はじめての
精密工学

はじめてのトポロジー最適化

Topology Optimization for Beginners/Kentaro YAJI

大阪大学　矢地謙太郎

1. は じ め に

図 1 をご覧いただきたい．一体何に見えるだろうか？

本報のタイトルにある「トポロジー最適化」を知っている読者は，これがある最適化問題の結果であることはすぐに気づくであろう．一方で，トポロジー最適化を知らない，あるいは材料力学や構造力学を学んだ経験がないとしても，この図が「右下を引っ張ってもあまり変形しなさそうな構造」であることに気づくかもしれない．

いきなり奇妙な問いかけからスタートしたが，さっそく種明かしをすると，図 1 はいわゆる剛性最大化問題をトポロジー最適化で解いた結果である．説明を付け加えると，質量の上限値が決められた状態で，図中右下の荷重がかかっている箇所の変形量が最小になる構造をコンピュータによって予測した結果を表している．要するに軽くて強い構造である．

さて，ここまでのところで「なんだか面白そうだ」と思ってもらえれば幸いだが，「で？」という素直な感想を抱いた読者にもしばしお付き合い願いたい．本報の目的は，トポロジー最適化について，聞いたことはあるけど詳細はさっぱり知らない，あるいはまったく聞いたこともないという読者を対象として，その魅力を伝えることである．誤解を恐れずに言うと，トポロジー最適化は人間の想像だけでは思いつきそうもない最適な形状を，数理的な最適化理論に基づきコンピュータ上で自動的に導き出すことができる．それゆえ，次世代の設計支援ツールとして近年注目を集めており，三次元プリンターとの相性が良いことも相まって，自動車や航空機の設計に利用されつつある．読者のほとんどは工学に関係する仕事・勉強に日々勤しんでいるはずなので，大まかにでもトポロジー最適化を知っておいて損はないはずだ．

筆者の経験上，初学者がトポロジー最適化を習得するには，とにかくまずは使ってみることが最も効果的である．とは言っても，さすがに理論をまったく知らずにトポロジー最適化を行うのは不可能なので，今回は細かい話は抜きにして，「要するにトポロジー最適化はこういうもの」ということをなるべく端的に多くの人に伝えたいと思い筆を執った．願わくは，本報によって読者が「トポロジー最適家」の一員に加わるきっかけになれば，筆者としてはうれしい限りである．

2. トポロジー最適化

ここではトポロジー最適化の基本的な考え方や，コンピュータによって図 1 のような最適化構造が得られる仕組みを簡単に説明する．なお，トポロジー最適化と一口に言ってもこれまでにいろいろな方法が提案されている[1]．ここでは理論が比較的単純で世界的に見てもユーザーが最も多い密度法[2]と呼ばれる方法に基づき話を進めていく．

初めに，トポロジー最適化の基本的な考え方を説明する．まずは密度法に限らず，一般にトポロジー最適化と呼ばれるものに共通する話から入る．イメージをつかみやすいように，**図 2** のようなディスプレイを想像してみよう．このディスプレイは白黒で，しかも解像度はかなり低いが，図 2 のような文字を表現することは可能だ．このディスプレイは，各ピクセルの色を白か黒かに制御することに

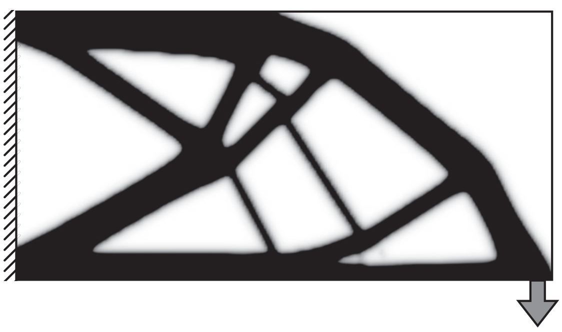

図 1　Q：何に見えるだろうか？

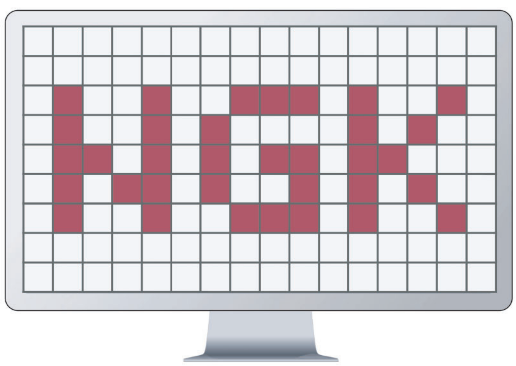

図 2　ディスプレイによる描画

よって，さまざまな文字を表現できる．既に気づいた読者もいると思うが，トポロジー最適化が実際にやっていることは，まさにこのディスプレイと同じである．すなわち，各ピクセルの色を調整することによって，図1のような構造物を表現している．ちなみに，トポロジー最適化の分野では，このディスプレイに相当する部分を，「固定設計領域」と呼んだり，単に「設計領域」と呼んだりする．また，各ピクセルの色を決めるものは「特性関数」と呼ばれ，材料があるピクセルで1，ないピクセルで0を取る．

