

量子アニーリングを用いたマルチマテリアル・トポロジー最適化の質量制約に関する検討

Investigation on mass constraints for multi-material topology optimization using quantum annealing.

中野憲伸¹⁾ 干場大也²⁾ 西口浩司³⁾ 芳賀栞⁴⁾ 山本佳士⁵⁾ 加藤準治⁶⁾
Kenshin Nakano, Hiroya Hoshiba, Koji Nishiguchi, Shiori Haga, Yoshihito Yamamoto and Junji Kato

¹⁾名古屋大学大学院工学研究科土木工学専攻 (〒 464-8603 名古屋市千種区不老町,E-mail:

nakano.kenshin.y0@s.mail.nagoya-u.ac.jp)

²⁾博 (工) 名古屋大学大学院工学研究科土木工学専攻 助教 (〒 464-8603 名古屋市千種区不老町,E-mail:

hoshiba.hiroya.y6@f.mail.nagoya-u.ac.jp)

³⁾博 (工) 名古屋大学大学院工学研究科土木工学専攻 准教授 (〒 464-8603 名古屋市千種区不老町,E-mail:

nishiguchi.koji.r9@f.mail.nagoya-u.ac.jp)

⁴⁾法政大学大学院デザイン工学研究科都市環境デザイン工学専攻 (〒 162-0843 東京都新宿区市谷田町 2-33, E-mail:

shiori.haga.4r@stu.hosei.ac.jp)

⁵⁾博 (工) 法政大学デザイン工学部都市環境デザイン工学専攻 教授 (〒 162-0843 東京都新宿区市谷田町 2-33, E-mail:

y.yamamoto@hosei.ac.jp)

⁶⁾Dr.-Ing. 名古屋大学大学院工学研究科土木工学専攻 教授 (〒 464-8603 名古屋市千種区不老町,E-mail:

kato.junji.i5@f.mail.nagoya-u.ac.jp)

In this study, we propose a method for solving mass-constrained multi-material topology optimization problems using quantum annealing. By employing a generalized Benders decomposition method, we formulate the problem as a mixed-integer programming model and develop a topology optimization algorithm that incorporates a Quadratic Unconstrained Binary Optimization (QUBO) formulation, which can be solved using a quantum annealer. As a numerical example, we present the optimization results of a compliance minimization problem considering mass constraints.

Key Words : Multi-material topology optimization, Quantum annealing, Mass constraint, Discrete optimization

1. はじめに

近年、量子アニーリングという方法が組み合わせ最適化問題の解法として注目されている。量子アニーリングとは、量子力学の原理を活用し最適化問題を解く手法であり、従来最適解を求めるのが難しいとされてきた組み合わせ最適化問題の求解に有効とされている。本研究の対象であるトポロジー最適化は、設計領域の材料配置を最適化することで目的関数として与えられた性能指標を最大化する手法である。トポロジー最適化問題は本来組み合わせ最適化問題の一種であるが、組み合わせ最適化問題の計算困難な側面から SIMP 法 [1] をはじめとする設計変数を連続値とし勾配基本法を用いるアプローチがよく知られている。しかし、勾配ベースのアルゴリズムでは複雑な問題設定にした場合、大抵は局所的最適解に陥る。特に複数材料の組み合わせを最適化するマルチマテリアル・トポロジー最適化問題は、通常のトポロジー最適化よりも局所的最適解に陥りやすい。そこで本研究では、マルチマテリアル・トポロジー最適化に対して量子アニーリングを用いる定式化をすることにより、既存の勾配法を用いない組み合わせ最適化問題として最適解を求解する手法を提案

