_{\min} = 0$ 、 $\alpha_{\max} = \infty$ とすることで、流体領域の流れ場には影響を及ぼさず、固体領域では速度をほとんどゼロにすることができる。ただし、数値解析上、無限大の値は扱うことができないため、 α_{\max} については十分大きな有限の値を設定する。

3. トポロジー最適化問題

上述の支配方程式を用いて、非定常・非圧縮性流れに対するトポロジー最適化問題を以下のように設定する。

$$\min J(\mathbf{u}, p; \gamma) \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \text{s.t. } & \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \\ &= -\nabla p + \mu \nabla \cdot [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^\top] - \alpha \mathbf{u}, \quad \text{in } \Omega \times [0, T] \end{aligned} \quad (9)$$

$$-\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad \text{in } \Omega \times [0, T] \quad (10)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{u}_0(\mathbf{x}), \quad \text{in } \Omega \quad (11)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}_D(\mathbf{x}, t), \quad \text{on } \Gamma_D \times [0, T] \quad (12)$$

$$\begin{aligned} & \{-p\mathbf{I} + \mu[\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^\top]\} \cdot \mathbf{n} \\ &= \mathbf{g}(\mathbf{x}, t), \quad \text{on } \Gamma_N \times [0, T] \end{aligned} \quad (13)$$

$$G(\gamma) = \frac{1}{V_0} \int_{\Omega_D} \gamma \, d\Omega \leq \theta \quad (14)$$

$$0 \leq \gamma \leq 1 \quad (15)$$

ここで、 $J(\mathbf{u}, p; \gamma)$ は目的関数、 $G(\gamma)$ は体積制約関数であり、 $V_0 = \int_{\Omega_D} d\Omega$ は設計領域 Ω_D の体積、 $\theta \in (0, 1]$ は

流体領域の体積割合上限である。式 (9)–(13) は支配方程式による等式制約、式 (14)–(15) は流体領域の体積上限や設計変数の上限・下限による不等式制約を表している。式 (9) の外力項 \mathbf{f} に式 (6) で示した仮想的な外力を用いることで、固体領域を含む計算領域を統一的に取り扱う。なお、感度解析において得られる随伴方程式を簡単にするため、式 (10) に示す連続の式に負符号を用いている。目的関数 J は、抵抗力および流体粘性によるエネルギー散逸とし、以下のように設定する。

$$\begin{aligned} J(\mathbf{u}, p; \gamma) = & \int_0^T \int_{\Omega} \alpha \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \, d\Omega \, dt \\ &+ \int_0^T \int_{\Omega} \frac{\mu}{2} [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^\top] : [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^\top] \, d\Omega \, dt \end{aligned} \quad (16)$$

勾配法に基づいて設計変数を更新し、最適形状を求めるためには、設計変数の微小変動 $\delta\gamma$ に対する目的関数や制約関数の変動量（感度）を求める必要がある。本研究では、連続随伴変数法 [16] を用いた目的関数の感度の導出を行う。 $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t)$ 、 $\tilde{p}(\mathbf{x}, t)$ を随伴変数とし、以下に示す随伴方程式を満足する $\tilde{\mathbf{u}}$ 、 \tilde{p} を求める。

$$\begin{aligned} & -\rho \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} - \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \tilde{\mathbf{u}} + \rho(\nabla \mathbf{u})^\top \tilde{\mathbf{u}} \\ &= -\nabla \tilde{p} + \mu \nabla \cdot [\nabla \tilde{\mathbf{u}} + (\nabla \tilde{\mathbf{u}})^\top] \\ &+ 2\mu \nabla \cdot [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^\top] - \alpha \tilde{\mathbf{u}} - 2\alpha \mathbf{u}, \quad \text{in } \Omega \times [0, T] \end{aligned} \quad (17)$$

$$-\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} = 0, \quad \text{in } \Omega \times [0, T] \quad (18)$$

$$\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, T) = \mathbf{0}, \quad \text{in } \Omega \quad (19)$$

$$\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{0}, \quad \text{on } \Gamma_D \times [0, T] \quad (20)$$

$$\begin{aligned} & \{-\tilde{p}\mathbf{I} + \mu[\nabla \tilde{\mathbf{u}} + (\nabla \tilde{\mathbf{u}})^\top]\} \cdot \mathbf{n} \\ &= -\rho(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) \tilde{\mathbf{u}} - 2\mu[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^\top] \cdot \mathbf{n}, \quad \text{on } \Gamma_N \times [0, T] \end{aligned} \quad (21)$$

