計算工学講演会論文集 Vol. 29 (2024 年 6 月) 日本計算工学会

FFT-based 均質化法に基づくミクロスケールトポロジー最適化の熱・流体問題への適用

Application of Microscale Topology Optimization using FFT-based Homogenization Method to Thermal and Fluid Problems

高荒圭佑 1) 干場大也 2)西口浩司 3)加藤準治 4)
Keisuke Takaara, Hiroya Hoshiba, Koji Nishiguchi and Junji Kato

1)名古屋大学 大学院工学研究科（〒 464-8601 愛知県名古屋市千種区不老町, E-mail: takaara.keisuke.c9@s.mail.nagoya-u.ac.jp)
2)博 (工) 名古屋大学 大学院工学研究科 助教（E-mail: hiroyahoshiba@civil.nagoya-u.ac.jp）
3)博 (工) 名古屋大学 大学院工学研究科 准教授（E-mail: kojinishiguchi@civil.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）

The aim of this study is to apply the numerical analysis methods based on the Fast Fourier Transform (FFT) to the framework of the inverse homogenization method for thermal and fluid problems. The micro-scale domain to be designed consists of solid and fluid domains, and its structure is assumed to be periodic. The Stokes equation and the thermal advection-diffusion equations are defined as the governing equations on the micro scale, which are solved using a FFT-based homogenization algorithm. Specifically, the unknown variables in the governing equations are approximated using Fourier series, and the solution method is based on the fixed-point iteration method. The objective function of the optimization problem is a component of the homogenized thermal conductivity tensor, and its sensitivity is analyzed based on the continuous adjoint variable method. Several optimization computations are performed using the proposed method, and the results are discussed.

Key Words : *Topology optimization, thermal and fluid problems, inverse homogenization method, fast Fourier transform*

1. 緒言

電子部品や機械を適切な動作温度に保つため，これらの効率的な冷却は重要な課題である．このような背景から，製品開発の初期段階から合理的な熱および流体の流れを考慮したものづくり，特にトポロジー最適化を駆使した新しい設計プロセスが注目を集めている．

熱・流体問題を対象としたトポロジー最適化の最初期の研究は，Dede [1] や Yoon [2] による研究である．Dede は，流体のエネルギー損失と解析領域の平均的な温度の両者の重み付き和を目的関数としたトポロジー最適化を実施している．Yoon は，熱入力部の温度上昇を抑制するための構造設計問題を紹介している．その後，熱・流体問題のトポロジー最適化は，冷却流路設計問題，自然対流問題，非定常問題，乱流問題など様々な設計問題に展開されている [3].

上記の先行研究では，設計対象となる構造の巨視的構造の最適化を行うのが主流である．これに対して多孔質構造やラティス構造などのような微視的構造を有する構造を前提として，その設計にマルチスケールトポロジー最適化手法を導入するアプローチも存在する．マルチスケールトポロジー最適化は，構造物の微視的構造（ミクロ構造）を設計することで，所望の性能を発揮させる設計手法である．ミクロ構造を適切に設計することで，例えば軽量性，衝撃吸収性，遮音性，断熱性などの様々な特性を発揮させることが可能である．それゆえに，これらの機能を付与した機能性材料を創生するための研究・開発が盛んである．本研究では，熱交換器のさらなる性能向上を期待し，その設計にマルチスケールトポロジー最適化手法を応用することを目指す．ここでは，その基礎的な検討としてミクロ構造の均質化特性を制御するための最適設計手法を構築する．

熱・流体問題を対象とした構造最適化分野において，ミクロ構造の設計手法に関する研究はいくつか挙げられる [4,5,6,7]．Takezawa ら [4] や Geng ら [5] は，ミクロ構造に占める固体部分 (あるいは流体部分) の割合のマクロ的な分布関数を設計変数としている．ミクロ構造のトポロジーは単純な形状を予め仮定した上で，ミクロ構造をなす特定の部材寸法を設計変数の値に応じて変化させるというアプローチである．一方で，Francisco ら [6] や Sukulthanasorn ら [7] は，逆均質化法 (inverse homogenization method) [8,9] に基づきミクロ構造の設計手法を紹介している．これらは，ミクロ構造のトポロジーは仮定せず，それ自体の設計を目的としたものである．Francisco ら [6] は，均質化熱伝導係数の成分を最適化するために，熱・流体問題を考慮したミクロ構造の設計手法を提案した．ここでは，熱の移流・拡散問題の均質化問題の導出方法として，two scale asymptotic expansion with drift approach [10] が用いられている．Sukulthanasorn ら [7] は，非定常熱伝導問題を対象として，ミクロ構造の寸法効果を考慮可能なミクロ・マクロ同時トポロジー最適化手法 (concurrent topology optimization method) を提案している．

