

流体問題を対象としたトポロジー最適化における 離散ボルツマン方程式に基づく感度解析手法

SENSITIVITY ANALYSIS BASED ON DISCRETE BOLTZMANN EQUATION IN TOPOLOGY OPTIMIZATION FOR FLUID PROBLEMS

矢地 謙太郎¹⁾, 山田 崇恭²⁾, 吉野 正人³⁾, 松本 敏郎⁴⁾, 泉井 一浩⁵⁾, 西脇 眞二⁶⁾

Kentaro YAJI, Takayuki YAMADA, Masato YOSHINO, Toshiro MATSUMOTO, Kazuhiro IZUI and Shinji NISHIWAKI

- | | | | |
|-------------------|-------------|---------------|---|
| 1) 京都大学大学院 工学研究科 | (〒 615-8540 | 京都市西京区京都大学桂, | E-mail: yaji.kentarou.74v@st.kyoto-u.ac.jp) |
| 2) 京都大学大学院 工学研究科 | (〒 615-8540 | 京都市西京区京都大学桂, | E-mail: takayuki@me.kyoto-u.ac.jp) |
| 3) 信州大学学術研究院 工学系 | (〒 380-8553 | 長野市若里 4-17-1, | E-mail: masato@shinshu-u.ac.jp) |
| 4) 名古屋大学大学院 工学研究科 | (〒 464-8603 | 名古屋市千種区不老町, | E-mail: t.matsumoto@nuem.nagoya-u.ac.jp) |
| 5) 京都大学大学院 工学研究科 | (〒 615-8540 | 京都市西京区京都大学桂, | E-mail: izui@me.kyoto-u.ac.jp) |
| 6) 京都大学大学院 工学研究科 | (〒 615-8540 | 京都市西京区京都大学桂, | E-mail: shinji@prec.kyoto-u.ac.jp) |

This paper proposes a methodology for sensitivity analysis in fluid dynamics problems based on the use of the discrete Boltzmann equation, in which high accuracy boundary conditions are introduced in the topology optimization using the lattice Boltzmann method. In the proposed method, the lattice Boltzmann method, an explicit scheme that can be formulated as a simple numerical algorithm suitable for parallel computation, is used to solve the state and adjoint fields. Numerical examples of a flow channel design problem are provided to confirm the validity of the proposed method.

Key Words: Lattice Boltzmann Method, Sensitivity Analysis, Adjoint Variable Method, Topology Optimization, Level Set Method

1. 緒言

トポロジー最適化⁽¹⁾は構造の形状変更のみならず、孔が創出するような形態変更をも許容する最も設計自由度の高い構造最適化手法である。この方法の基本的な考え方は、構造最適化問題を指定した領域内における材料分布問題への置き換えにあり、特性関数を導入することにより、その最適な材料分布を表現する。これまでに構造力学問題を中心として、熱伝達問題⁽²⁾、電磁波特性問題⁽³⁾など様々な物理問題を対象とした最適化問題に適用されている。流体問題への適用はBorrvallとPettersson⁽⁴⁾によってその方法論が初めて提唱された。その後、彼らの方法論に基づく研究が幾つか報告されており、圧力損失最小化を目的とした流路設計⁽⁵⁾、熱交換効率最大化を目的とした熱交換器の設計⁽⁶⁾、攪拌効率最大化を目的としたマイクロミキサの設計⁽⁷⁾等へ適用され成功を収めている。

流体問題を対象としたトポロジー最適化では、一般に有限要素法 (Finite Element Method: 以下, FEM) を用いて流れ場の数値計算が行われているが、格子ボルツマン法 (Lattice

Boltzmann Method: 以下, LBM)⁽⁸⁾を用いた新たなトポロジー最適化手法が近年注目を集めている。LBMは気体分子運動論におけるボルツマン方程式に基づく数値計算手法であり、流体を仮想粒子の集合体と考え、その粒子の速度分布関数から巨視的な物理量である流速や圧力を算出する。一般に、非圧縮粘性流体の数値計算では、流れ場の質量保存を満足させるよう、圧力に関するポアソン方程式を反復計算によって解く必要があるが、LBMではこのような手続きは必要とせず、速度分布関数に関する時間発展方程式を陽的に解くだけで良い。そのため、アルゴリズムが単純な完全陽解法として記述されることから、LBMは並列計算に適した流れ場の数値計算手法として注目を集めている。更に、LBMは質量保存性に優れた手法であることから、多孔質内流⁽⁹⁾や、二相流⁽¹⁰⁾等の複雑な流れ場に適した手法である特徴を持つ。

Pingenら⁽¹¹⁾は、LBMを適用したトポロジー最適化手法を最初に提唱しており、FEMを用いた先行研究⁽⁴⁾と同様の結果を得ている。しかしながら、彼らの方法論は離散系の支配方程式によって最適化問題を定式化していることから、設計感度の算出に大規模な非対称疎行列を扱う必要性があり、大規模問題への拡張は、行列計算に要する計算コストの観点