式 (17)–(21) によって求めた随伴変数を用いると、目的関数の変動 δJ は次の式で求められる。

$$\begin{aligned} \delta J = & \int_0^T \int_{\Omega} \left[-(\alpha_{\max} - \alpha_{\min}) \frac{q(q+1)}{(q+\gamma)^2} \right. \\ & \left. (\mathbf{u} \cdot \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \tilde{\mathbf{u}}) \right] \delta\gamma \, d\Omega \, dt \end{aligned} \quad (22)$$

なお、式 (14) に示す体積制約関数 G の感度 δG は、次式によって陽的に計算することができる。

$$\delta G = \frac{1}{V_0} \int_{\Omega_D} \delta\gamma \, d\Omega \quad (23)$$

得られた感度を用いて、勾配法に基づいて設計変数を更新し、最適解の探索を行う。

4. 数値解析手法

支配方程式 (9)–(13) および随伴方程式 (17)–(21) は、フラクショナルステップ法を用いて解かれる。フラクショナルステップ法は、速度場と圧力場を分離して時間進行を行う数値解法であり、次の手順で計算される。

1. 中間速度を計算する。
2. 中間速度を用いて、圧力ポアソン方程式より次ステップの圧力を計算する。

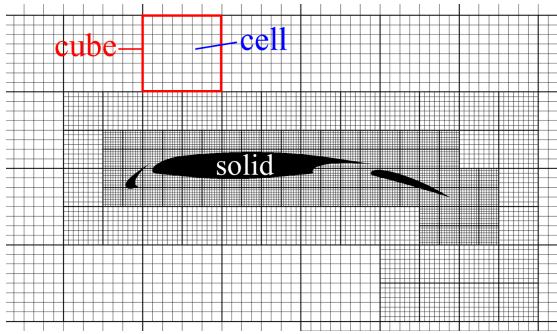


図-1 BCMによるメッシュ分割の例

3. 中間速度および圧力を用いて、速度修正式より次ステップの速度を計算する。

本論文では、データ構造が簡素なセル中心有限体積法を用いて空間方向に離散化を行う。すなわち、速度 u 、圧力 p 、設計変数 γ はセル中心において定義するコロケート配置法を用いる。中間速度を求める際は、移流項および粘性応力項は2次精度中心差分法で離散化される。圧力ポアソン方程式は、圧力項を2次精度中心差分法で離散化し、Red/Black オーダリングにより色分けされた逐次過緩和法（Successive Over Relaxation Method; SOR 法）により解く。その際、Rhe-Chow 法を用いて圧力振動を回避する。なお、随伴方程式で初期条件にあたる式(19)は、時刻 $t = T$ における条件式となっているため、随伴方程式は時間に関して逆方向に解していく必要がある点に注意が必要である。

前述したように、非定常流に対するトポロジー最適化では詳細なメッシュ分割が必要となり、膨大な計算コストを要する。そのため、本研究では大規模並列計算に適した building-cube 法 (BCM) に基づくセル中心有限体積法により支配方程式を離散化し、超並列計算機を使用して計算を行う。BCM は階層型直行メッシュ法の一種であり、図-1 に示すように、計算領域は「キューブ」と呼ばれる立方体領域に分割され、各キューブは等間隔で同数のセルにさらに分割される。並列計算の際、各計算コアには同数のキューブが割り当てられ、各キューブ内で空間ループ処理が実行される。これにより、各コアは同数のセルを分担することになるため、各コアの計算不可が均一となる。さらに、簡素なデータ構造により、メモリアクセスが局所的かつ連続的になりやすい。このような計算負荷の均一化やメモリアクセスの局所化・連続化により、BCM では高い並列化効率を得ることが可能である。また、BCM は各セルのコネクティビティ情報が不要なため、メッシュデータのファイルサイズやメモリ使用量が抑えられるという特長がある。