ところで，上記のミクロ境界値問題の数値解法として，有限要素法 (Finite element method: FEM) を用いるのが主流である．一方で近年，FEM を代替するより効率的なミクロ境界値問題の数値解法として高速フーリエ変換 (Fast Fourier Transform: FFT) に基づく数値解法が注目されている [11]．FFT に基づく均質化手法をトポロジー最適化に応用した報告は，松井ら [13] や Chen ら [12] による線形弾性問題を対象とした研究が挙げられる．中でも松井ら [13] は，FEM との比較検証により，計算時間とメモリ使用量の観点から FFT に基づく数値解析手法の優位性を報告している．また，松井らは，高解像度のミクロ構造を前提としてトポロジー最適化を行うことで，低解像度の場合と比較してより優れたトポロジーが得られることを示している．これらの結果に着目し，本研究においても FFT に基づく均質化アルゴリズムを採用する．

以上の背景から，本研究では，FFT を駆使した熱・流体問題に対する逆均質化手法の開発を行う．ここでは，Francisco ら [6] の手法に基づき，順解析および随伴解析を FFT に基づくアルゴリズムに置き換えることで，計算効率に優れた新たな最適化手法を構築する．次節以降の構成として，はじめにミクロ支配方程式と，その数値解法について述べる．次に最適化問題の定式化について記述する．最適化アルゴリズムは勾配法を用いる．目的関数は均質化熱伝導係数テンソルの成分とし，その設計変数による勾配は随伴変数法に基づき導出する．本手法をいくつかの最適化計算例に適用し，その結果について考察する．

2. 均質化問題

(1) 支配方程式

周期的なミクロ構造からなる多孔質体内部の流体および熱の流れを考える．周期的なミクロ構造をユニットセルと呼び，Y と表す．ユニットセルは流体領域 Y_{f} と固体領域 Y_{s} からなり，Y_{f} と Y_{s} は $Y_{\mathrm{f}} \cup Y_{\mathrm{s}} = Y$ および $Y_{\mathrm{f}} \cap Y_{\mathrm{s}} = \emptyset$ を満足するものとする．

Stokes 方程式に支配される流れの場合，ミクロ境界値問題として Stokes 方程式、マクロスケールの方程式として Darcy 則が導かれる．ここでは，Allaire [14] に倣い，ミクロ境界値問題として以下の Stokes 方程式と流速に対する周期境界条件を定義する．

$$\begin{aligned} -Pr\frac{\partial^2 u_i}{\partial y_j^2} + G_i + \frac{\partial p}{\partial y_i} &= 0 \quad \text{in } Y_{\mathrm{f}} \\ \frac{\partial u_j}{\partial y_j} &= 0 \quad \text{in } Y_{\mathrm{f}} \\ u_i &= 0 \quad \text{in } Y_{\mathrm{s}} \\ u_i, p &\text{ is } Y\text{-periodic} \end{aligned} \tag{1}$$

ここで，u_i および p, Pr, G_i はそれぞれ流速，圧力，プラントル数，マクロ圧力勾配である．

熱の移流･拡散問題に対するミクロ･マクロスケールの支配方程式の導出手順は，two scale asymptotic expansion with drift approach [10] に基づき Francisco ら [6] により示されている．この文献に倣い，ミクロ境界値問題として以下の移流・拡散問題を考える．

$$\begin{aligned} Pe_{\mathrm{loc}}u_j\left(\frac{\partial T}{\partial y_j}+E_j\right) - \frac{\partial}{\partial y_j}\left(k_{\mathrm{f}}\left(\frac{\partial T}{\partial y_j}+E_j\right)\right) - Pe_{\mathrm{loc}}\bar{u}_jE_j &= 0 \\ \text{in } Y_{\mathrm{f}}& \\ -\frac{\partial}{\partial y_j}\left(k_{\mathrm{s}}\left(\frac{\partial T}{\partial y_j}+E_j\right)\right) - Pe_{\mathrm{loc}}\bar{u}_jE_j &= 0 \\ \text{in } Y_{\mathrm{s}}& \\ T \text{ is } Y\text{-periodic}& \end{aligned} \tag{2}$$