から困難といえる．これに対し著者ら^(12,13)は、連続系のボルツマン方程式によって最適化問題を定式化することで、設計感度の算出に行列計算を必要としない、LBMを適用したトポロジー最適化手法を提案している．

他方、これらのLBMを適用したトポロジー最適化に関する先行研究では、流れ場の流入及び流出境界条件として、ボルツマン方程式の平衡解である局所平衡分布関数を境界上の速度分布関数に置き換えることで、流速もしくは圧力の規定値を与える方法を用いている．しかしながら、この境界条件はナビエ・ストークス方程式を満足する流れ場に対して、十分な精度を得ることが出来ず、計算の過程でしばしば数値的に不安定になることが知られており、LBMではより高精度の境界条件が通常用いられる．

そこで本研究では、LBMで用いられる代表的な境界条件を導入可能な新しいトポロジー最適化手法を構築する．先行研究⁽¹³⁾では最適化問題の定式化に連続系のボルツマン方程式を用いているが、本研究では、仮想粒子の速度空間に関して離散化したボルツマン方程式である離散ボルツマン方程式を用いて最適化問題の定式化及び随伴変数法に基づく感度解析を行う．この変更により、LBMで通常用いられる境界条件を与えることが可能になると共に、本提案手法は先行研究⁽¹³⁾と同様に設計感度の算出に行列計算を一切必要としない．また、通常のトポロジー最適化ではグレースケールなどの数値不安定性を生じてしまう問題点を持つので、本研究ではYamadaら⁽¹⁴⁾が提案するレベルセット法に基づく境界表現法を導入し、方法論の構築を行う．以下、2章ではLBMの基本的な考え方を述べる．3章ではレベルセット法に基づくトポロジー最適化手法の概要を述べ、LBMを用いた内部流れにおける圧力損失最小化問題を定式化する．4章では、前章の定式化に基づいた数値実装法について述べる．最後に数値解析例を示し、本研究の妥当性を検討する．

2. 格子ボルツマン法

本章では、等温場における単相の非圧縮性粘性流体を対象としたLBMについて考える．なお、以後使用する物理量はすべて、代表長さ L 、粒子の代表速さ c 、時間スケール $t_0 = L/U$ (U : 流れの代表速さ)、代表密度 ρ_0 を用いて無次元化されたものとする．

LBMでは、流体を有限個の速度を持つ仮想粒子の集合体で近似的に表現し、各粒子の衝突及び伝播を粒子の速度分布関数を用いて逐次計算し、その結果から得られる速度分布関数のモーメントによって流速、圧力等の巨視的な物理量を算出する．この手法は気体分子運動論のアナロジーを利用した流れ場の数値計算手法であり、位置 x 、時刻 t における、速度 ξ で運動する仮想粒子の速度分布関数 $f = f(x, t, \xi)$ に関する次のボルツマン方程式に基づく．

$$Sh \frac{\partial f}{\partial t} + \xi \cdot \nabla f = Q(f) \quad (1)$$

ここで、 $Sh = L/(t_0 c)$ はストローハル数であり、 Q は仮想粒子の衝突の効果を表す衝突演算子である．一般に、右辺の衝

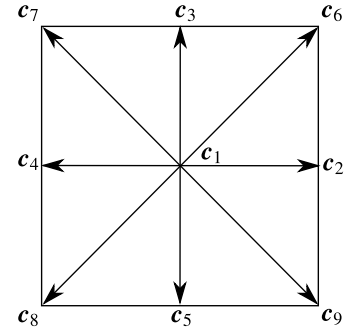


Fig.1 Nine-velocity model.

突項を厳密に計算することは難しいため、その近似モデルが幾つか提案されている．ここでは、その近似モデルとしてよく用いられる次のBGK衝突演算子を扱う．

$$Q(f) = -\frac{1}{\tau_{BGK}}(f - f^{eq}) \quad (2)$$

ここで、 f^{eq} はボルツマン方程式の平衡解である局所平衡分布関数を表し、 τ_{BGK} は緩和時間と呼ばれ、粒子が衝突してから次の衝突までに要する平均時間を表す．

続いて、粒子速度 ξ について離散化した式(1)について考える． ξ を有限個の速度 c_i ($i = 1, 2, \dots, q$)によって近似することにより、粒子速度に関して離散化された速度分布関数 $f_i(x, t) = f(x, t, c_i)$ は、次の離散ボルツマン方程式に従う．

$$Sh \frac{\partial f_i}{\partial t} + c_i \cdot \nabla f_i = -\frac{1}{\tau_{BGK}}(f_i - f_i^{eq}) \quad (3)$$

