

深層生成モデルを用いた 外形形状と内部微細構造の同時トポロジー最適化

Simultaneous topology optimization of external shape and internal microstructure
using deep generative model

加藤美里¹⁾, 矢地謙太郎²⁾, 藤田喜久雄³⁾
Misato Kato, Kentaro Yaji and Kikuo Fujita

¹⁾学生 大阪大学 大学院工学研究科 (〒 565-0871 大阪府吹田市山田丘 2-1, E-mail: kato@syd.mech.eng.osaka-u.ac.jp)

²⁾博(工) 大阪大学 大学院工学研究科 准教授 (〒 565-0871 大阪府吹田市山田丘 2-1, E-mail: yaji@mech.eng.osaka-u.ac.jp)

³⁾工博 大阪大学 大学院工学研究科 教授 (〒 565-0871 大阪府吹田市山田丘 2-1, E-mail: fujita@mech.eng.osaka-u.ac.jp)

Simultaneous topology optimization methods of external shape and internal microstructure are expected to achieve lightweight and high-stiffness structural designs. For this purpose, homogenization methods are generally used, but they assume periodic microstructures, leading to discrepancies when applied to non-periodic structures in full-scale analysis. In this study, we propose a data-driven topology optimization method for non-periodic structures that simultaneously optimizes external shape and internal microstructure based on full-scale analysis. In the numerical examples, we addressed the maximum stress minimization problem and obtained optimized designs that avoid stress concentration.

Key Words : Multi-scale Optimization, Data-driven Topology Design, Maximum Stress Minimization

1. 緒言

軽量かつ高強度な構造物の設計は、資源削減や性能向上の観点から、航空機や自動車産業界をはじめとする多くの分野で重要な課題となっている。特に、ラティス構造などの多孔質構造は、軽量化と高強度化の両立を可能とする構造として注目されている。近年の積層造形の発展により、これまで製造が困難であった複雑な形状の製造が可能となったことで、こうした構造の設計手法の開発がますます求められている。

多孔質構造の力学的性能を向上させる設計手法として、トポロジー最適化が注目されている。これは、与えられた設計領域内で所望の性能を最大限発揮する構造の形状を導出する最適化手法であり、軽量かつ高強度な構造の設計に有用である。特に、全体構造の外形（マクロ構造）とその内部に含まれる微細構造（ミクロ構造）を連成させた同時トポロジー最適化の研究が盛んに行われている [1]。全体構造の力学的挙動は内部微細構造の形状や配置に大きく依存するため、両方を同時に最適化することで、力学的性能の大幅な向上が期待できる。

一方で、構造内の各評価点に対して異なるミクロ構造を適切に配置した非周期構造を導出することが理想的であるが、計算コストの増大や接続性、製造制約の問題により実現は依然として困難である。そのため、先行研究では問題設定に何らかの制約を設けることで最適化を可能にする手法が提案されている。例えば、全体構造は単一のミクロ構造で構成されるとして両方のトポロジーを最適化する手法 [2] や、あらかじめ用意した複数のミクロ構造の配置を最適化する手法 [3] が挙げられる。これらの手法は基本的に均質化法に基づく勾

配型トポロジー最適化であり、ミクロ構造を等価な均質材料で表現し、マクロ構造の力学的性能を導出することで、マクロ構造とミクロ構造を連成して解くことが可能となる。しかし、均質化法はミクロ構造の周期性を前提とした手法であるため、多様なミクロ構造が非周期的に分布する構造の力学特性を適切に評価することができず、扱うミクロ構造の種類は大きく制限される。また、ミクロ構造を均質材料として扱うため、最大応力最小化問題のような局所的な力学挙動を捉えることは難しく、その適用範囲には課題が残る。

以上の背景を踏まえ、本研究では多様なミクロ構造が非周期的に分布する最適構造の導出を目的として、フルスケール解析に基づく外形形状と内部微細構造の同時トポロジー最適化手法を提案する。本手法では、構造格子により離散化されたマクロ構造の各要素に対し、多様なセルタイプの中から最適なミクロ構造を適用して解を生成し、フルスケール解析に基づいて解を更新していくことで、従来手法と比較してより自由度の高い最適化を可能にする。