する。

量子アニーリングを最適化に用いるためには二次制約なし二値最適化問題 (QUBO) で知られる特定の式の形にしなければならない。したがって、トポロジー最適化に量子アニーリングを用いるためには最適化問題を QUBO に埋め込む必要がある。Zisheng ら [2] による先行研究では量子アニーリングを利用した体積制約下におけるトポロジー最適化法を提案しており、本研究の手法はこれを質量制約下におけるマルチマテリアル・トポロジー最適化に拡張するものである。具体的には質量制約下におけるマルチマテリアル・トポロジー最適化の最適化問題を、一般化ベンダーズ分解 (GBD) 法 [3] を用いて混合整数計画問題に変化させることで QUBO へ埋め込み可能にする。得られた混合整数計画問題を QUBO に埋め込み最適化計算を繰り返し行うことにより、制約条件下で最適解を求める。ただし、本研究ではマルチマテリアル・トポロジー最適化を混合整数計画問題に定式化する際に用いる離散的な感度の定式化手法と、混合整数計画問題を QUBO に変更する際に同時に複数の材料が一つの要素に入る特異な状態を防ぐための相互排他制約項を提案し、その性能検証を行う。

2. 量子アニーリングを用いたマルチマテリアル・トポロジー最適化手法

(1) 最適化問題の定義

制約条件が質量制約のマルチマテリアル・トポロジー最適化の最適化問題は、式 (1) として表される。

$$\begin{aligned} \min_{\rho^1, \rho^2, \dots, \rho^m, \mathbf{u}} \quad & \mathbf{f}^\top \mathbf{u} \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{K}^m \mathbf{u} = \mathbf{f}, \\ & \sum_{k=1}^m (m_k \sum_{i=1}^n \rho_i^k) = M, \\ & \sum_{k=1}^m \rho_i^k \leq 1, \quad \forall i \in \{1, 2, \dots, n\}. \end{aligned} \quad (1)$$

ここで、 $\mathbf{f} \in \mathbb{R}^{n_u}$ は外力ベクトル、 $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^{n_u}$ は変位ベクトル、 $\rho^1, \rho^2, \dots, \rho^m \in \{0, 1\}^n$ は、それぞれの材料の有無を表す設計変数ベクトルであり、添え字 i は i 番目要素を示したものである。ただし、 n_u は構造全体の節点変位ベクトルの自由度数である。また、 n は要素数、 \mathbf{K}^m は m 個の材料を想定したときの剛性マトリクスであり、単位ヤング率を用いて作成した要素剛性マトリクス \mathbf{K}_i と k 番目材料のヤング率 E_k を用いて式 (2) で表される。

$$\mathbf{K}^m = \sum_{k=1}^m E_k \sum_{i=1}^n (\rho_i^k \mathbf{K}_i). \quad (2)$$

m_k は k 番目材料の質量である。制約条件の第 2 式右辺について、

$$M = nm_{\max} M_r. \quad (3)$$

であり $M_r \in (0 \leq M_r \leq 1)$ を質量制約、 m_{\max} を m 個の材料の中で最大の質量とし、設計変数の実行可能領域を最大の質量の M_r 倍までに制約するものである。

(2) QUBO の構築

GBD 法を用いて、QUBO を構築する。以下に示す式 (4) は GBD 法を用いて式 (1) の最適化問題を変形し得られる混合整数計画問題である。

$$\begin{aligned} \min_{\rho^1, \rho^2, \dots, \rho^m, \eta} \quad & \eta \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{f}^\top \mathbf{u}^j - \sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n \tilde{w}_i^{kj} (\rho_i^k - \rho_i^{kj}) \leq \eta, \quad j \in P(k), \\ & \sum_{k=1}^m (m_k \sum_{i=1}^n \rho_i^k) \leq M, \\ & \sum_{k=1}^m \rho_i^k \leq 1, \quad \forall i \in \{1, 2, \dots, n\}, \\ & \rho_i^k \in \{0, 1\}^n, \quad \forall k \in \{1, 2, \dots, m\}. \end{aligned} \quad (4)$$

ただし、 η は最適値の下限、 $P(k)$ は k 回までの反復計算によって得られた目的関数値におけるパレート最適カット集合を表す。なお、 \tilde{w}_i^{kj} は k 番目材料の平準化後の離散的な感度であり詳細は第 3 節にて述べる。得ら