ここで、 c_i は幾つか提案されている格子気体モデルによって決定されるが、本研究では図1に示す2次元9速度モデルを用いる．このモデルの粒子速度は次式で与えられる．

$$[c_1, c_2, c_3, c_4, c_5, c_6, c_7, c_8, c_9] \\ = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \quad (4)$$

また、局所平衡分布関数 f_i^{eq} は、次式で与えられる．

$$f_i^{eq} = w_i \rho \left\{ 1 + 3c_i \cdot \mathbf{u} + \frac{9}{2}(c_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2}|\mathbf{u}|^2 \right\} \quad (5)$$

ここで、 w_i は、 $w_1 = 4/9$ 、 $w_2 = \dots = w_5 = 1/9$ 、 $w_6 = \dots = w_9 = 1/36$ である．なお、巨視的な物理量である密度 ρ 、速度 \mathbf{u} 、及び圧力 p はそれぞれ次式で与えられる．

$$\rho = \sum_{i=1}^9 f_i \quad (6)$$

$$\mathbf{u} = \frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^9 c_i f_i \quad (7)$$

$$p = \frac{\rho}{3} \quad (8)$$

最後に、物理空間を格子間隔 Δx の等間隔格子で分割し、時間刻みを $\Delta t = Sh \Delta x$ として、式(3)の左辺を一次差分で近似して整理すると、次式の格子ボルツマン方程式が得られる．

$$f_i(x + c_i \Delta x, t + \Delta t) = f_i(x, t) - \frac{1}{\tau_{BGK}} \{f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)\} \quad (9)$$

式 (9) により流れ場の計算を行うためには、初期条件 $f_i = f_i^0$ に加え、境界条件が必要であり、境界上で境界から領域に入る方向の粒子速度の f_i を規定しなければならない。すなわち、境界上の外向き法線ベクトルを n とすると、 $c_i \cdot n < 0$ となる f_i を規定する必要がある。例えば、図 1 のモデルにおいて、 c_1 を原点とした x - y 平面を考え、 $y = 0$ が境界であり、 $y > 0$ に流体が存在するものとする、 f_3, f_6, f_7 を決める必要がある。ここで、滑りなし境界条件は、次の bounce-back 境界条件により与えることができる。

$$\begin{cases} f_3 = f_5 \\ f_6 = f_8 \\ f_7 = f_9 \end{cases} \quad (10)$$

また、 $y = 0$ の境界上で接線方向速度を $u = 0$ とし、 $f_2 - f_2^{\text{eq}} = f_4 - f_4^{\text{eq}}$ を仮定すると、速度に対する境界条件及び圧力に対する境界条件は、それぞれ次式で与えることができる⁽¹⁵⁾。

$$\begin{cases} f_3 = f_5 + \frac{2}{3}\rho v_0 \\ f_6 = f_8 + \frac{1}{6}\rho v_0 - \frac{1}{2}(f_2 - f_4) \\ f_7 = f_9 + \frac{1}{6}\rho v_0 + \frac{1}{2}(f_2 - f_4) \end{cases} \quad (11)$$

$$\begin{cases} f_3 = f_5 + \frac{2}{3}\rho_0 v \\ f_6 = f_8 + \frac{1}{6}\rho_0 v - \frac{1}{2}(f_2 - f_4) \\ f_7 = f_9 + \frac{1}{6}\rho_0 v + \frac{1}{2}(f_2 - f_4) \end{cases} \quad (12)$$

ここで、 v_0 及び ρ_0 は境界上で設定する法線方向速度及び密度の規定値であり、式 (11) の密度 ρ 及び式 (12) の法線方向速度 v は、境界上の既知量を用いてそれぞれ次式で与えられる。

$$\rho = \frac{f_1 + f_2 + f_4 + 2(f_5 + f_8 + f_9)}{1 - v_0} \quad (13)$$

$$v = 1 - \frac{f_1 + f_2 + f_4 + 2(f_5 + f_8 + f_9)}{\rho_0} \quad (14)$$

なお、式 (12) は密度に対する境界条件であるが、式 (8) より圧力に対する境界条件に相当することを注記しておく。

3. 最適化問題の定式化

3.1. レベルセット法を用いた境界表現

固定された設計領域 D (以下、固定設計領域) において、流体が占める領域 $\Omega \subset D$ (以下、流体領域) と、その流体によって占められていない領域 $D \setminus \Omega$ (以下、物体領域)、及びそれらの境界 $\partial\Omega$ の表現方法について考える。レベルセット法では、スカラー関数であるレベルセット関数 ϕ の零等位面によって、流体領域と物体領域、及びそれらの境界を表現する。

$$\begin{cases} 0 < \phi(x) \leq 1 & \text{for } x \in \Omega \setminus \partial\Omega \\ \phi(x) = 0 & \text{for } x \in \partial\Omega \\ -1 \leq \phi(x) < 0 & \text{for } x \in D \setminus \Omega \end{cases} \quad (15)$$