上述の目的を達成するために、勾配情報を用いずに順解析の結果に基づいて解を更新するデータ駆動型マルチフィデリティトポロジーデザイン [4] の枠組みを応用する。その基本的な概要は、最適化問題を低忠実度最適化と高忠実度評価に分割し、進化的アルゴリズムに基づいて深層生成モデルにより解更新を行う非勾配型トポロジー最適化である。したがって本研究では、低忠実度最適化とは、別々に生成したマクロ構造とミクロ構造を組み合わせるフルスケール構造の候補解を生成することを指し、高忠実度評価とは、フルスケール解析を行い、均質化法を用いず本来の目的関数に基づい

て解の性能を評価することを指す。最適化手順としてはまず、一般的な勾配型トポロジー最適化を用いてマクロ構造の初期解を生成する。ミクロ構造については、複数のセルタイプを設定し、それぞれの部材の太さを変化させることでデータセットを作成する。次に低忠実度最適化として、マクロ構造の各要素にミクロ構造を適用することでフルスケール構造の候補解を生成する。その後、高忠実度評価としてフルスケールで解析し、解の性能を評価する。性能が優れた解に基づいて、生成モデルの一つである Variational Autoencoder (VAE) [5] を用いてマクロ構造の材料分布を更新する。これらの操作を繰り返すことで、複数ミクロ細構造を含む非周期的な構造に対し、局所的な力学挙動を捉えた最適化を実現する。

数値例では、局所的な力学挙動を考慮した最適化への本手法の有用性を検証するため、最大応力最小化問題に取り組む。マクロ構造の初期解生成には p -ノルムを用いた勾配型トポロジー最適化を適用し、高忠実度評価ではフルスケール解析により導出した最大応力値により解の性能を評価する。本手法により、局所的な応力挙動を適切に捉え、応力集中を回避した構造の獲得を目指す。

2. 問題設定

本研究では、全体構造の形状を表す材料分布（マクロ構造）と、その各要素に当てはめる内部微細構造（ミクロ構造）を同時に最適化する設計問題を扱う。図1に示すように、マクロ構造は構造格子により離散化され、各要素には設計変数 $\rho_M \in [0, 1]$ が割り当てられる。一方、ミクロ構造は図2に示すように、接続性を考慮するために枠で囲われた構造に限定し、異方性を持つ構造を含む9種類のセルタイプを設定する。それぞれ部材の太さを変化させることで体積率 ($0 \leq v_f \leq 1$) の構造を用意する。したがって、マクロ構造の各要素の物性値に基づいて、ミクロ構造のデータセットから最適なミクロ構造を選択し、それぞれ適用することでフルスケール構造を生成する。このようにして生成されたフルスケール構造は、順解析によって目的関数値が評価される。

ここで、従来法では均質化法により解の目的関数値を導出するため、扱えるミクロ構造の種類は限定的であった。一方本研究ではフルスケール解析により目的関数値を評価するため、接続性や製造制約といった課題は残るものの、ミクロ構造の種類に制限はなく、各要素ごとに多様なミクロ構造を独立して適用できる点に留意したい。

本研究では軽量かつ高強度な構造の設計を目的として、最大応力最小化と体積最小化の2目的最適化問題を扱う。最適化問題は以下のように定義される。

$$\begin{aligned}
 &\text{find} && \rho = \rho_e \ (e = 1, 2, \dots, n) \\
 &\text{that minimize} && \sigma_{\max} = \max_e \{\sigma_{\text{vm},e}\} \\
 &\text{subject to} && V = \sum_{i=1}^n v_e \rho_e \leq \bar{V} \leq V_{\max} \\
 &&& \rho_e \in \{0, 1\},
 \end{aligned} \tag{1}$$