れた混合整数計画問題を利用し、QUBO に埋め込むことで以下の式 (5) を得る。

$$\begin{aligned} & \tilde{\eta}(\mathbf{e}) \\ & + \sum_{j \in P(k)} A \left[\mathbf{f}^\top \mathbf{u}^j - \sum_k \left\{ \sum_i^n \tilde{w}_i^{kj} (\rho_i^k - \rho_i^{kj}) \right\} + \tilde{\alpha}^j(\mathbf{a}^j) - \tilde{\eta}(\mathbf{e}) \right]^2 \\ & + B \left[\sum_{k=1}^m (m_k \sum_{i=1}^n \rho_i^k) - M \right]^2 \\ & + C \sum_{i=1}^n \left[E_i^{\text{penal}} \left(\sum_{1 \leq k < l \leq m} \rho_i^k \rho_i^l \right) \right]. \end{aligned} \quad (5)$$

ただし $\tilde{\eta}(\mathbf{e})$, $\tilde{\alpha}^j(\mathbf{a}^j)$ はそれぞれ二値化済みの η と QUBO 埋め込みの際に必要なスラック変数である。詳細は文献 [2] を参照されたい。ここで、最後の項は相互排他制約項（詳細は第 4 節）であり、 A , B , C はペナルティ係数、 E_i^{penal} は重み付け係数である。得られた式 (5) は量子アニーリングを利用し最適解を求解可能である。以上の手法により、量子アニーリングを使用した複数材料下でのトポロジー最適化法を提案する。

3. 複数材料下における離散的感度の計算

本節では、混合整数計画問題を構築する際に必要となる複数材料下における離散的感度の計算方法について述べる。設計変数が連続の場合、目的関数の感度は随伴変数法を用いて計算することができるが、設計変数が離散の場合目的関数の感度が大きく評価されてしまうという問題が Mei ら [4] によって指摘されている..そこで、Yuan and Gengdong [5] は空隙と単一材料のトポロジー最適化において、離散的感度を設計変数が連続の場合の感度を利用することにより近似的に計算する手法を提案しているが、マルチマテリアル・トポロジー最適化では同様の手法は提案されていない。そこで、本研究では文献 [5] で提案された離散的感度の計算法をマルチマテリアル・トポロジー最適化に拡張する。

本研究では、複数材料を表現するにあたって材料ごとの設計変数を定義するため、目的関数を H で表したとき、各材料の設計変数が連続であるときの ρ_i^k における感度 $\frac{\partial H}{\partial \rho_i^k}$ は以下の式 (6) で表される。

$$\frac{\partial H}{\partial \rho_i^{kj}} = -\mathbf{u}_i^{j\top} E_k \mathbf{K}_i \mathbf{u}_i^j. \quad (6)$$

ただし、 \mathbf{u}_i^j は i 番目要素の j 回目計算によって得られた変位ベクトルである。この感度を利用し、 k 番目材料における j 回目のトポロジーによって計算される離散的感度 w_i^{kj} を以下の式 (7a) および式 (7b)、式 (8) で計算する。 j 回目の計算において a 番目材料の設計変数 ρ_i^{aj} が 1 でその他の材料の設計変数が 0 のとき、

$$w_i^{kj} = \begin{cases} -\frac{\partial H}{\partial \rho_i^{kj}}, & \text{if } E_k \leq E_a, \quad (7a) \\ -\frac{E_a}{E_k} \frac{\partial H}{\partial \rho_i^{kj}} = \mathbf{u}_i^{j\top} E_a \mathbf{K}_i \mathbf{u}_i^j, & \text{if } E_k > E_a. \quad (7b) \end{cases}$$