5. 数値解析例

数値計算例の一部として、ここでは3次元絞り管問題を示す。3次元の立方体領域（寸法 $1 \times 1 \times 1$ ）を計算領域 Ω とし、時刻 $t \in [0, T]$ においてトポロジー最適化を行う。計算領域 Ω および設計領域 Ω_D の寸法・境界条件を図-2 に示す。流入境界ではポアズイユ流れを仮定し、速度の法線成分 u_n として、以下の形で非定常流

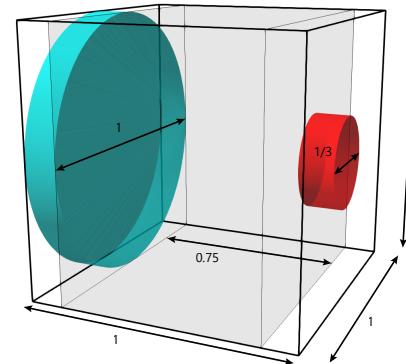


図-2-a 寸法

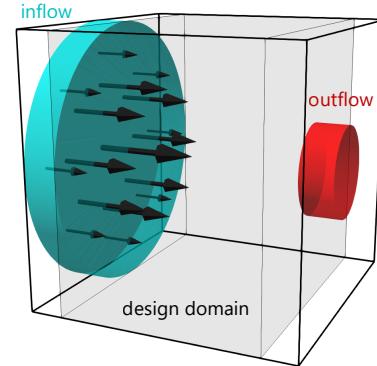


図-2-b 境界条件

図-2 計算領域 Ω および設計領域 Ω_D

入速度を与えていた。

$$u_n = \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right) \sin^2 \frac{\pi t}{2T} \quad (24)$$

ここで、 r は円形の流入境界の中心からの距離、 R は円形の流入境界の半径である。本計算例では $R = 0.5$ とし、したがって $0 \leq r \leq 0.5$ である。また、最終時刻 $T = 0.1$ としている。

トポロジー最適化における流体体積制約の上限値は、 $\theta = 0.2$ （設計領域 Ω_D の体積の 20%）としている。BCM に基づき、計算領域 Ω を 4096 個のキューブに分割し、約 1700 万セルの計算メッシュを生成、4096 並列でトポロジー最適化計算を実施した。

最適化結果として得られた最適構造を、初期構造および最適化過程とともに図-3 に示す。図の灰色の領域が流体領域を表している。図より、非定常流入条件を有する3次元計算において、提案手法を用いてグレースケールの少ない明瞭な構造が得られたことが定性的に確認できる。また、総セル数が約 1700 万のメッシュを用いた3次元計算でも、提案手法によりトポロジー最適化が可能であることが示された。

さらに、最適構造において流れが適切に制御できているか確認するため、得られた最適構造における流れ場の計算を行った。計算結果として、速度ベクトル場を図-4 に示す。図の灰色の領域は、図-3-f の最適構造を表している。得られた最適構造によって、図のように流れが制御できていることが確認できる。

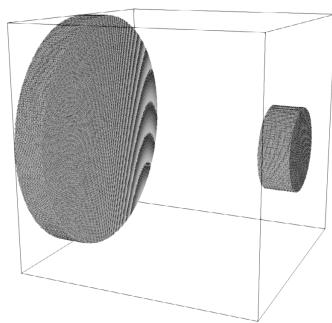


図-3-a 0 step (initial)