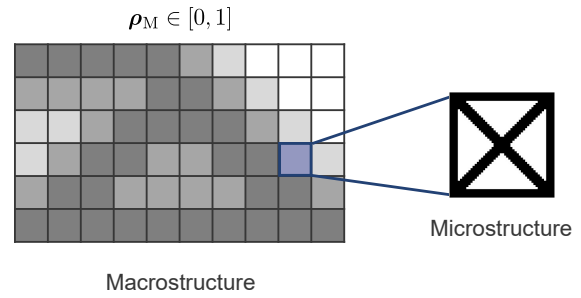


図-1 フルスケール構造の生成

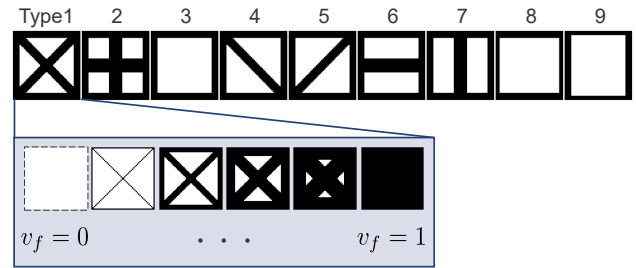


図-2 微細構造のセルタイプ

ここで、 n はフルスケール構造の全要素数、 v_e は要素 e の体積、 \bar{V} は体積制約、 V_{\max} は設計領域全体の体積、 $\sigma_{\text{vm},e}$ は要素 e の Von Mises 応力である。 ρ_e は要素 e の材料の有無を表す変数であり、 $\rho_e = 1$ は固体、 $\rho_e = 0$ は空白を表す。

3. 提案手法

(1) 提案する枠組み

本研究は Yaji らが提案したデータ駆動型マルチフィデリティトポロジーデザイン (MFTD) [4] に基づき、外形形状であるマクロ構造と、内部微細構造であるミクロ構造の同時トポロジー最適化手法を提案する。データ駆動型 MFTD は、多忠実度設計とデータ駆動型トポロジー最適化を組み合わせた進化的アルゴリズムに基づく非勾配型トポロジー最適化である。本研究では、低忠実度最適化としてマクロ構造とミクロ構造を組み合わせることで新たな候補解を生成し、高忠実度評価にて生成した複数の解をフルスケールで解析し目的関数を評価することで、複数のミクロ構造を含む非周期的な構造に対する局所的な応力挙動を捉えた最適化を目指す。

提案する枠組みを図3に示し、最適化手順を以下に示す。

1. ミクロ構造のデータセットを作成する。
2. 密度法を用いた勾配型トポロジー最適化により、マクロ構造の初期解を生成する。
3. 低忠実度最適化として、マクロ構造の各要素に適用するミクロ構造を選択する。
4. 高忠実度評価として、すべての解に対しフルスケール解析を行い、最適化問題 (1) で評価する。
5. 4 の評価結果を基に、エリート解を選択する。
6. 収束条件を満たしていれば、エリート解を最適化結果として手順を終える。収束していなければ、次に進む。
7. 5 で選択したエリート解を基に VAE によりマクロ

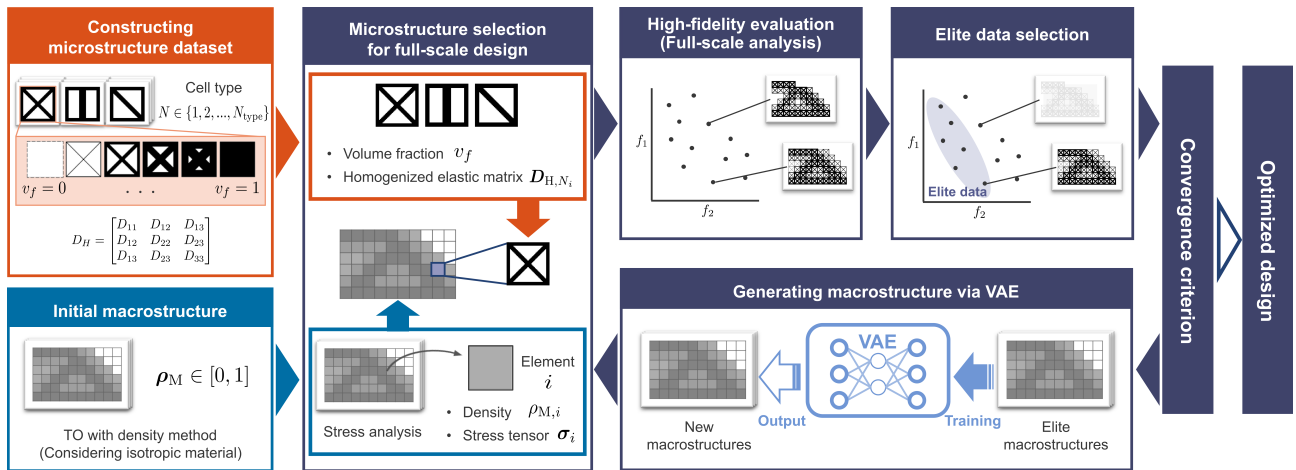


図-3 提案する枠組み

構造の材料分布を更新し、STEP3に戻る。
以下に各工程の詳細を示す。

(2) ミクロ構造のデータセット作成

最適化内で扱うミクロ構造の材料分布および物性値を含むデータセットをあらかじめ用意する。本研究では図2に示す9種類のセルタイプを用いる。各セルタイプは、規則的に部材の太さを1ピクセルずつ変化させることでそれぞれ体積率 ($0 \leq v_f \leq 1$) の構造を生成する。