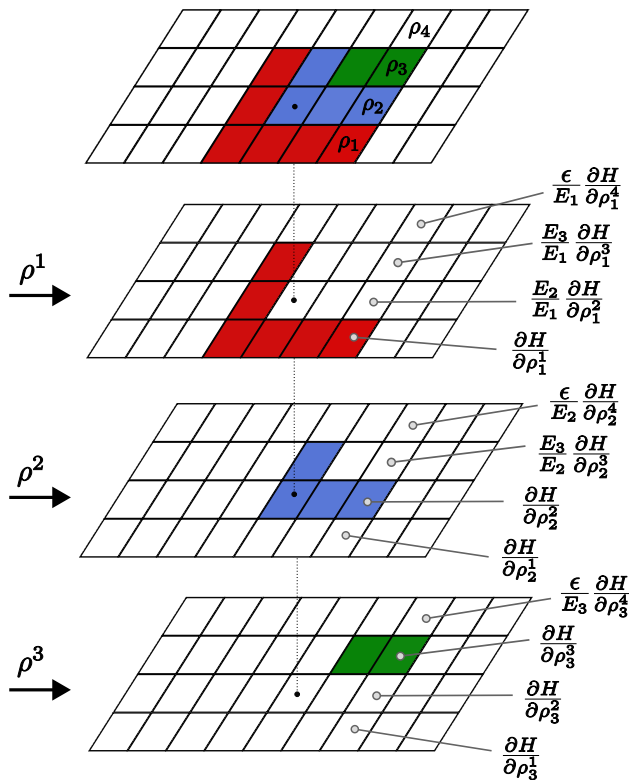


図-1 離散的感度の計算

と計算する。全ての設計変数が0、すなわち空隙の要素については、

$$\begin{aligned} w_i^{kj} &= -\frac{\epsilon}{E_k} \frac{\partial H}{\partial \rho_i^{kj}} \\ &= \mathbf{u}_i^{j\top} \epsilon \mathbf{K}_i \mathbf{u}_i^j \end{aligned} \quad (8)$$

と計算する。ただし、 ϵ は空隙の材料のヤング率である。図-1は、式(7a)および(7b)、式(8)を説明するものである。文献[4]では i 番目要素において、式(7a)の条件のようなヤング率の大きい材料から小さい材料に変更する場合における離散的感度の計算は連続的な感度と同様の値を用いることが可能であるが、式(7b)の条件のようなヤング率の小さい材料から大きい材料に変更する場合における離散的感度の計算は実際より大きく評価しすぎてしまう問題があると述べている。そのため本研究では、式(7b)および式(8)では後者の条件下で離散的感度を大きく評価しないために、現在の i 番目要素を占める材料とこれから代わりに入る材料のヤング率の比を乗ずることにより、離散的感度を大きく評価する問題を解消するはたらきをしている。この際、式(7b)および式(8)のように i 番目要素を占める材料よりも大きいヤング率を持つ材料の設計変数における感度は全て同じ値で計算されるが、質量制約を導入することで軽い材料の設計変数が優先的に配置される。

トポロジー最適化では、しばしばチェッカーボードパターンと呼ばれる市松模様の特異な構造が最適解として求められることがある。この問題を解決するために、離散的な設計変数を扱うトポロジー最適化問題では次

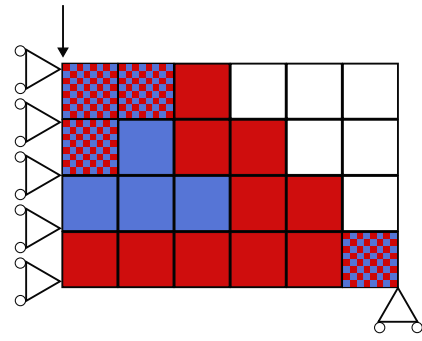


図-2 赤が材料1、青が材料2、赤と青の市松模様の要素は材料1と2が同時に配置されている状態

の式(9)をはじめとする感度フィルターを用いる。

$$\tilde{w}_i^{kj} = \frac{\sum_{l \in N_i^r} h_{i,l}^r w_l^{kj}}{\sum_{l \in N_i^r} h_{i,l}^r} \quad (9)$$

ここで、 l はフィルタ半径 r 内に存在する任意の要素を示す番号、 N_i^r は要素 i のフィルタ半径 r 内に存在する要素の集合である。また、 $h_{i,l}^r$ は要素 i と要素 l の間の距離によって定義される重み関数である。本研究では式(7a)および(7b)、式(8)をとおして得られた感度に対し、式(9)を適用する。

4. 相互排他制約項の構築

本節では、QUBO式を構築する際に、相互排他制約項を構築する方法について述べる。マルチマテリアル・トポロジー最適化では、図-2のように複数の材料が同じ要素に含まれる特異な状態を避ける必要がある。そのため本研究では次の式(10)の制約条件を含めることにより同時に複数の材料が同じ要素に含まれる状態を防いでいる。これを相互排他制約と呼ぶことにする。

$$\sum_{k=1}^m \rho_i^k \leq 1 \quad \forall i \in \{1, 2, \dots, n\}. \quad (10)$$