ここでレベルセット関数に上限値と下限値を設定しているが、これは後述の目的汎関数に付加する仮想的な界面エネルギーをレベルセット関数によって表現するために必要となる⁽¹⁴⁾。

続いて、前述のレベルセット関数 ϕ を用いて、流体領域 Ω のみ定義される離散ボルツマン方程式 (3) を、固定設計領域 D に拡張する方法について考える。ここで重要となるのが物体領域の表現方法であるが、本研究では次式の拡張された局所平衡分布関数 f_i^{eq} を用いる。

$$\hat{f}_i^{\text{eq}} = w_i \rho \left\{ 1 + 3c_i \cdot u \chi_\phi + \frac{9}{2}(c_i \cdot u \chi_\phi)^2 - \frac{3}{2}|u \chi_\phi|^2 \right\} \quad (16)$$

ここで、 χ_ϕ はレベルセット関数の符号により 1 か 0 の値を返す特性関数である。

$$\chi_\phi = \begin{cases} 1 & \text{if } \phi(x) \geq 0 \\ 0 & \text{if } \phi(x) < 0 \end{cases} \quad (17)$$

この特性関数を用いることで、 $\phi < 0$ を満たす領域では式 (16) の $u \chi_\phi$ を含む項が零となり、 $\sum_i^9 c_i \hat{f}_i^{\text{eq}} = 0$ が成立する。これは、物体領域において流速が零であることを意味しており、式 (3) の離散ボルツマン方程式が定義される空間を固定設計領域 D に拡張して考えることができる。

なお、先行研究⁽¹³⁾ では式 (1) のボルツマン方程式について拡張を行っているが、本研究では f_i に関する境界条件である式 (10), (11), (12) の境界条件を導入した最適化手法を構築するため、離散ボルツマン方程式によって最適化問題を定式化する必要があることを注記しておく。

3.2. 最適化問題

前述の拡張された離散ボルツマン方程式に基づき、図 2 に示すような固定設計領域 D における流路設計問題を考える。重力等の体積力の影響、及び動圧による圧力損失の影響が無視できる流れの系を仮定すると、圧力損失最小化問題は、流入口と流出口における静圧差を目的汎関数 J とした次の最適化問題として定式化できる。

$$\inf_{\phi} J = \int_{\Gamma_{\text{in}}} p d\Gamma - \int_{\Gamma_{\text{out}}} p d\Gamma \quad (18)$$

$$\text{s.t. } Sh \frac{\partial f_i}{\partial t} + c_i \cdot \nabla f_i + \frac{1}{\tau_{\text{BGK}}} (f_i - \hat{f}_i^{\text{eq}}) = 0 \quad \text{in } I \times D \times C \quad (19)$$

$$V = \int_D \chi_\phi d\Omega - V_{\text{max}} \leq 0 \quad (20)$$

ここで、 I は時刻 $[t_0, t_1]$ における時間幅を表し、 C は粒子速度 c_i が張る空間を表す。また、不等式制約 V は、流体領域の

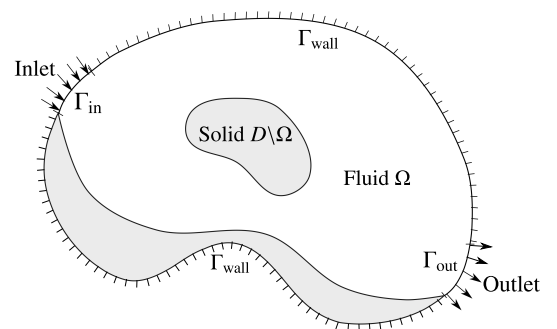


Fig.2 Schematic of the design domain.

体積の最大値を V_{\max} に規定する体積制約である．なお，本研究では，前述の仮定により J を静圧のみで定義しているが，より一般的に圧力損失最小化問題を定式化する場合は，静圧，動圧，及び位置エネルギーに相当する圧力の総和の損失として， J を定義する必要があることを注記しておく．

他方，特性関数 χ_ϕ は可積分性のみが保証された関数であるため，至る所で無限小の間隔で不連続点が存在することを許容する．その結果，解の収束性が保証されず，トポロジー最適化問題は不適切問題となることが知られており，何らかの手法を用いて設計空間の緩和を行う必要がある．そこで，本研究においても最適化問題の正則化の手続きを行うために，Yamada ら⁽¹⁴⁾の手法に基づき前記最適化問題を次の拡張目的汎関数 J_R の最小化問題に置き換える．

$$J_R = J + \int_D \frac{1}{2} \tau |\nabla \phi|^2 d\Omega \quad (21)$$

ここで右辺第二項は正則化項と呼ばれ，フェーズフィールド法における界面エネルギーに相当する．また， $\tau > 0$ はその大きさを与えるパラメータである．なお，正則化項はレベルセット関数の勾配の二乗和に比例し，境界及びその近傍でのみ非零の値を持つ．したがって， τ を適切に設定することにより，最適構造の外形形状に対して陰的な周長制約を与えることが可能であり，この項を最小化することによって，過度に複雑な構造が除かれた最適構造を創成することができる．