次に、すべてのセルタイプ、体積率ごとに、均質化法の一つである Energy-Based Homogenization Method (EBHM) [6] を用いて均質化弾性マトリクス D_H を算出する。2次元のミクロ構造の弾性マトリクス D_H は、以下のように定義される。

$$D_H = \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} & D_{13} \\ D_{12} & D_{22} & D_{23} \\ D_{13} & D_{23} & D_{33} \end{bmatrix} \quad (2)$$

ここで、 D_{ij} はミクロ構造の弾性マトリクスの成分を表す。固体 ($v_f = 1$) の弾性マトリクス D_H^* は等方性材料であり、以下となる。

$$D_H^* = \frac{E}{1-\nu^2} \begin{bmatrix} 1 & \nu & 0 \\ \nu & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-\nu}{2} \end{bmatrix} \quad (3)$$

以上により算出した物性値を用いてマクロ構造の各要素に対し適切なミクロ構造を選択する。

(3) 密度法によるマクロ構造の初期解生成

マクロ構造の初期解は、密度法を用いた一般的な勾配型トポロジー最適化により生成される。SIMP (Solid Isotropic Material with Penalization) 法により、連続的な設計変数 $\rho_{M,i} \in [0, 1]$ を扱う。したがってマクロ構造の材料特性を表すヤング率 E_{SIMP} は以下で定義される。

$$E_{SIMP}(\rho_{M,i}) = E_0 + \rho_{M,i}^p (E_1 - E_0), \quad (4)$$

ここで、 E_1 , E_0 はそれぞれ固体、空気のヤング率を表し、 $\rho_{M,i}$ は要素 i の密度を表す設計変数である。また p

はペナルティ係数であり、シングルスケールのトポロジー最適化では密度 $\rho_{M,i}$ の2値化を促進するため、一般的に $p = 3$ が用いられる。しかし本研究では、密度 $\rho_{M,i}$ は当てはめるミクロ構造の体積率 v_f に対応するため、中間密度 ($0 < \rho_{M,i} < 1$) を許容した最適化を行う必要がある。したがって $1 \leq p < 3$ の値を使用する。

マクロ構造の初期解は、以下の体積制約付き最大応力最小化問題を解くことで生成される。

$$\begin{aligned} &\text{find} && \rho_M = \rho_{M,i} (i = 1, 2, \dots, n_M) \\ &\text{that minimize} && \sigma_{PN} = \left(\sum_{i=1}^n \hat{\sigma}_{vm,i}^P \right)^{1/P} \\ &\text{subject to} && V = \sum_{i=1}^n v_i \rho_i \leq \bar{V} \leq V_{\max} \\ &&& \rho_i \in [0, 1], \end{aligned} \quad (5)$$

ここで、 $\hat{\sigma}_{vm,i}$ は要素 i の緩和応力、 P は p -ノルム係数であり、 P が大きくなるにつれ σ_{PN} は最大応力に σ_{\max} に近づく。このようにして得られたマクロ構造は、次のステップで各要素に適切なミクロ構造が当てはめられ、同時最適化の初期解として用いられる。

(4) フルスケール構造構築のためのミクロ構造選択

マクロ構造の各要素に適用するミクロ構造は、あらかじめ用意したデータセットから選択される。本研究では、等方性材料として解析したマクロ構造の物性値を基に、ミクロ構造の体積率とセルタイプを決定する。