ここで，T および Pe_{loc}, E_i はそれぞれ温度，local Péclet 数，マクロ温度勾配である．$\bar{u}_i$ は領域 Y 上の流速 u_i の平均であり，以下で定義される．

$$\bar{u}_i = \frac{1}{|Y|}\int_Y u_i \mathrm{d}Y \tag{3}$$

流体問題を対象としたトポロジー最適化手法 [15] に基づき，Stokes 方程式に固体領域のみに作用する外力として Brinkman 項を加える．これは，固体領域にて流速がゼロとなる条件を課すために導入されるもので，以下で与えられる．

$$f_i^{\mathrm{B}} = -\alpha(\boldsymbol{y})u_i \tag{4}$$

ここに，f^{B} は Brinkman 項を表す．α は逆透過抵抗係数であり，以下で与えられる．

$$\alpha(\boldsymbol{y}) = \begin{cases} \alpha_{\mathrm{s}} & \text{in } Y_{\mathrm{s}} \\ 0 & \text{in } Y_{\mathrm{f}} \end{cases} \tag{5}$$

ここで，α_{s} は固体の逆透過抵抗係数である．固体領域において流速をゼロとするには $\alpha_{\mathrm{s}} \to \infty$ の極限を考える必要があるが，数値計算上は十分に大きな値を設定する．本研究では $\alpha_{\mathrm{s}} = 10^5$ とする．また，熱伝導係数の分布関数 $k(\boldsymbol{y})$ を導入し，以下のように定義する．

$$k(\boldsymbol{y}) = \begin{cases} k_{\mathrm{s}} & \text{in } Y_{\mathrm{s}} \\ k_{\mathrm{f}} & \text{in } Y_{\mathrm{f}} \end{cases} \tag{6}$$

上記の Brinkman 項および熱伝導率の分布関数表現を用いて，流体・固体領域上で統一的にミクロ境界値問題を記述する．

$$\begin{aligned} -Pr\frac{\partial^2 u_i}{\partial y_j^2} + \alpha u_i + G_i + \frac{\partial p}{\partial y_i} &= 0 \quad \text{in } Y \\ \frac{\partial u_j}{\partial y_j} &= 0 \quad \text{in } Y \\ u_i, p &\text{ is } Y\text{-periodic} \end{aligned} \tag{7}$$

$$\begin{aligned} Pe_{\mathrm{loc}}u_j\left(\frac{\partial T}{\partial y_j}+E_j\right) - \frac{\partial}{\partial y_j}\left(k\left(\frac{\partial T}{\partial y_j}+E_j\right)\right) - Pe_{\mathrm{loc}}\bar{u}_jE_j &= 0 \\ \text{in } Y& \\ T \text{ is } Y\text{-periodic}& \end{aligned} \tag{8}$$

(2) FFT に基づく均質化法

概して FFT に基づく均質化問題の数値解法は，未知関数をフーリエ級数で近似し，そのフーリエ係数を不動点反復法 (Fixed point iteration method) を用いて求解するものである．ここでは，前節で示した Stokes-Brinkman 方程式および熱の移流・拡散方程式で表される二つのミクロ境界値問題を FFT に基づく均質化アルゴリズムにより解く手法について記述する．

a) 未知関数のフーリエ級数による近似

本研究では，Y-periodic な関数 $\Phi(\boldsymbol{y})$ をフーリエ級数を用いて以下のように近似する．

$$\Phi(\boldsymbol{y}) = \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1} \hat{\Phi}_n \exp\left(i\boldsymbol{\xi}_n \cdot \boldsymbol{y}\right) \tag{9}$$

ここで，$i^2 = -1$ は虚数，N は計算格子点の数を表す．$\hat{\Phi}$ は Φ の離散フーリエ変換を表し，以下の式で与えられる．

$$\hat{\Phi}_k = \sum_{n=0}^{N-1} \Phi_n \exp\left(-i\boldsymbol{\xi}_k \cdot \boldsymbol{y}_n\right) \tag{10}$$

ここで，$\boldsymbol{y}_n$ と $\boldsymbol{\xi}_n$ は離散的な座標ベクトル，周波数ベクトルを表す．離散フーリエ変換の実行には Intel Math Kernel Library の DFT 関数を用いる．

b) Stokes-Brinkman 方程式に対する求解手法

Chen による文献 [16] に基づき，Stokes-Brinkman 方程式に対する FFT に基づいた数値解法について記す．まず，不動点型の方程式を導出する準備として，下式で定義される polarization ベクトル $\boldsymbol{\tau}$ を導入する．

$$\boldsymbol{\tau}(\boldsymbol{y}) = -\left(\alpha(\boldsymbol{y}) - \alpha_{\mathrm{ref}}\right) \cdot \boldsymbol{u}(\boldsymbol{y}) \tag{11}$$