続いて，上記最適化問題をラグランジュ未定乗数法を用いて，次の無制約問題に置き換える．

$$\inf_{\phi} \bar{J}_R = J_R + G + \lambda V \quad (22)$$

ここで， \bar{J}_R はラグランジアン， λ はラグランジュ乗数を表し， G はラグランジュ乗数 $\tilde{f}_i = \tilde{f}_i(x, t)$ を含む等式制約に関する次式の汎関数である．

$$G = \int_I \int_D \sum_{i=1}^9 \tilde{f}_i \left\{ Sh \frac{\partial \tilde{f}_i}{\partial t} + c_i \cdot \nabla \tilde{f}_i + \frac{1}{\tau_{\text{BGK}}} (\tilde{f}_i - \tilde{f}_i^{\text{eq}}) \right\} d\Omega dt \quad (23)$$

以上より，本研究における最適化問題に対する KKT (Karush-Kuhn-Tucker) 条件を導けば，次式となる．

$$\bar{J}_R = 0, \quad \lambda V = 0, \quad \lambda \geq 0, \quad V \leq 0 \quad (24)$$

ここで， \bar{J}_R は， \bar{J}_R の ϕ に関するフレシエ導関数を表す．この KKT 条件を満たすレベルセット関数が最適解の候補となるが，これらを直接求めるのは困難である．そこで，仮想的な時間 ζ および比例係数 $K > 0$ を導入し，次式によりレベルセット関数に関する時間発展方程式を定義する．

$$\frac{\partial \phi}{\partial \zeta} = -K \bar{J}_R = -K (\bar{J} - \tau \nabla^2 \phi) \quad (25)$$

ここで， $\bar{J} = J + G + \lambda V$ であり，式 (25) ではレベルセット関数を変動させる駆動力は，ラグランジアンの勾配に比例するものと仮定している．

3.3. 感度解析

ここでは，時間発展方程式 (25) を解くために必要となるラグランジアンの勾配，すなわち設計感度の導出方法につい

て述べる．本研究では，先行研究⁽¹³⁾と同様に随伴変数法に基づき感度解析を行う．この場合， \tilde{f}_i に関する随伴方程式は，次式で与えられる．

$$-Sh \frac{\partial \tilde{f}_i}{\partial t} - c_i \cdot \nabla \tilde{f}_i = -\frac{1}{\tau_{\text{BGK}}} (\tilde{f}_i - \tilde{f}_i^{\text{eq}}) \quad (26)$$

ここで， \tilde{f}_i^{eq} は次式となる．

$$\tilde{f}_i^{\text{eq}} = \sum_{j=1}^9 \frac{1}{\rho} \left\{ \tilde{f}_j^{\text{eq}} + 3w_j \rho (c_j + 3c_j (c_j \cdot \mathbf{u} \chi_\phi) - \mathbf{u} \chi_\phi) (c_i - \mathbf{u} \chi_\phi) \right\} \quad (27)$$

式 (26) の具体的な導出方法は文献⁽¹³⁾を参照されたい．なお，先行研究では連続系のボルツマン方程式 (1) を用いて最適化問題を定式化しているため，その場合の随伴方程式は f_i を f に置き換えた式 (26) となる．そのため，式 (10), (11), (12) のような f_i に関して与えられる境界条件を導入して感度解析を行うためには，各境界条件を f に関する式に置き換えた上で，最適化問題を定式化する必要がある．式 (10) で与えられる滑りなし境界条件のように単純な式であれば， f に関する境界条件への置換えは容易であるが，式 (11), (12) のような複雑な式で与えられる境界条件の場合，連続系への置換えは困難である．このような問題から，先行研究では速度及び圧力に対する境界条件として， $f = f^{\text{eq}}$ という単純な境界条件を適用している．しかしながら，この境界条件はナビエ・ストークス方程式を満足する流れ場に対して十分な精度を得ることができず，しばしば数値的に不安定になることが知られており，一般的に LBM では式 (11), (12) のような，より高精度な境界条件を用いる．

一方，本研究では離散ボルツマン方程式を用いて最適化問題を定式化しているため，式 (11), (12) のような f_i に関する境界条件を感度解析において直接適用することができることから，それらの境界条件に対応する随伴場の境界条件を導出することが可能である．