マルチマテリアル・トポロジー最適化に量子アニーリングを適用するためには、式(10)をQUBOに組み込み可能な形にする必要がある。そのため式(11)のように i 番目要素における各材料ごとの設計変数の積を用いて相互排他制約項を表現する手法を提案する。

$$C \sum_{i=1}^n \left[E_i^{\text{penal}} \left(\sum_{1 \leq k < l \leq m} \rho_i^k \rho_i^l \right) \right]. \quad (11)$$

このとき、重み付け係数 E_i^{penal} を用いて制約違反をしやうい要素に優先的にペナルティ係数を乗じる。例として、表-1に空隙と3種類の材料を用いる場合のペナルティを除いた相互排他制約項の値を表す。最右列をみると複数の設計変数が同時に1になる条件のみ相互排他制約項が1以上に計算されている。このようにして、式(11)をQUBOに組み込むことにより、複数の材料が同じ要素に含まれる特異な状態を防ぐことができる。

5. 最適化計算例と考察

本研究で提案した手法を用いて表-2および図-3に示す解析条件により最適化計算を行った。使用する材料

表-1 相互排他制約の例（空隙と 3 材料）

ケース	ρ_i^1	ρ_i^2	ρ_i^3	$\rho_i^1\rho_i^2 + \rho_i^2\rho_i^3 + \rho_i^3\rho_i^1$
空隙	0	0	0	0
材料 1	1	0	0	0
材料 2	0	1	0	0
材料 3	0	0	1	0
材料 1, 2	1	1	0	1
材料 1, 3	1	0	1	1
材料 2, 3	0	1	1	1
材料 1, 2, 3	1	1	1	3

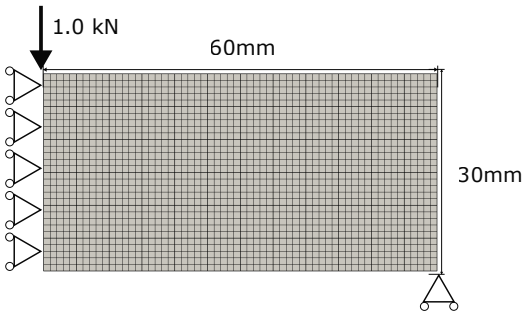


図-3 解析モデル

表-2 解析条件

要素数	60 × 30
要素タイプ	四辺形一次要素
材料モデル	線形弾性体
質量制約: M_r	50 %
ヤング率 [GPa]	材料 1: 1, 材料 2: 0.6, 材料 3: 0.1
ポアソン比: ν	0.3
質量 [kg]	材料 1: 1, 材料 2: 0.6, 材料 3: 0.1
フィルター半径 [mm]	1.5
QUBO ソルバー	FIXSTARS Amplify AE

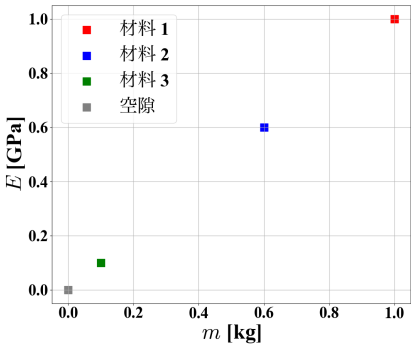


図-4 ヤング率と質量の関係

は仮想の材料物性を想定し、ヤング率と質量の関係を図-4 に、最適化結果を図-5 に示す。

結果をみると、材料を増やすごとに目的関数値の改善が見られることが確認された。これは材料を増やすことで解空間が拡大したことが反映された結果である。また、図-6 に示したミーゼス相当応力分布図をみると、材料を増やしていくほど応力が分散していることが確認でき、構造物の性能が向上していることわかる。