構造の表現方法は以上のとおりで，次にどうやって各ピクセルの色を調整するか，すなわちどうやって最適化を行うかについて説明する．これに先立ち，われわれが最適化したいことを整理しておくと，「所望の目的を達成するために，固定設計領域における最適な材料分布を求めたい」ということになる．ちなみに，具体的な例として図1の構造物の剛性最大化問題の場合は，「限られた材料で，構造物の剛性が最大になる材料分布を求めたい」ということに相当する．このことを最適化問題として一般的な形式でまとめると，以下のように書ける．

$$\underset{\mathbf{d}\in\{0,1\}}{\text{minimize}}\ J(\mathbf{d})$$

$$\text{subject to } G(\mathbf{d})\leq\bar{G}$$

ここで，Jは目的関数と呼ばれ，最小化（あるいは最大化）したい評価指標である．一方，Gは上限値を規定する制約関数である．剛性最大化問題であれば，Jは変形量でGは材料の質量に相当する．また，$\mathbf{d}=[\mathrm{d}_1\,\mathrm{d}_2\ldots\mathrm{d}_N]^{\mathrm{T}}$は設計変数と呼ばれ，ピクセル数$N$に等しい次元のベクトルであり，各ピクセルにおいて材料の有無（$\mathrm{d}_i=0$ or 1）を表現する．数理計画法になじみのある読者であれば，この最適化問題は0–1整数計画問題であることが分かる．

さて，ここまで来ると後はコンピュータを使って解くだけ，といきたいところだが，実はコンピュータで計算する前にもう少し工夫がいる．というのも，一般にトポロジー最適化では，設計変数の次元がピクセル数に相当し，数万から数十万，場合によっては数億の設計変数を扱う最適化問題を解かなくてはならない．設計変数は0か1の整数であり，天文学的な組み合わせの中から最適なものを見つけることになる．もしかしたら将来的に量子コンピュータ等を使って解けるようになるのかもしれないが，現状のコンピュータでは，計算開始のリターンキーを押してから解が得られるまでに，途方もない時間がかかる（場合によっては最適化を実行した人が生きている時代に計算が終わらないかもしれない．いくら将来的に役立つ最適化であっても待ち時間が長すぎる）．ゆえに，整数の組み合わせでトポロジー最適化問題を解く場合は，設計変数の次元を大幅に削減する工夫が必要となる．しかし，これは最適化構造の表現自由度を下げることに相当するため，比較的単純な幾何形状の最適化結果しか得られず，人知を超えた設計案の創成につながりにくいと考えられる．

ここで登場するのが，前出の密度法だ．この方法は最適化構造の表現自由度を落とさないまま効率的に解くことができる．密度法では，先ほどまで0か1という整数で扱っていた設計変数を，正規化した材料密度に対応する0から1の連続変数に置き換える．これにより，微分情報を活用することができる．具体的には，目的関数の設計変数に関する勾配 $\mathrm{d}J/\mathrm{d}\mathbf{d}$（※感度と呼ぶ）を算出することによって，整数を扱う離散最適化問題よりも一般に効率的な解探索を行うことができる連続最適化問題に置き換える．どのように感度情報を効率的に取得するのか，というのは紙数の都合上割愛するが，ポイントだけ伝えるとすれば随伴法（Adjoint Method）が肝となる．また，対象とする物理現象と設計変数をひも付ける必要があるが，基本的には材料の有無に応じて材料特性が変化するようにすればよい．例えば，剛性最大化問題では，材料のない領域でヤング率が0（ただし，一般には計算の都合上非零の小さい値を設定する）になるようにすればよい．また，連続変数を扱うことから中間値，いわゆるグレースケールの存在を許容することになるが，最適化構造からグレースケールを除去する方法はこれまでに多数提案されている．細かい話をするときりがないので，随伴法，材料特性と設計変数の関係，グレースケールの除去などについて興味のある読者は文献2)を参照されたい．