まず， \bar{J}_R の ϕ に関するフレシエ微分を $\delta_\phi \bar{J}_R := \langle \bar{J}_R, \delta \phi \rangle$ とすると， $\delta_\phi \bar{J}_R$ は部分積分とガウスの発散定理を用いることにより，次式のように展開できる．

$$\begin{aligned} \delta_\phi \bar{J}_R &= \int_I \int_{\Gamma_{\text{in}}} \sum_{i=1}^9 \frac{1}{3} \delta f_i d\Gamma dt - \int_I \int_{\Gamma_{\text{out}}} \sum_{i=1}^9 \frac{1}{3} \delta f_i d\Gamma dt \\ &+ \int_I \int_D \sum_{i=1}^9 \delta f_i \left\{ -Sh \frac{\partial \tilde{f}_i}{\partial t} - c_i \cdot \nabla \tilde{f}_i + \frac{1}{\tau_{\text{BGK}}} (\tilde{f}_i - \tilde{f}_i^{\text{eq}}) \right\} d\Omega dt \\ &+ \int_D \sum_{i=1}^9 [\delta f_i \tilde{f}_i]_{t_0}^t d\Omega dt + \int_I \int_{\Gamma} \sum_{i=1}^9 \delta f_i (n \cdot c_i) \tilde{f}_i d\Gamma dt \\ &+ \int_I \int_D \frac{-\delta \phi}{\tau_{\text{BGK}}} \sum_{i=1}^9 \tilde{f}_i w_i \rho \left\{ 3c_i \cdot \mathbf{u} + 9(c_i \cdot \mathbf{u}) \chi_\phi - 3|\mathbf{u}|^2 \chi_\phi \right\} d\Omega dt \\ &+ \lambda \int_D \delta \phi d\Omega \end{aligned} \quad (28)$$

ここで， $\delta f_i := (\partial f_i / \partial \phi) \delta \phi$ であり， $\Gamma := \Gamma_{\text{wall}} \cup \Gamma_{\text{in}} \cup \Gamma_{\text{out}}$ とする．上式からわかるように，随伴方程式 (26) は式 (28) の右辺第三項から導出される．

続いて，随伴場の境界条件の導出方法について考える．ここでは一例として，式 (12) の境界条件に対応する随伴場の

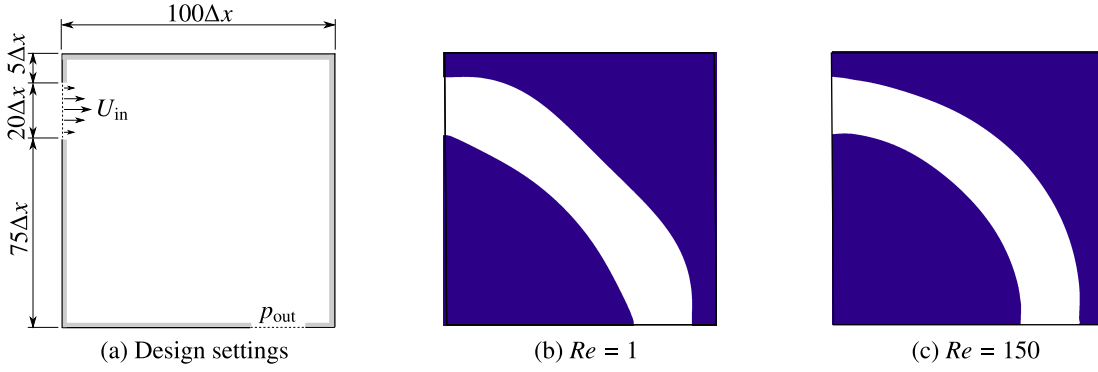


Fig. 3 Design settings and optimal configurations. U_{in} and p_{out} respectively represent the inlet velocity and outlet pressure.

境界条件を導出する．式 (28) において流出境界 Γ_{out} に関する項をまとめると，次式のように展開できる．

$$\begin{aligned}
B_{\Gamma_{out}} &= - \int_I \int_{\Gamma_{out}} \sum_{i=1}^9 \frac{1}{3} \delta f_i d\Gamma + \int_I \int_{\Gamma_{out}} \sum_{i=1}^9 \delta f_i (\mathbf{n} \cdot \mathbf{c}_i) \tilde{f}_i d\Gamma dt \\
&= \int_I \int_{\Gamma_{out}} \left(-\frac{1}{3} + \frac{1}{3} \tilde{f}_3 + \tilde{f}_5 + \frac{1}{3} \tilde{f}_6 + \frac{1}{3} \tilde{f}_7 \right) \delta f_5 d\Gamma dt \\
&\quad + \int_I \int_{\Gamma_{out}} \left(-\frac{1}{3} + \frac{4}{3} \tilde{f}_3 - \frac{2}{3} \tilde{f}_6 + \frac{1}{3} \tilde{f}_7 + \tilde{f}_8 \right) \delta f_8 d\Gamma dt \\
&\quad + \int_I \int_{\Gamma_{out}} \left(-\frac{1}{3} + \frac{4}{3} \tilde{f}_3 + \frac{1}{3} \tilde{f}_6 - \frac{2}{3} \tilde{f}_7 + \tilde{f}_9 \right) \delta f_9 d\Gamma dt \quad (29)
\end{aligned}$$