α_{ref} は参照逆透過抵抗係数であり，以下で与える．

$$\alpha_{\mathrm{ref}} = \frac{1}{2}\left(\min_{y\in Y} \alpha(\boldsymbol{y}) + \max_{y\in Y} \alpha(\boldsymbol{y})\right) \tag{12}$$

式 (11) を用いると，支配方程式は以下のように書ける．

$$\frac{\partial u_i}{\partial y_j^2} - \alpha_{\mathrm{ref}} u_i - \frac{\partial p}{\partial y_i} + \tau_i = G_i \tag{13}$$

$$\frac{\partial^2 p}{\partial y_j^2} = \frac{\partial \tau}{\partial y_j} \tag{14}$$

上式のフーリエ変換は以下のようになる．

$$\begin{aligned} &-\left(\|\boldsymbol{\xi}_n\|^2 + \alpha_{\mathrm{ref}}\right)\hat{\boldsymbol{u}}_n - i\boldsymbol{\xi}_n \hat{p}_n + \hat{\boldsymbol{\tau}}_n = \hat{\boldsymbol{G}} \\ &-\|\boldsymbol{\xi}_n\|\hat{p}_n = i\boldsymbol{\xi}_n \cdot \hat{\boldsymbol{\tau}} \end{aligned} \tag{15}$$

ここで，$\|\bullet\|$ は ℓ_2 ノルムを表す．式 (15) から，以下の不動点型の方程式が導かれる．

$$\hat{\boldsymbol{u}}_n = \begin{cases} \dfrac{1}{\alpha_{\mathrm{ref}}}\left(\hat{\boldsymbol{\tau}}_0 - \hat{\boldsymbol{G}}\right) & \text{if } n = 0 \\ \hat{\mathbb{G}}_n \cdot \hat{\boldsymbol{\tau}}_n & \text{else} \end{cases} \tag{16}$$

ここで，$\hat{\mathbb{G}}_n$ はグリーン作用素であり，以下で表される．

$$\hat{\mathbb{G}}_n = \frac{\boldsymbol{I} - \dfrac{\boldsymbol{\xi}_n \otimes \boldsymbol{\xi}_n}{\|\boldsymbol{\xi}_n\|^2}}{\|\boldsymbol{\xi}_n\|^2 + \alpha_{\mathrm{ref}}}$$

FFT-based algorithm 1 Compute $\boldsymbol{u}$

```
Initialize u_n^0
while error1 > ε do
    τ_n^k ⇐ −(α − α_ref) u_i^k
    τ̂_n^k ⇐ FFT(τ_n^k)
    if i = 0 then
        û_0^{k+1} ⇐ (1/α_ref) (τ̂_0^k − Ĝ)
    else
        û_n^{k+1} ⇐ Ĝ · τ̂_n^k
    end if
    u_n^k ⇐ IFFT(û_n^k)
    calculate error1
end while
```

流速 $\boldsymbol{u}$ の離散フーリエ変換 $\hat{\boldsymbol{u}}_n$ を不動点反復法により求めるアルゴリズムは FFT-based algorithm 1 として掲載している．$error1$ は，この反復計算の収束判定に用いる誤差の指標であり，本研究では以下の式で計算する．

$$error1 = \frac{\sqrt{\dfrac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}\|\boldsymbol{u}_n^{k+1} - \boldsymbol{u}_n^k\|}}{\|\boldsymbol{U}^k\|} \tag{17}$$

$\boldsymbol{U}_k$ は k 回目の反復におけるマクロ流速である．また，$error1$ が $\epsilon = 10^{-6}$ よりも小さくなれば反復計算を終了する．

c) 移流・拡散方程式に対する求解手法

To らによる文献 [17] に基づき，移流・拡散方程式に対する FFT に基づいた数値解法について記す．まず，$\boldsymbol{j}$, $\boldsymbol{e}$, q を以下の式で定義する．

$$j_i = k\left(\frac{\partial T}{\partial y_i} + E_i\right), \quad j_i = ke_i \tag{18}$$

$$q = Pe_{\mathrm{loc}}\hat{u}E_j - Pe_{\mathrm{loc}}u_j\left(\frac{\partial T}{\partial y_j} + E_j\right) \tag{19}$$

$\boldsymbol{j}$, $\boldsymbol{e}$, q を用いると，支配方程式は以下のように記述できる．

$$\mathrm{div}\boldsymbol{j} + q = 0, \quad \mathrm{rot}\,\boldsymbol{e} = 0 \tag{20}$$