一方、図-7 は様々な材料物性での最適化結果を示している。図-7(a),(c) および図-7(b),(d) は入力する材料の剛性が高い順番に並んでいないのにも関わらず最適化が可能である結果を示しており、既存のマルチマテリアル・トポロジー最適化手法と大きく異なる点である。特に図-7(a),(c) は図-(c) と同じ材料の条件下で、材料の剛性と質量の組み合わせの順序のみ入れ替えた結果となっているが、類似した最適化結果が得られていることがわかる。さらに、図-7(e),(g) および図-7(f),(h) では単位質量あたりのヤング率が小さい材料が消失する最適化結果を示しており、マルチマテリアル・トポロジー

最適化法としてよく知られる Orderd SIMP 法 [6] では得られない構造が得られた。これらの結果は、本手法では入力する材料物性の順序依存がなく、初期値によらず最適化が可能である点から局所的最適解に陥りにくい手法であり、マルチマテリアル・トポロジー最適化問題に対し有効な性質を持っていることを示すものである。図-9 は、図-8 の条件下における各制約値での最適化結果の目的関数値とトポロジーの推移を示したものである。最適化開始時点を見ると各材料が散らばる結果が観察できるが、これは感度を用いて材料を配置しているため、制約が弱い状態では多くの要素が応力を受けもち、要素ごとの感度の差がほとんど見られないことから QUBO による最適化性能が低いことを表した結果であると考察する。また質量制約値が 0.5 から 0.7 までの最適化結果は材料分布が類似しており、最終的な材料分布はそれ以前のトポロジーの分布が影響を及ぼしていることがわかる。なお、図-9 の赤丸で示す箇所では、制約が厳しくなるにつれて剛性が高い材料が消失していることが確認できるが、これは制約が厳しくなることにより質量の大きい材料 1（赤）よりも質