さて，込み入ったところまで若干深入りしてしまった感じは否めないものの，ざっくりとトポロジー最適化を理解する上で重要な部分の説明はほぼ終わった．要点をまとめると，①最適化問題を定式化し，②固定設計領域を複数のピクセルに分割して，③各ピクセルに0から1の連続値を与え，④物理場の数値計算を行い，⑤感度情報をもとに連続最適化を実行する，ということになる．

次のステップとしては，これらの手続きをコンピュータに実装しなければならない．もしかするとややこしいと感じるかもしれないが，そういった読者へ朗報がある．実は，上の手続きの②～⑤は，自分でソースコードを書かなくても，汎用的なツールが既に出回っている．代表的なものとしては，有限要素解析の汎用ソフトウエアCOMSOL Multiphysicsが挙げられる．このソフトウエアを用いれば，②～⑤のすべてをコンピュータの画面上で簡単に行うことができるのだ．そのほかにも，トポロジー最適化の研究者がMATLABやPythonのソースコードを無料で公開しているので，結局のところ，解きたい最適化問題を定式化してしまえば，あとはツールに任せて結果が出るのを待つのみである[3)]．もちろん，トポロジー最適化を使いこなすにはそれぞれの手続きについてそれなりに理解しなければならないが，冒頭で述べたとおり，とりあえず使ってみる分には，これらのツールにおんぶに抱っこで一向に構わないと筆者は思う．まず使ってみて，「よく分からないけど何か面白い形が出てきたぞ」「そもそも何でこのような形が出てくるのだろうか？」という興味や疑問から次の段階に進めばよい．

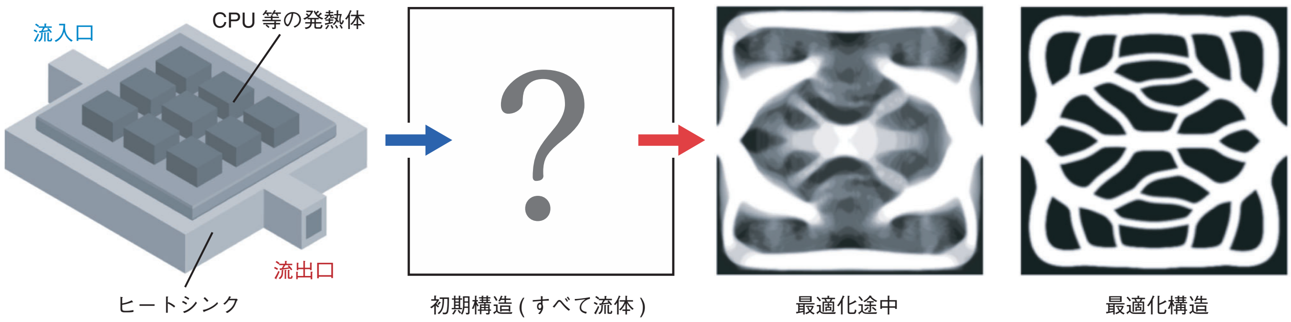

図 3　最適化の様子：ヒートシンクの冷却性能最大化を目的としたトポロジー最適化

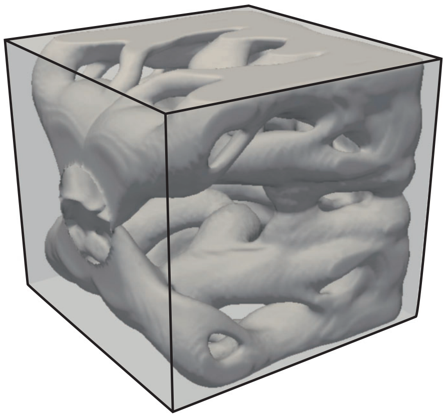

図 4　ヒートシンクの三次元トポロジー最適化

3. 数 値 計 算 例

トポロジー最適化の適用例として，筆者のこれまでの研究における事例を紹介する．なお，筆者はこれまで流体関連分野におけるトポロジー最適化の研究を主に行ってきたので，本報では流体関連機器設計の一例として，ヒートシンク[4)5)]や電池デバイス[6)]の工学設計に展開した事例を紹介する．