次に，以下で定義される polarization ベクトル $\boldsymbol{\tau}$ を導入する．

$$\boldsymbol{\tau} = (k - k_{\mathrm{ref}})\boldsymbol{e} \tag{21}$$

k_{ref} は参照熱伝導係数である．ここで，$\boldsymbol{j}, \boldsymbol{e}$ は $\boldsymbol{\tau}$ を用いて以下のように計算できることに留意する．

$$\boldsymbol{e} = (k - k_{\mathrm{ref}})^{-1}\boldsymbol{\tau}, \quad \boldsymbol{j} = \boldsymbol{\tau} + k_{\mathrm{ref}}\boldsymbol{e} \tag{22}$$

続いて，式 (20) をフーリエ変換し，不動点型の方程式を導くことを考える．ここでは，FFT-based スキームの中でも，polarization ベクトルの離散フーリエ変換 $\hat{\boldsymbol{\tau}}_n$ を不動点反復の未知変数とする polarization-based スキームを採用する．不動点型の方程式を導くための準備と

して，二つのプロジェクター $\boldsymbol{P}_n, \boldsymbol{Q}_n$，そしてベクトル $\boldsymbol{\gamma}_n$ を以下のように導入する．

for $n \neq 0$

$$\boldsymbol{P}_n = \frac{\boldsymbol{\xi}_n \otimes \boldsymbol{\xi}_n}{\|\boldsymbol{\xi}_n\|^2},\ \boldsymbol{Q}_n = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{P}_n,\ \boldsymbol{\gamma}_n = -i\frac{\boldsymbol{\xi}_n}{\|\boldsymbol{\xi}_n\|^2} \tag{23}$$

for $n = 0$

$$\boldsymbol{P}_0 = \boldsymbol{Q}_0 = \boldsymbol{0},\ \gamma_0 = \boldsymbol{0} \tag{24}$$

式 (23) のように定義した $\boldsymbol{P}_n, \boldsymbol{Q}_n$ は以下の性質を満たす．

for $n \neq 0$

$$\begin{cases} \boldsymbol{P}_n\boldsymbol{P}_n = \boldsymbol{P}_n,\ \boldsymbol{Q}_n\boldsymbol{Q}_n = \boldsymbol{Q}_n \\ \boldsymbol{P}_n\boldsymbol{Q}_n = \boldsymbol{Q}_n\boldsymbol{P}_n = \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{P}_n + \boldsymbol{Q}_n = \boldsymbol{I} \end{cases} \tag{25}$$

式 (23) で定義した $\boldsymbol{P}_n, \boldsymbol{Q}_n$，$\boldsymbol{\gamma}_n$ を用いると，式 (20) を下式となるように式変形できる．

$$\boldsymbol{P}_n\hat{\boldsymbol{j}}_n + \hat{\boldsymbol{\gamma}}_n\hat{q}_n = \boldsymbol{0}, \quad \boldsymbol{Q}_n\hat{\boldsymbol{e}}_n = 0 \tag{26}$$

さらに式変形したのちに，条件をまとめると以下のようになる．

for $n \neq 0$

$$\hat{\boldsymbol{G}}_n\left[\hat{\boldsymbol{j}}_n + \hat{\gamma}_n\hat{q}_n\right] = \boldsymbol{0}, \quad \hat{\boldsymbol{G}}_n = \frac{\hat{\boldsymbol{P}}_n}{k_{\mathrm{ref}}} \tag{27}$$

$$\boldsymbol{D}_n\hat{\boldsymbol{e}}_n = 0, \quad \hat{\boldsymbol{D}}_n = k_{\mathrm{ref}}\hat{\boldsymbol{Q}}_n \tag{28}$$

for $n = 0$

$$\hat{\boldsymbol{e}}_0 = \hat{\boldsymbol{E}} \tag{29}$$

以上の条件を満足する $\boldsymbol{\tau}$ の求解を不動点反復法により行う．そのためのアルゴリズムを FFT-based algorithm 2 として掲載する．$error2$ は，この反復計算の収束判定に用いる誤差の指標であり，本研究では以下の式で計算する．

$$error2 = \sqrt{\frac{\|\hat{\boldsymbol{\tau}}_n^{k+1} - \hat{\boldsymbol{\tau}}_n^{k}\|}{\|\hat{\boldsymbol{\tau}}_n^{k}\|}} \tag{30}$$