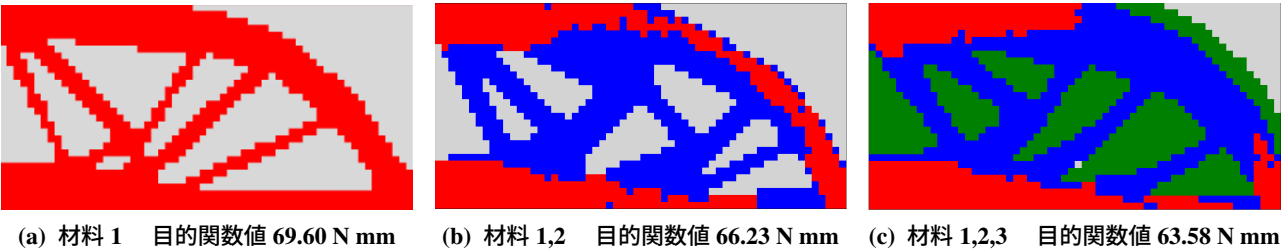


図-5 使用する材料の数ごとの最適化結果

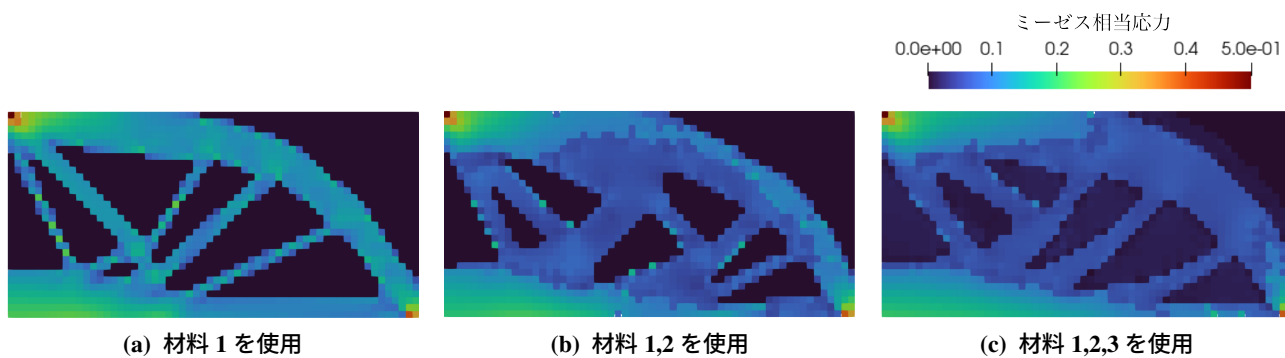


図-6 図-5 の各最適化結果におけるミーゼス相当応力分布図

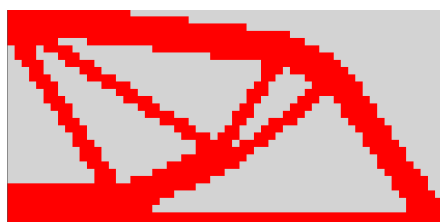
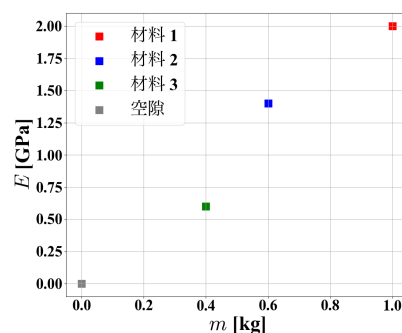
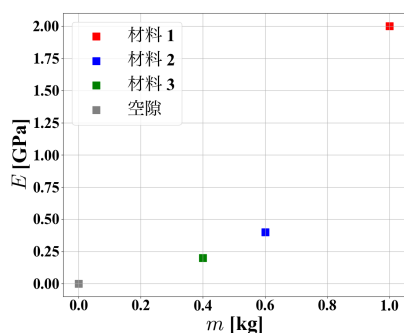
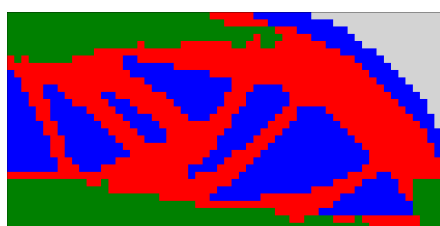
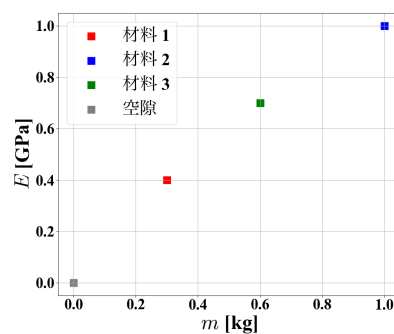
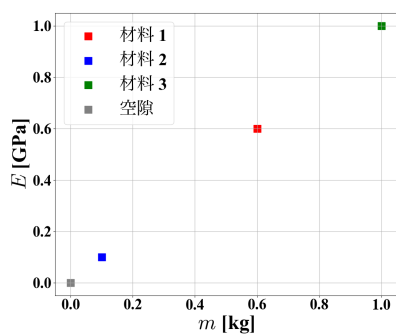