図 3 は二次元の解析モデルを用いたヒートシンクのトポロジー最適化の例で，初期構造から最適化構造が得られるまでのスナップ画像である．図から分かるように，トポロジー最適化ではあらかじめ恣意的な初期構造を設定する必要はなく，何もない状態（この場合はすべて流体で満たされた状態）から最適化構造が固定設計領域上に浮かび上がってくる．この最適化問題では，図中の左の流入口から右の流出口に向けて流体（白色）が流れる系を想定している．そして，規定した圧力損失の下で，発熱する固体（黒色）から熱を奪う際の冷却性能最大化を目的としている．一般に，流路の表面積を増やせば冷却性能は向上するものの，細い流路は圧力損失が大きくなるため両者はトレードオフ関係にある．このような複雑な設計問題であっても，トポロジー最適化によって自動的に最適化構造を導出することができる．

図 4 は図 3 の解析モデルを三次元化した場合の一例である．三次元の解析モデルを用いることによって，複雑に入り組んだ流路構造が得られる．もはやヒートシンクや熱交換器と言われてもピンとこないが，既存の製品と違って，製造性に対する制約は一切考慮していないため，このような複雑な流路が最適化構造として導出される．基本的に製造性に対する制約は本来向上させたい性能を損なうように働く．このことを踏まえると，製造性の良し悪しは別として，まずは作る側の制約を取っ払ったピュアな最適化構造を導出することが，今までにない革新的な設計案の創成につながるかもしれない．また，図 4 の構造は，工業製品というよりは，生物の血管を彷彿とさせる．別の話になるが，トポロジー最適化によって生物の血管が形成されるメカニズムを数理的に説明できる日も近いかもしれない．まだまだ研究の種は尽きそうにない．

最後の数値計算例として，電池デバイスの設計に展開した最新の事例を紹介する．ここで扱う電池はレドックスフロー電池と呼ばれ，次世代の大規模蓄電池として注目を集めている．レドックスフロー電池の性能にはさまざまな因子が関係している．中でもセル内部の流路設計は充放電性能を大きく左右することが知られており，これまでにさまざまなパターンが提案されている．しかし，いずれも幾何学的に単純な流路の提案にとどまっており，トポロジー最適化も含め，数理的な最適化手法を活用した事例は筆者の知る限り報告されていない．これに対し，筆者らの研究グループでは，**図 5** に示すような流路構造をトポロジー最適化によって導出することに成功している．図から分かるように，得られた最適化構造は，流入口から流出口にかけて流路が分断している．興味深いことに，流路を分断させることで多孔質電極中の電気化学反応の促進が期待できることは，既に電池分野の多くの研究者が示唆しており，これは「櫛歯型流路構造」と呼ばれている．トポロジー最適化によって，このような複雑な構造もコンピュータで自動的に導出できるのである．この研究はまだ初期段階にあり，高精度な電気化学反応モデルの実装，微細な流路構造の表現が可能な高解像度化，プロトタイプによる実験検証等を今後の展開として考えている．

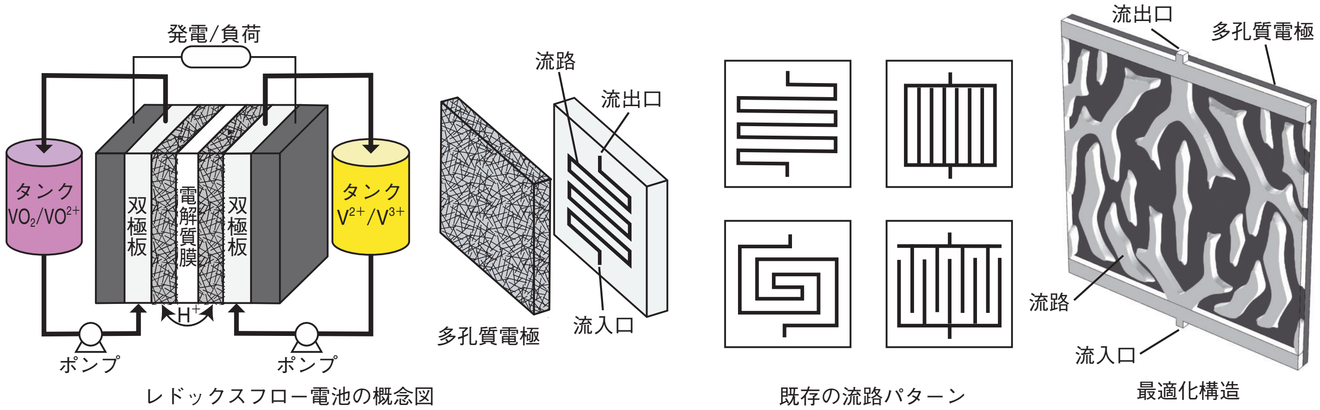

図 5 レドックスフロー電池の充放電性能最大化を目的としたトポロジー最適化

4. お わ り に

本報では，トポロジー最適化の基本的な考え方を説明した上で，筆者のこれまでの研究における数値計算例を紹介した．本報をきっかけに，トポロジー最適化の世界に少しでも踏み込む読者が増えれば筆者としてうれしい限りである．理論を深く理解したい読者は文献 2)7) を参照されたい．