また，$error2$ が $\epsilon = 10^{-6}$ よりも小さくなれば反復計算を終了する．パラメータ β は -1.5 とする．

3. トポロジー最適化

(1) 材料補間

材料分布は区分一定値関数 $\phi(\boldsymbol{y})$ で表現する．固体領域は $\phi(\boldsymbol{y}) = 1$ で，流体領域は $\phi(\boldsymbol{y}) = 0$ で表される．トポロジー最適化では，勾配情報を活用するために，元の離散的な最適化問題を連続的な問題に緩和する．それに伴い，各点での材料特性は設計変数に関する補間関数で表現する．本研究では，逆透過抵抗係数，熱伝導率を以下のような冪関数により補間する．

$$\begin{aligned} \alpha(\boldsymbol{y}) &= \alpha_{\mathrm{s}}\phi(\boldsymbol{y})^{q_\alpha} \\ k(\boldsymbol{y}) &= k_{\mathrm{f}} + (k_{\mathrm{s}} - k_{\mathrm{f}})\phi(\boldsymbol{y})^{q_k} \end{aligned} \tag{31}$$

ここで，q_α, q_k は正の値をとるペナルティパラメータである．

FFT-based algorithm 2 Compute $\boldsymbol{\tau}$

Initialize $\hat{\tau}_n^0$
while $error2 > \epsilon$ **do**
  $\boldsymbol{\tau}_n^k \Leftarrow \mathrm{IFFT}(\hat{\boldsymbol{\tau}}_n^k)$
  $\boldsymbol{e}_n^k \Leftarrow (k - k_{\mathrm{ref}})^{-1}\boldsymbol{\tau}_n^k$
  $\boldsymbol{j}_n^k \Leftarrow \boldsymbol{\tau}_n^k + k_{\mathrm{ref}}\boldsymbol{e}_n^k$
  $q_n^k \Leftarrow \boldsymbol{u_n} \cdot \boldsymbol{e}_n^k$
  $\hat{\boldsymbol{e}}_n^k \Leftarrow \mathrm{FFT}(\boldsymbol{e}_n^k)$
  $\hat{\boldsymbol{j}}_n^k \Leftarrow \mathrm{FFT}(\boldsymbol{j}_n^k)$
  $\hat{q}_n^k \Leftarrow \mathrm{FFT}(q_n^k)$
  if $i = 0$ **then**
    $\hat{\boldsymbol{\tau}}_0^{k+1} \Leftarrow \hat{\boldsymbol{\tau}}_0^k + \beta k^0\left(\hat{\boldsymbol{e}}_0^k - \hat{\boldsymbol{E}}\right)$
  else
    $\hat{\boldsymbol{\tau}}_n^{k+1} \Leftarrow \hat{\boldsymbol{\tau}}_n^k - \beta k^0\boldsymbol{G}_n\left(\hat{\boldsymbol{j}}_n^k + \hat{\boldsymbol{\gamma}}_n^k\hat{q}_n^k\right) + \beta\boldsymbol{D}_n\hat{\boldsymbol{e}}_n^k$
  end if
  calculate $error2$
end while

(2) 最適化問題

最適化問題を一般的に以下のように記述する．

$$\begin{aligned} &\text{maximize} && f_0(\boldsymbol{u}, T, \phi(\boldsymbol{y})) \\ &\text{subject to} && \mathscr{R} = \boldsymbol{0} \\ &&& 0 \leq \phi \leq 1.0 \\ &&& g \leq 0 \end{aligned} \tag{32}$$

ここで，f_0 は目的関数，$\mathscr{R} = \boldsymbol{0}$ は支配方程式，g は制約関数を表す．ここでは，目的関数として均質化熱伝導係数テンソルの第 l 成分, 制約関数として体積制約を設定する．

$$f_{0l} = \int_Y k\frac{\partial}{\partial y_l}(T + E_l y_l) + Pe_{\mathrm{loc}}(\bar{u}_l - u_l)\,T\,\mathrm{d}Y. \tag{33}$$

$$g_0 = \frac{1}{V_{\max}|Y|}\int_Y (1-\phi)\mathrm{d}Y - 1 \leq 0 \tag{34}$$

ここで，$V_{\max}$ は領域 Y に占める流体体積比率の制約値である．また，上記最適化問題を解くための最適化アルゴリズムとして Method of moving asymptotes [18] を用いる．

(3) 随伴解析

連続形の随伴変数法を用いて目的関数の勾配および随伴問題を導出する．まず，目的関数に対するラグランジュ関数を以下のように定義する．

$$\mathscr{L}_0 = f_0 + \mathscr{L}_{\mathrm{S}} + \mathscr{L}_{\mathrm{E}} \tag{35}$$