これにより， Γ_{out} における随伴場の境界条件は次式で与えられる．

$$\begin{cases} \tilde{f}_5 = \frac{1}{3} - \frac{1}{3} \tilde{f}_3 - \frac{1}{3} \tilde{f}_6 - \frac{1}{3} \tilde{f}_7 \\ \tilde{f}_8 = \frac{1}{3} - \frac{4}{3} \tilde{f}_3 + \frac{2}{3} \tilde{f}_6 - \frac{1}{3} \tilde{f}_7 \\ \tilde{f}_9 = \frac{1}{3} - \frac{4}{3} \tilde{f}_3 - \frac{1}{3} \tilde{f}_6 + \frac{2}{3} \tilde{f}_7 \end{cases} \quad (30)$$

f_i に関する境界条件では， $\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{n} < 0$ となる境界から領域に入る方向の粒子速度の f_i を規定する必要があるが， \tilde{f}_i に関する境界条件では，式 (30) のように $\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{n} > 0$ となる境界から領域外に向かう方向の粒子速度の \tilde{f}_i を規定する必要がある．これは，随伴方程式 (26) の時間発展及び移流方向が，離散ボルツマン方程式のそれらとは逆向きであることに起因する．なお， Γ_{wall} 及び Γ_{in} に対する随伴方程式の境界条件に関して，式 (29) と同様の手続きによりそれぞれ導出が可能である．また，随伴方程式の初期条件に関しては，式 (28) の右辺第四項から，時刻 t_1 において $\tilde{f}_i = 0$ となる．

最終的に，レベルセット関数の更新に必要な設計感度 J' は次式で与えられる．

$$J' = \frac{-1}{\tau_{BGK}} \int_I \left\{ \sum_{i=1}^9 \tilde{f}_i w_i \rho \left(3\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u} + 9(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}) \chi_\phi - 3|\mathbf{u}|^2 \chi_\phi \right) \right\} dt + \lambda \quad (31)$$

4. 数値実装法

4.1. 随伴方程式の離散化

随伴方程式 (26) は，離散ボルツマン方程式 (3) と同様の式構造であるため，格子ボルツマン方程式 (9) と同様に一次差

分で近似することにより，次式のように離散化することができる．

$$\tilde{f}_i(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t - \Delta t) = \tilde{f}_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau_{BGK}} \{ \tilde{f}_i(\mathbf{x}, t) - \tilde{f}_i^{eq}(\mathbf{x}, t) \} \quad (32)$$

上式からわかるように，本研究では随伴方程式に関しても格子ボルツマン方程式と同じく陽的に随伴変数 \tilde{f}_i の時間発展を追跡するため，設計感度の算出に行列計算を一切必要としない．

4.2. 最適化アルゴリズム

本研究における最適化アルゴリズムを示す．

- Step 1. 適当な初期構造を与えるために，レベルセット関数の初期値を設定する．
- Step 2. LBM により流れ場を定常状態になるまで計算する．
- Step 3. 目的汎関数が十分収束していれば計算を終了する．そうでない場合は随伴方程式 (32) を計算し，設計感度 (31) を算出する．
- Step 4. FEM を用いて，式 (25) の時間発展方程式に基づきレベルセット関数を更新し，Step 2 に戻る．

5. 数値例

数値例により，本研究で提案する手法の妥当性を検証した．最適化に必要なパラメータとして， $K = 1$ ， $\tau = 2.0 \times 10^{-3}$ とした．そして，レベルセット関数の初期値を $\phi = 1$ に設定し，初期構造はすべて流体で満たされている状態として最適化を図った．FEM によってレベルセット関数を更新する際の有限要素は，アイソパラメトリック四辺形双一次要素を用いた．また，式 (25) を FEM に基づき離散化する際は，仮想時間 ζ の更新幅を $\Delta \zeta = 0.2$ とした．

本研究では，図 3(a) に示す二次元の流路設計問題に対して最適化を行った．固定設計領域 D は正方形として， $100\Delta x \times 100\Delta x$ で離散化した．体積の上限值 V_{max} は固定設計領域 D の 25% とし，流入口の幅を代表長さ，流入速度 U_{in} の平均値を代表流速として，レイノルズ数が $Re = 1$ と $Re = 150$ の場合について検証した．

この問題における最適構造を図 3(b)，(c) に示す．得られた最適構造はグレースケールを含まない明瞭で角部のない滑ら

かな流路形状であることがわかった。また、得られた流路形状から、先行研究⁽¹³⁾と同様に、レイノルズ数が小さい場合は直線的な流路が創成されるのに対し、レイノルズ数が大きい場合は円弧状の流路が創成されることが確認できる。これは、流体が持つ慣性力によって起因される圧力損失を最小限に抑えるためと考えられる。これらのことから、本研究で提案する方法により、物理的に妥当な結果が得られることがわかった。