まず、マクロ構造の各要素の密度 $\rho_{M,i} \in [0, 1]$ は、適用するミクロ構造の体積率 v_f に対応している。したがって各セルタイプの中から、密度 $\rho_{M,i}$ に最も近い体積率 v_f をもつミクロ構造それぞれ選択する。したがって各セルタイプ $N \in \{1, 2, \dots, N_{\text{type}}\}$ に対し、ミクロ構造が1つずつ選択され、それに対応する弾性マトリクス $D_{H,N}$ も一意に決まる。次に、密度 $\rho_{M,i} \in [0, 1]$ の材料分布であるマクロ構造を、式(4)に示すヤング率を用いて等方性材料として解析し、各要素の応力テンソル $\sigma_i = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_{xy})$ を算出する。最後に、マクロ構造の各要素の応力テンソル σ_i と、セルタイプ N の弾性マトリクス $D_{H,N}$ を用

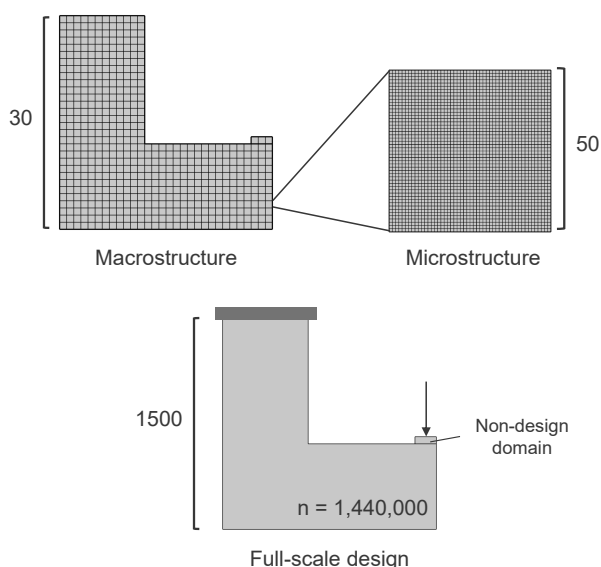


図-4 解析対象

いてひずみエネルギーを計算し、その値が最小となるセルタイプ N_i^* を選択する。これを以下の式で表す。

$$N_i^* = \arg \min_{N_i \in \{1, 2, \dots, N_{\text{type}}\}} \frac{1}{2} \sigma_i^T \mathbf{D}_{H, N_i}^{-1} \sigma_i \quad (6)$$

ここで、 N_{type} は用いるマイクロ構造のセルタイプ数、 σ_i はマクロ構造の要素 i の応力テンソル、 $\mathbf{D}_{H, N}$ はセルタイプ N の均質化弾性マトリクスである。式 (6) は、マクロ構造の各要素 i の応力状態 σ_i に対し、全セルタイプ N_{type} の中で最も剛性が高くなるセルタイプ N_i^* を選択することを意味する。このようにして決定されたセルタイプ N_i^* のマイクロ構造が、マクロ構造の要素 i に適用される。この操作をすべての要素 n_M に対して行うことで、フルスケール構造を生成する。

このフルスケール構造の生成方法は、本来の最適化問題 (1) に対して低忠実度最適化と位置付けることができる。こうして構築されたフルスケール構造は、高忠実度評価にて本来の最適化問題 (1) により性能が評価される。

(5) フルスケール解析に基づく高忠実度評価及びエリート解選択

高忠実度評価では、3.4 節により複数生成された候補解すべてに対してフルスケールの応力解析を行い、最適化問題 (1) に示す目的関数により評価を行う。すべての候補解は $\rho \in \{0, 1\}$ の白黒設計で表現されており、構造格子により離散化され、有限要素法を用いて解析される。ここでは均質化法や応力に対する緩和手法などは適用せず、フルスケール解析による厳密な最大応力値を評価している点に留意したい。

エリート解選択では、上述した評価結果を基に、候補解の中からより目的関数値が優れた解（エリート解）を選択する。本研究では NSGA-II (Nondominated Sorting Genetic Algorithm II) で用いられる選択アルゴリズム [7] を用いる。これにより目的関数空間上の候補解をランク付けし、エリート解を選択する。