ここで，$\mathscr{L}_{\mathrm{S}}, \mathscr{L}_{\mathrm{E}}$ はそれぞれ問題 (7)，(8) に対するラグランジュ関数であり，以下のように定義する．

$$\mathscr{L}_{\mathrm{S}} = \int_Y \left\{ Pr\frac{\partial \lambda_i}{\partial y_j}\frac{\partial u_i}{\partial y_j} + \alpha\lambda_i u_i + \lambda_i G_i + \frac{\partial p}{\partial y_i}\lambda_i - \kappa\frac{\partial u_j}{\partial y_j} \right\} \mathrm{d}Y. \tag{36}$$

$$\mathscr{L}_{\mathrm{E}} = \int_Y \Biggl\{ \psi Pe_{\mathrm{loc}} u_j \frac{\partial}{\partial y_j}\left(T + E_j y_j\right) + \frac{\partial \psi}{\partial y_j} k \frac{\partial}{\partial y_j}\left(T + E_j y_j\right) \\ - \psi Pe_{\mathrm{loc}} E_j \bar{u}_j \Biggr\} \mathrm{d}Y + \omega_j \left(\bar{u}_j - \frac{1}{|Y|}\int_Y u_j \mathrm{d}Y \right). \tag{37}$$

ここで，$\lambda_i, \kappa, \psi, \omega_i$ は随伴変数である．続いて，$\mathscr{L}_0$ の微分を考える．

$$\mathscr{L}_0'(u, p, T, \bar{u}, \lambda, \kappa, \psi, \omega, \phi)[\delta u, \delta p, \delta T, \delta \bar{u}, \delta \lambda, \delta \kappa, \delta \psi, \delta \omega, \delta \phi] \\ = \mathscr{L}_{0\phi}'[\delta \phi] + \mathscr{L}_{0up}'[\delta u, p] + \mathscr{L}_{0T,\bar{u}}'[\delta T, \delta \bar{u}] \\ + \mathscr{L}_{0\lambda,\kappa}'[\delta \lambda, \delta \kappa] + \mathscr{L}_{0\psi,\omega}'[\delta \psi, \delta \omega] \tag{38}$$

ここで，$\delta \bullet$ で変数の任意変動を表す．上記の第 4, 5 項は状態決定問題に対するラグランジュ関数と等しくなる．すなわち，$u, p', T, \bar{u}$ が状態決定問題 (7), (8) の解であれば第 4, 5 項はゼロとなる．次に，随伴変数 λ_i, κ が以下の随伴問題の解であれば，第二項はゼロとなる．

$$\int_Y \left\{ Pr \frac{\partial \lambda_i}{\partial y_j} \frac{\partial \delta u_i}{\partial y_j} + \alpha \lambda_i \delta u_i + H_i \delta u_i + \delta u_j \frac{\partial \kappa}{\partial y_j} - \frac{\partial \lambda_i}{\partial y_i} p \right\} \mathrm{d}Y = 0 \tag{39}$$

ここで，H_i は以下で与えられる．

$$H_i = -Pe_{\mathrm{loc}} \delta_{il} T + \psi Pe_{\mathrm{loc}} \frac{\partial}{\partial y_i}\left(T + E_j y_j\right) - \frac{\omega_i}{|Y|} \tag{40}$$

ここで，δ_{il} は Kronecker のデルタを表す．さらに，随伴変数 ψ, ω が以下の随伴問題の解であれば，第三項はゼロとなる．

$$\int_Y \Biggl\{ \delta T Pe_{\mathrm{loc}}(-u_j) \left(\frac{\partial \psi}{\partial y_j} + \delta_{jl} \right) \\ + \frac{\partial \delta T}{\partial y_j} k \left(\frac{\partial \psi}{\partial y_j} + \delta_{jl} \right) - \delta T Pe_{\mathrm{loc}}(-\bar{u}_j) \delta_{jl} \Biggr\} \mathrm{d}Y \\ + \delta \bar{u}_j \left(\omega_j + \int_Y -\psi Pe_{\mathrm{loc}} E_j + Pe_{\mathrm{loc}} \delta_{jl} T \mathrm{d}Y \right) = 0 \tag{41}$$

ここで，ω_i は以下で与えられる．

$$\omega_i = -\int_Y -\psi Pe_{\mathrm{loc}} E_i + Pe_{\mathrm{loc}} \delta_{il} T \mathrm{d}Y \tag{42}$$

残る第一項は以下のようになる．

$$f_{0l\phi}'[\delta \phi] = \mathscr{L}_{0\phi}'[\delta \phi] = \\ \int_Y \left\{ \frac{\partial \alpha}{\partial \phi} \lambda_i u_i + \frac{\partial k}{\partial \phi} \left(\frac{\partial \psi}{\partial y_j} + \delta_{il} \right) \left(\frac{\partial T}{\partial y_j} + E_j \right) \right\} \delta \phi \mathrm{d}Y \tag{43} \\ = \langle g_0, \delta \phi \rangle$$