6. 結言

本研究では、従来までに構築したLBMに基づくトポロジー最適化手法を拡張し、離散ボルツマン方程式に基づき最適化問題を定式化することにより、LBMにおいて通常用いられる高精度の境界条件を考慮可能な感度解析手法を提案し、圧力損失最小化問題を対象に新しいトポロジー最適化手法を構築した。本研究により得られた結果を以下に示す。

- (1) 最適化問題を離散ボルツマン方程式に基づき定式化することで、随伴方程式も離散ボルツマン方程式に帰着して導出する新しい感度解析手法を構築した。これにより、従来は流入流出境界条件として、速度分布関数を局所平衡分布関数に置き換える手法を適用しているのに対し、本研究ではLBMで通常用いられる、より高精度な境界条件を適用可能であることを示した。
- (2) 随伴方程式を格子ボルツマン方程式と同様に離散化することで、随伴方程式を陽的に解く方法を構築した。更に、構築した感度解析手法と最適化問題の定式化に基づき、最適化アルゴリズムを開発した。
- (3) 圧力損失最小化問題を対象に、本研究で提案する手法の妥当性を数値解析例により検証した。その結果、レベルセット法による境界表現法の適用により、グレースケールを含まない明瞭な境界を有した最適構造が得られることがわかった。更に、レイノルズ数の値に対応する物理的に妥当な流路形状を創成可能であることがわかった。

7. 謝辞

本研究は、第一著者が(独)日本学術振興会特別研究員DCであった期間に行われ、特別研究員奨励費及びJSPS科研費26820032の支援を受けました。ここに記して謝意を表します。

参考文献

- (1) M.P. Bendsøe, N. Kikuchi: Generating Optimal Topologies in Structural Design Using a Homogenization Method, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **71**(1988), pp. 197–224.
- (2) T.E. Bruns: Topology Optimization of Convection-Dominated, Steady-State Heat Transfer Problems, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **50**(2007), pp. 2859–2873.
- (3) M. Otomori, T. Yamada, K. Izui, S. Nishiwaki, J. Andkjær: A Topology Optimization Method Based on the Level Set Method for the Design of Negative Permeability Dielectric Metamaterials, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **237-240**(2012), pp. 192–211.
- (4) T. Borrvall, J. Petersson: Topology Optimization of Fluids in Stokes Flow, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **41**(2003), pp. 77–107.
- (5) A.G. Hansen, O. Sigmund, R.B. Haber: Topology Optimization of Channel Flow Problem, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **30**(2005), pp. 181–192.
- (6) T. Matsumori, T. Kondoh, A. Kawamoto, T. Nomura: Topology Optimization for Fluid-Thermal Interaction Problems Under Constant Input Power, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **47**(2013), pp. 571–581.
- (7) C.S. Andreasen, A.R. Gersborg, O. Sigmund: Topology Optimization of Microfluidic Mixers, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **61**(2009), pp. 498–513.
- (8) S. Succi: *The Lattice Boltzmann Method for Fluid Dynamics and Beyond* (2001), Oxford University Press.
- (9) M.A.A. Spaid, F.R. Phelan: Lattice Boltzmann Methods for Modeling Microscale Flow in Fibrous Porous Media, *Physics of Fluids*, **9**(1997), pp. 2468–2474.
- (10) T. Inamuro, T. Ogata, S. Tajima, N. Konishi: A Lattice Boltzmann Method for Incompressible Two-Phase Flows with Large Density Differences, *Journal of Computational Physics*, **198**(2004), pp. 628–644.
- (11) G. Pingen, A. Evgrafov, K. Maute: Topology Optimization of Flow Domains Using the Lattice Boltzmann Method, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **34**(2007), pp. 507–524.
- (12) 矢田謙太郎, 山田崇恭, 吉野正人, 松本敏郎, 泉井一浩, 西脇眞二: 格子ボルツマン法を用いたレベルセット法に基づくトポロジー最適化, *日本機械学会論文集 C 編*, **79**(2013), pp. 2152–2163.
- (13) K. Yaji, T. Yamada, M. Yoshino, T. Matsumoto, K. Izui, S. Nishiwaki: Topology Optimization Using the Lattice Boltzmann Method Incorporating Level Set Boundary Expressions, *Journal of Computational Physics*, **274**(2014), pp. 158–181.
- (14) T. Yamada, K. Izui, S. Nishiwaki, A. Takezawa: A Topology Optimization Method Based on the Level Set Method Incorporating a Fictitious Interface Energy, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **199**(2010), pp. 2876–2891.
- (15) Q. Zou, X. He: On Pressure and Velocity Boundary Conditions for the Lattice Boltzmann BGK Model, *Physics of Fluids*, **9**(1997), pp. 1591–1598.