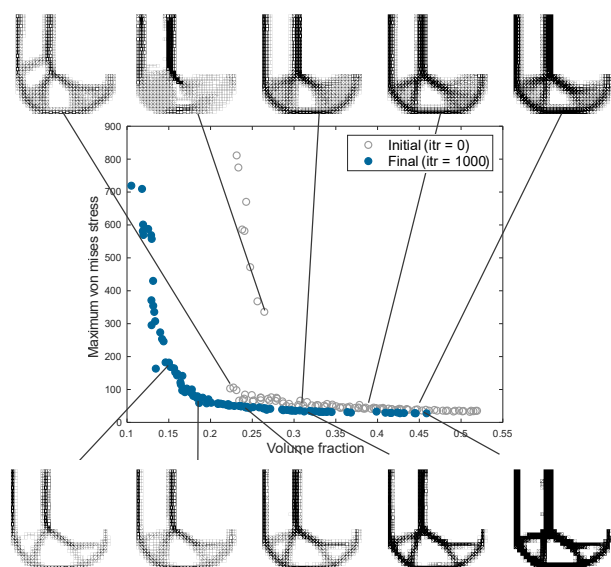


図-5 目的関数空間および初期解（上段）と最適化結果（下段）の構造

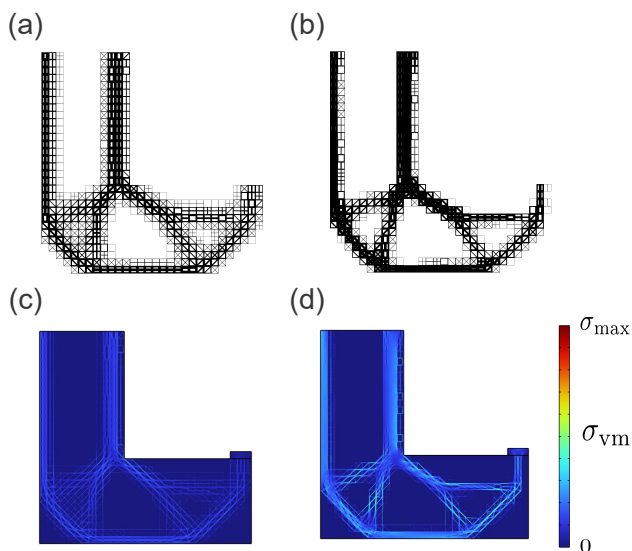


図-6 初期解及び最適化結果の構造と応力分布の比較。(a) 初期解の構造, (b) 初期解の応力分布, (c) 最適化結果の構造, (d) 最適化結果の応力分布。

(6) マクロ構造の解更新

3.5 節で選択したエリート解を基に、マクロ構造の材料分布 ρ_M を更新する。本研究では、Variational Autoencoder (VAE) を用いて、エリート解のマクロ構造から新たなマクロ構造を生成する。VAE は入力データを潜在変数に圧縮するエンコーダと、潜在変数から元のデータを復元するデコーダから構成される生成モデルの 1 種である。高次元の入力データを低次元の潜在変数に圧縮し、その潜在変数から高次元のデータを生成することで、入力データの特徴を持つ新たなデータを生成することができる。したがってエリート解のマクロ構造を学習することにより、エリート解の特徴を持った新しいマクロ構造を生成することが可能である。この

ようにして複数生成されたマクロ構造は、3.4節に示すように各要素に適切なミクロ構造が適用され、次の候補解となるフルスケール構造が生成される。

4. 数値例

本章では、数値例として式(1)に示す最大応力最小化と体積最小化の2目的最適化問題を扱い、提案手法の有用性を示す。

(1) 解析対象

本研究では、最大応力最小化問題のベンチマークとして知られる2次元のL字はりを解析対象とする。境界条件および寸法を図4に示す。ミクロ構造の要素数は 50×50 、マクロ構造の要素数は 30×30 であり、フルスケール構造の全要素数 n は1,440,000である。固体のヤング率 E_1 は1、空気のヤング率 E_0 は0とし、ポアソン比 ν は0.3とする。また荷重部の応力集中を避けるため非設計領域を設ける。

(2) 初期解生成

初期解のマクロ構造は、密度法を用いた一般的なトポロジー最適化により、式(5)に示す体積制約付き最大応力最小化問題を解くことで生成される。多様な解を生成するため、式(4)に示すペナルティ係数 p に1.0 2.5、式(5)に示す p -ノルム係数に6または8を採用し、それぞれ体積制約 \bar{V}/V_{\max} 0.2 0.5で変化させ、計186個のマクロ構造の初期解を生成した。そのすべての解の各要素に対して、3.4節に示すようにミクロ構造を適用したフルスケール構造を同時最適化の初期解とする。