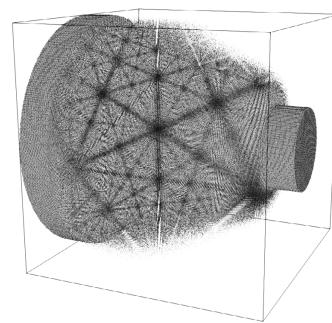


図-3-b 100 step

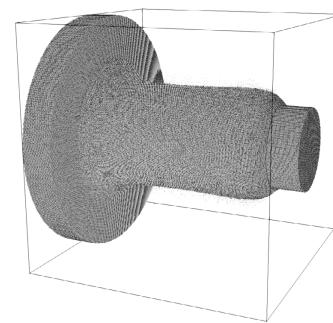


図-3-c 200 step

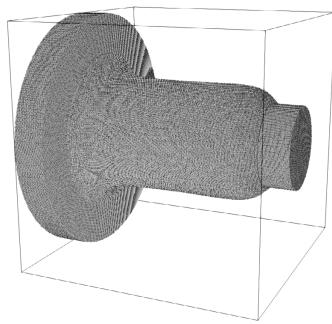


図-3-d 300 step

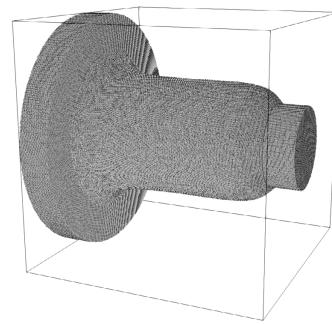


図-3-e 400 step

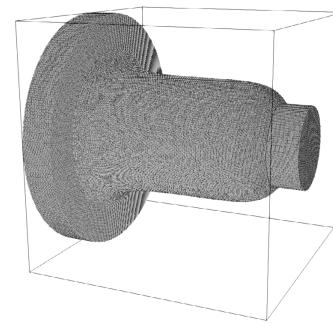


図-3-f 496 step (optimal)

図-3 最適化過程および最適化結果

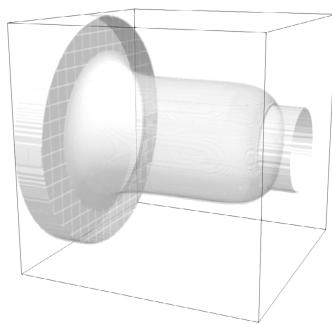
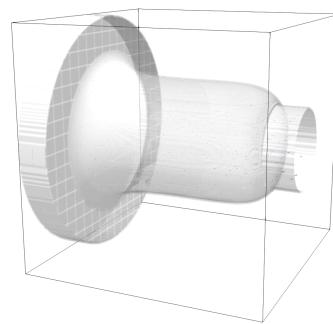
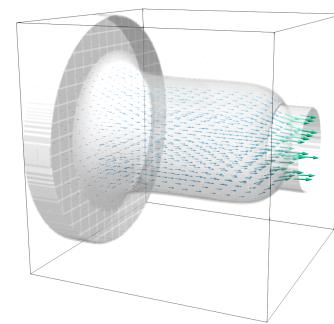
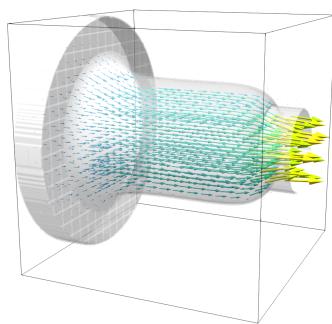
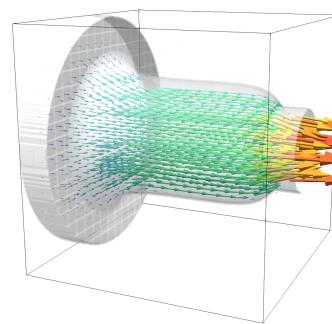
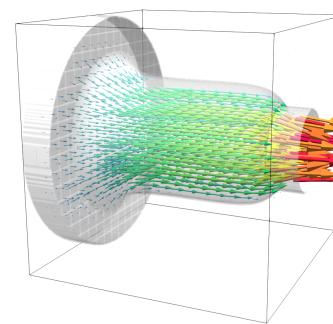
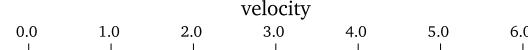
図-4-a $t = 0$ 図-4-b $t = 0.02$ 図-4-c $t = 0.04$ 図-4-d $t = 0.06$ 図-4-e $t = 0.08$ 図-4-f $t = 0.1$ 