ここで，g_0 は目的関数 f_0 の勾配である．まとめると，連続形の随伴変数に基づき，λ_i, κ, ψ を未知関数とする二つの随伴問題 (39), (41) および目的関数の勾配 g_0 が導出された．

4. 実装上の諸条件

(1) Continuation approach

より優れた局所解を得たり最適解におけるグレースケール領域を減らす目的で，最適化計算の過程において補間関数のペナルティ係数を調整する方法は Continuation approach と呼ばれる．ここでは，q_α の値は 20 ステップごとに $\{6, 5, 4, 3\}$ の順に変化させる．一方で，簡単のため q_k は 3 で固定する．

(2) 最適化計算の収束条件

以下の条件を満たした場合に最適化計算が収束したと判断し，計算を終了する．

$$\left| \frac{f_0^{n+1} - f_0^n}{f_0^n} \right| < 10^{-3} \tag{44}$$

ここに，f_0^n は第 n 最適化ステップでの目的関数値である．

5. まとめ

本研究では，熱・流体問題に対する逆均質化問題を，FFT に基づく数値計算法を用いることを前提に解く手法を開発した．これらの数値計算例を発表で紹介する．

参考文献

[1] Dede, E. M.: Multiphysics Topology optimization of heat transfer and fluid flow systems, *Proceedings of the COMSOL Conference 2009 Boston*, pp.8–10, 2009.

[2] Yoon, G. H.: Topological design of heat dissipating structure with force convective heat transfer, *J. Mech. Sci. Technol.*, Vol. 24, pp.1225-1233, 2010.

[3] Alexandersen, J.: A Review of Topology Optimisation for Fluid-Based Problems, *Fluids*, Vol.5, 2020

[4] Takezawa, A. et al.: Optimization of an additively manufactured functionally graded lattice structure with liquid cooling considering structural performances, *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol.143, pp.118564, 2019.

[5] Geng, D. et al.: Concurrent topology optimization of multi-scale cooling channels with inlets and outlets, *Struct. Multidisc. Optim.*, Vol.65, pp.1-21, 2022.

[6] Francisco, P. et al.: Multi-objective and multi-load topology optimization and experimental validation of homogenized coupled fluid flow and heat transfer and structural stiffness, *Struct. Multidisc. Optim.*, Vol.62, pp.2571-2598, 2020.

[7] Sukulthanasorn, N. et al.: Transient thermal porous structure designed by two-scale concurrent topology optimization, *Transactions of JSCES*, Vol.2022, pp.20220004, 2022.

[8] Sigmund, O.: Materials with prescribed constitutive parameters: an inverse homogenization problem, *Int. J Solids Struct.*, vol.31, pp.2313-2329, 1994.

[9] Wu, J. et al.: Topology optimization of multi-scale structures: a review, *Struct. Multidisc. Optim.*Vol.63, pp.1455-1480, 2021.

[10] Allaire, G. et al.: Two-scale expansion with drift approach to the Taylor dispersion for reactive transport through porous media, *Chem. Eng. Sci.*, Vol.65, pp.2292-2300, 2010.
[11] Lucarini, S. et al.: FFT based approaches in micromechanics: fundamentals, methods and applications, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, Vol.30, pp.023002, 2022.
[12] Chen, Z. et al.: FFT-based Inverse Homogenization for Cellular Material Design, *Int. J. Mech. Sci.*, Vol.231, pp.107572, 2022.
[13] 松井 聖圭ほか: FFT 均質化アルゴリズムに基づく高解像度マルチスケールトポロジー最適化, 土木学会論文集, 79 巻, 15 号, 2023
[14] Allaire, G.: A brief introduction to homogenization and miscellaneous applications, *ESAIM: Proc*, Vol.37, pp.1-49, 2012.
[15] Borrvall, T. and Petersson, J.: Topology optimization of fluids in Stokes flow, *Int. J. Numer. Methods Fluids.*, Vol. 41, pp.77-107, 2003.
[16] Chen, Y.: High-performance computational homogenization of Stokes–Brinkman flow with an Anderson-accelerated FFT method,*Int. J. Numer. Meth. Fluids.*, pp.1-27, 2023.
[17] To, Q. D. et al.: An FFT method for the computation of thermal diffusivity of porous periodic media, *Acta Mechanica*, Vol.228, pp.3019-3037, 2017.
[18] Svanberg, K. et al.: The method of moving asymptotes—a new method for structural optimization, *Int. J. Numer. Methods. Eng.* Vol.24, pp.359-373, 1987.