図-7 様々な最適化計算結果のトポロジー

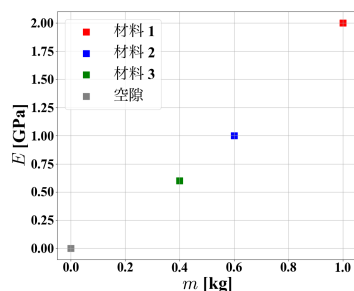


図-8 ヤング率と質量の関係

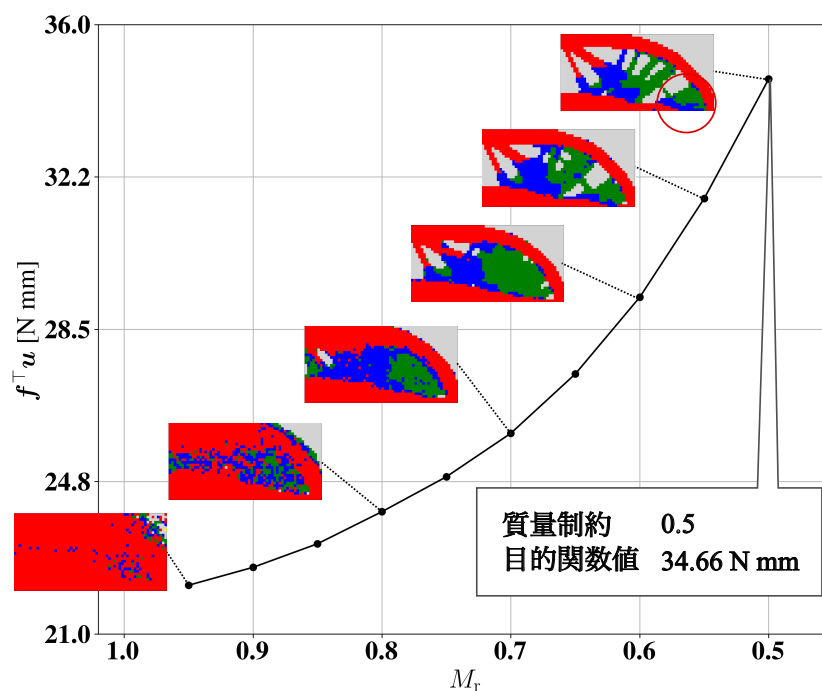


図-9 図-8 の条件下における各制約値における目的関数値とトポロジー

量が小さい材料 2 (青) の方が優先的に配置されるようになった結果であると考察する。ただし、荷重載荷点や支持点付近、アーチ部分など力学的に重要度が高い箇所においては、たとえ質量の大きい材料であっても剛性の高い材料が配置されていることが観察できる。

このように当該提案手法は、単位質量あたりのヤング率が小さい材料が消える最適化結果の観点で、Yang ら [7] による質量制約を用いた離散設計変数下のマルチマテリアル・トポロジー最適化と類似した最適化結果を得ることができることを確認した。また、既往のマルチマテリアルトポロジー最適化手法では、設計の都合上、材料番号と材料物性の順番に余計な規則性を持たせる必要があったが、提案手法ではそれに依存することなく同様な最適化結果が得られることが確認できた。これは、今後のマルチマテリアル・トポロジー最適化、ひいてはマルチフィジックス問題を扱うマルチマテリアル・トポロジー最適化問題において重要な知見を与えるものと考えられる。

一方本手法の最適化結果は、図-7(h) のように材料 2 (青) が占有する箇所に材料 1 (赤) が点在するようなトポロジーが得られている点について触れておきたい。これは前節で述べたように、材料ごとの感度の差があまり大きくない箇所に生じやすい現象だと考察する。特に類似した材料物性を持つ部材を用いた最適化で発生しやすい現象である。設計および製作上の観点から材料が過度に分散した配置は避けるべきであり、今後は各材料をある程度纏まりやすくするような定式化の検討が必要だと考える。

6. 結論

本研究では質量制約下におけるマルチマテリアル・トポロジー最適化のための量子アニーリング・トポロジー最適化手法を開発した。最適化結果より提案手法がマ

ルチマテリアル・トポロジー最適化に対し局所的最適解を避けることができる有効な手法であることが確認された。

参考文献

- [1] Martin P Bendsøe and Ole Sigmund. Material interpolation schemes in topology optimization. *Archive of applied mechanics*, 69:635–654, 1999.
- [2] Zisheng Ye, Xiaoping Qian, and Wenxiao Pan. Quantum topology optimization via quantum annealing. *IEEE Transactions on Quantum Engineering*, PP:1–15, 01 2023.
- [3] Eduardo Muñoz and Mathias Stolpe. Generalized benders' decomposition for topology optimization problems. *Journal of Global Optimization*, 51(1):149–183, 2011.
- [4] Yu-lin Mei, Xiao-ming Wang, and Geng-dong Cheng. Binary discrete method of topology optimization. *Applied Mathematics and Mechanics*, 28(6):707–719, 2007.
- [5] Yuan Liang and Gengdong Cheng. Topology optimization via sequential integer programming and canonical relaxation algorithm. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 348:64–96, 2019.
- [6] Wenjie Zuo and Kazuhiro Saitou. Multi-material topology optimization using ordered simp interpolation. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 55:477–491, 2017.
- [7] Xingtong Yang and Ming Li. Discrete multi-material topology optimization under total mass constraint. *Computer-Aided Design*, 102:182–192, 2018.