(3) 最適化結果

最適化結果の目的関数空間と一部の構造を図5に示す。フルスケール解析により算出した式(1)の目的関数に基づいて最適化された結果、初期解よりも大幅にパレートフロントが前進していることがわかる。上段の初期解に着目すると、マクロ構造のトポロジーや材料分布の偏りが解によって大きく異なるため、多様な構造が生成されている。一方、下段の最適化結果に着目すると、マクロ構造のトポロジーは変わらず、部材の太さや各要素の密度の違いによって体積が異なる構造が生成されていることがわかる。

次に、初期解及び最適化結果の構造と応力分布の比較を図6に示す。これらは体積率がほぼ等しい解であり、図6(a)に示す初期解の体積率は $V/V_{\max} = 0.3257$ 、図6(b)に示す最適化結果の体積率は $V/V_{\max} = 0.3258$ である。これに対し、最大応力値は図6(c)に示す初期解が $\sigma_{\max} = 49.66$ 、図6(d)に示す最適化結果は $\sigma_{\max} = 33.80$ であり、約32%削減された。構造に着目すると、初期解はマクロ構造のグレースケールが多く、体積率の低いミクロ構造が多数適用されているが、最適化結果は外形にはほぼ固体のミクロ構造が適用され、内部に体積率が比較的小さいミクロ構造が適用されている。また目的関数が向上した要因には、密度フィルターの影響があると考えられる。初期解のマクロ構造生成に用いた勾配型トポロジー最適化では、数値安定性のために密度フィルターにより隣接した要素の設計変数を平

滑化する必要がある。そのため、本来材料が不要な要素にも小さい密度のミクロ構造が配置される可能性がある。図6(c)の応力分布を見ると、応力がほぼ生じていない不要な部材が多数存在していることがわかる。一方提案手法では、VAEによりエリート解の材料分布を繰り返し学習させることで、隣接した要素の影響を受けずに不要な箇所の材料を削減できていると考えられる。その結果、図6(d)に示すように、初期解の応力分布と比較して応力集中を分散し、より均一な応力分布が得られたと考えられる。また、部材から一部張り出したような、ほぼ荷重の影響を受けていないミクロ構造が見受けられるが、ミクロ構造のセルタイプをより多様にする、最小寸法を設けるなどして対処可能であると考えられる。

5. 結言

外形形状と微細構造の同時トポロジー最適化には一般的に均質化法が用いられるが、これは周期的な構造を前提として全体構造の力学的性能を導出するため、非周期的な微細構造をもつ構造の最適化や局所的な力学的挙動を捉える必要がある最適化問題への適用が課題である。そこで本研究では、データ駆動型マルチフィデリティトポロジーの枠組みを応用して、フルスケール解析結果に基づく外形形状と微細構造の同時トポロジー最適化手法を提案した。数値例では最大応力最小化問題に取り組み、局所的な応力挙動を捉えた最適化により、応力を分散した解が得られた。

謝辞: 本研究はJSPS 科研費 23H03799, 24KJ1639 の助成を受けたものです。

参考文献

- [1] Wu, J. et al.: Topology optimization of multi-scale structures: a review, *Struct. Multidiscipl. Optim.*, Vol.63, pp.1455-1480, 2021.
- [2] Gao, J. et al.: Concurrent topology optimization of multiscale composite structures in Matlab, *Struct. Multidiscipl. Optim.*, Vol.60, No.6, pp.2621-2651, 2019.
- [3] Chandrasekhar, A. et al.: Graded multiscale topology optimization using neural networks, *Adv. Eng. Softw.*, Vol.175, pp.103359, 2023.
- [4] Yaji, K. et al.: Data-driven multifidelity topology design using a deep generative model: Application to forced convection heat transfer problems, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, Vol.388, pp.114284, 2022.
- [5] Kingma, D. P. and Welling, M.: Auto-Encoding Variational Bayes, *arXiv preprint*, 2013.
- [6] Xia, L. and Breitkopf, P.: Design of materials using topology optimization and energy-based homogenization approach in Matlab, *Struct. Multidiscipl. Optim.*, Vol.52, No.6, pp.1229-1241, 2015.
- [7] Deb, K. et al.: A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II, *IEEE Trans. Evol. Comput.*, Vol.6, No.2, pp.182-197, 2002.