図-4 最適構造における速度場

6. 結言

本研究では、大規模並列計算に適する BCM に基づくセル中心有限体積法を用いた、非定常流体のトポロジー最適化手法を提案した。トポロジー最適化における数値解析手法や数値解析例の詳細については、講演会の当日に紹介予定である。

参考文献

- [1] Borrvall, T. and Petersson, J.: Topology optimization of fluids in stokes flow, *International journal for numerical methods in fluids*, Vol.41, No.1, pp.77–107, 2003.
- [2] Gersborg-Hansen, A., Sigmund, O., and Haber, R. B.: Topology optimization of channel flow problems, *Structural and multidisciplinary optimization*, Vol.30, pp.181–192, 2005.
- [3] Zhou, S. and Li, Q.: A variational level set method for the topology optimization of steady-state navier-stokes flow, *Journal of Computational Physics*, Vol.227, No.24, pp.10178–10195, 2008.
- [4] Deng, Y., Liu, Z., Zhang, P., Liu, Y., and Wu, Y.: Topology optimization of unsteady incompressible navier-stokes flows, *Journal of Computational Physics*, Vol.230, No.17, pp.6688–6708, 2011.
- [5] Kreissl, S., Pingen, G., and Maute, K.: Topology optimization for unsteady flow, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol.87, No.13, pp.1229–1253, 2011.
- [6] Deng, Y., Zhang, P., Liu, Y., Wu, Y., and Liu, Z.: Optimization of unsteady incompressible navier-stokes flows using variational level set method, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol.71, No.12, pp.1475–1493, 2013.
- [7] Coffin, P. and Maute, K.: A level-set method for steady-state and transient natural convection problems, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, Vol.53, pp.1047–1067, 2016.
- [8] Chen, C., Yaji, K., Yamada, T., Izui, K., and Nishiwaki, S.: Local-in-time adjoint-based topology optimization of unsteady fluid flows using the lattice boltzmann method, *Mechanical Engineering Journal*, Vol.4, No.3, pp.17–00120, 2017.
- [9] Nakahashi, K.: Building-cube method for flow problems with broadband characteristic length, *Computational Fluid Dynamics 2002: Proceedings of the Second International Conference on Computational Fluid Dynamics, ICCFD, Sydney, Australia, 15–19 July 2002*, pp. 77–81, Springer, 2003.
- [10] Kim, L., Nakahashi, K., Jeong, H., and Ha, M.: High-density mesh flow computations by building-cube method, *Journal of mechanical science and technology*, Vol.21, pp.1306–1319, 2007.
- [11] Onishi, K., Tsubokura, M., Obayashi, S., and Nakahashi, K.: Vehicle aerodynamics simulation for the next generation on the k computer: part 2 use of dirty cad data with modified cartesian grid approach, *SAE International Journal of Passenger Cars-Mechanical Systems*, Vol.7, No.2014-01-0580, pp.528–537, 2014.
- [12] Jansson, N., Bale, R., Onishi, K., and Tsubokura, M.: Cube: A scalable framework for large-scale industrial simulations, *The international journal of high performance computing applications*, Vol.33, No.4, pp.678–698, 2019.
- [13] 西口浩司, 岡澤重信, 坪倉誠, et al.: 大規模並列計算に適した階層型直交メッシュ法による完全オイラー型固体-流体連成解析, 土木学会論文集 A2(応用力学), Vol.73, No.2, pp.I-153–I-163, 2017.
- [14] Nishiguchi, K., Bale, R., Okazawa, S., and Tsubokura, M.: Full eulerian deformable solid-fluid interaction scheme based on building-cube method for large-scale parallel computing, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol.117, No.2, pp.221–248, 2019.
- [15] Ando, K., Bale, R., Li, C., Matsuoka, S., Onishi, K., and Tsubokura, M.: Digital transformation of droplet/aerosol infection risk assessment realized on “fugaku” for the fight against covid-19, *The International Journal of High Performance Computing Applications*, Vol.36, No.5-6, pp.568–586, 2022.
- [16] Othmer, C.: A continuous adjoint formulation for the computation of topological and surface sensitivities of ducted flows, *International journal for numerical methods in fluids*, Vol.58, No.8, pp.861–877, 2008.