終わりに少しだけ，トポロジー最適化の難しさと今後の展望を述べておきたい．

本報は，最適化問題を定式化してしまえばあとはコンピュータがなんとかしてくれる，という書きぶりだが，実際の工学設計のような複雑な最適化問題に展開していくためには，ほぼ例外なく一筋縄ではいかないことを付記しておく．その一番の理由は，最適化問題の定式化には任意性があり，解きやすい問題をいかに設定するかによって，所望の最適解が得られるか否かが決まるためである．特に実際の工学設計ではさまざまな目的関数や制約関数の下で，度々複雑な物理場を扱いながら，有望な最適解を導出しなければならない．トポロジー最適化で扱う最適化問題は，一般に膨大な数の設計変数を扱う非線形最適化問題に分類されるので，例え理論上は正しい定式化や数値実装が成されていたとしても，一回の最適化計算で得られるのは，しょせん無数にある局所最適解の内の一つである．大域的最適解が求まる保証は一切ない．このようなことから，最適解を見つけやすい「素直な」最適化問題を見出すことは極めて重要である．これに対し，われわれの研究グループでは，既知の素直な最適化問題で得られた結果をもとに，複雑な最適化問題をデータ駆動的に解くための方法論[8]や，適切な最適化問題を系統的に見出す方法論[9]に関する研究にも最近取り組んでいる．究極の目標は，誰でも簡単に素早く所望の最適化構造が得られる設計支援ツールの開発だ．海外でも，最適化問題を複雑化するのではなく，敢えて単純化する試みが近年増えつつある[10]．トポロジー最適化が現場の設計者に広く利用される日は，着実に近づいてきている．

参 考 文 献

1) O. Sigmund and K. Maute : Topology Optimization Approaches, Struct. Multidisc. Optim., **48**, 6（2013）1031-1055.
2) M.P. Bendsøe and O. Sigmund : Topology Optimization : Theory, Methods and Applications, Springer, New York,（2003）.
3) E. Andreassen, A. Clausen, M. Schevenels, B.S. Lazarov and O. Sigmund : Efficient Topology Optimization in MATLAB Using 88 Lines of Code, Struct. Multidisc. Optim., **43**, 1（2011）1-16.
4) K. Yaji, T. Yamada, S. Kubo, K. Izui and S. Nishiwaki : A Topology Optimization Method for a Coupled Thermal-Fluid Problem Using Level Set Boundary Expressions, Int. J. Heat Mass Trans., **81**（2015）878-888.
5) K. Yaji, M. Ogino, C. Chen and K. Fujita : Large-Scale Topology Optimization Incorporating Local-in-Time Adjoint-Based Method for Unsteady Thermal-Fluid Problem, Struct. Multidisc. Optim., **58**, 2（2018）817-822.
6) K. Yaji, S. Yamasaki, S. Tsushima, T. Suzuki and K. Fujita : Topology Optimization for the Design of Flow Fields in a Redox Flow Battery, Struct. Multidisc. Optim., **57**, 2（2018）535-546.
7) 西脇眞二，泉井一浩，菊池昇：トポロジー最適化，丸善，（2013）.
8) K. Yaji, S. Yamasaki, S. Tsushima and K. Fujita : A Framework of Multi-Fidelity Topology Design and Its Application to Optimum Design of Flow Fields in Battery Systems, Proc. ASME 2019 IDETC/CIE, IDETC 2019-97675（2019）.
9) S. Yamasaki, K. Yaji and K. Fujita : Knowledge Discovery in Databases for Determining Formulation in Topology Optimization, Struct. Multidisc. Optim., **59**, 2（2019）595-611.
10) X. Zhao, M. Zhou, O. Sigmund and C.S. Andreasen : A "Poor Man's Approach" to Topology Optimization of Cooling Channels Based on a Darcy Flow Model, Int. J. Heat Mass Trans., **116**（2018）1108-1123.