勾配法と任意多点差分法を用いた高精度位相最適化手法の開発

渡邉 祥　　指導教員：代田 健二 准教授

1 はじめに

近年，最適設計分野で盛んに研究されている問題として，位相最適化問題 [2] がある．位相最適化問題とは，構造物における最適な穴の配置や大きさを求める問題であり，非適切であることが知られている．そのため，位相最適化問題に対して最急降下法を適用し近似解を求めようとすると，数値不安定現象 [7] が発生する．畔上は，数値不安定現象の原因を“設計空間と勾配の属する関数空間の違い”と考え，H1 勾配法を提案した [1]．H1 勾配法は，現在までに様々な問題に適用され，製品設計の現場でも活用されている [8]．

一方，非適切問題において数値不安定現象を起こす原因として，離散化誤差，丸め誤差，観測誤差といった各種誤差が考えられる [6]．観測誤差がない非適切問題に対しては，丸め誤差への対処に 100 桁を超える多倍長計算環境，離散化誤差への対処にスペクトル選点法などの高精度数値解法を用いることで高精度近似解が求められることが示されている [4, 6, 10]．位相最適化問題においてデータは，観測ではなく規定するため，この対処法は有効な可能性がある．また，離散化・丸め誤差を極力小さくした場合の位相最適化問題に対する各種勾配法の性質は，明らかにされていない．さらに，H1 勾配法の関数空間を合わせる設定も，本質的に必要なのか，各種誤差の影響を安定化しているのみかは明らかになっていない．

そこで本研究では，高精度解法として任意多点差分法 [9]，多倍長環境として exflib[3] を用いた高精度位相最適化手法の開発を目的とする．勾配法には最急降下法，H1 勾配法を採用し，位相最適化問題に対する特性も明らかにする．

2 任意多点差分法

密度型 Poisson 方程式に任意多点差分法を適用する．$D \subset \mathbb{R}^d$ $(d = 2, 3)$ を有界な一様 Lipschitz 領域とし，$\partial D = \Gamma_D \cup \Gamma_N$ $(\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset)$ とする．このとき，次の境界値問題について考える．

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (\gamma(\boldsymbol{x})\nabla u) + cu = f & \text{in } D, \\ u = u_D & \text{on } \Gamma_D, \\ \gamma(\boldsymbol{x})\partial_\nu u = p & \text{on } \Gamma_N. \end{cases} \tag{1}$$

ただし，$\gamma(\boldsymbol{x}) = \dfrac{1 + \tanh(x_1 + x_2)}{2}$，$c > 0$ は与えられた定数である．また，$\partial_\nu = \boldsymbol{\nu} \cdot \nabla$ であり，$\boldsymbol{\nu} = {}^t(\nu_1, \nu_2, \ldots, \nu_d)$ は Γ_N 上の単位法線ベクトルである．(1) を偏微分作用素 $\widetilde{P}(\partial_x)$ を用いて，

$$\widetilde{P}(\partial_x)u(\boldsymbol{x}) = B(\boldsymbol{x}), \quad \boldsymbol{x} \in \overline{D} \tag{2}$$

と表す．ただし，

$$\widetilde{P}(\partial_x)u(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} -\nabla \cdot (\gamma(\boldsymbol{x})\nabla u)(\boldsymbol{x}) + cu(\boldsymbol{x}), & \boldsymbol{x} \in D, \\ u(\boldsymbol{x}), & \boldsymbol{x} \in \Gamma_D, \\ \gamma(\boldsymbol{x})\partial_\nu u(\boldsymbol{x}), & \boldsymbol{x} \in \Gamma_N. \end{cases}$$

であり，$B = {}^t(f, u_D, p)$ である．

$\{\boldsymbol{x}^{(j)}\}_{j=1}^N$ を $\overline{D}$ 内に配置された求積点とする．ただし，$\boldsymbol{x}^{(i)} \neq \boldsymbol{x}^{(j)}$ $(i \neq j)$ とする．このとき $\widetilde{P}(\partial_x)u(\boldsymbol{x})$ は，任意多点差分法により

$$\widetilde{P}(\partial_x)u(\boldsymbol{x}^{(i)}) \approx \sum_{j=1}^{N} w_j(\boldsymbol{x}^{(i)})u(\boldsymbol{x}^{(j)}) \tag{3}$$

と近似される．ただし重み行列 $W = (w_i(\boldsymbol{x}^{(j)}))$ は，連立一次方程式 $LW = Q$ の解である．ここで，$L = (e^{\zeta \boldsymbol{x}^{(i)} \cdot \boldsymbol{x}^{(j)}})$，$Q = (\widetilde{P}(\zeta \boldsymbol{x}^{(i)})\, e^{\zeta \boldsymbol{x}^{(i)} \cdot \boldsymbol{x}^{(j)}})$ であり，ζ は与えられた定数である．得られた重み行列 W，右辺ベクトル $\widetilde{B} = B(\boldsymbol{x}^{(j)})$ による連立一次方程式

$${}^tW\widetilde{\boldsymbol{u}} = \widetilde{\boldsymbol{B}}$$

を解くことで，求積点上の $u(\boldsymbol{x})$ の近似値を得ることができる．

数値実験例を示す．$D = (0, 1) \times (0, 1)$, $\Gamma_D = \partial D$ $(\Gamma_N = \emptyset)$ とし，真の解は $u(x, y) = \sin 2\pi xy$ とする．計算桁数を 10 進 300 桁，求積点を $(x$ 方向$, y$ 方向$) = (40, 40), (50, 50), (60, 60)$ 分割に等間隔，Gauss-Lobatto 選点 [6] を用いて配置した数値実験結果は表 1 の通りである．この結果から求積点配置により計算精度に影響がでるため，任意多点差分法においては，求積点配置を考慮する必要があることが示された．また，収束オーダーは $O(e^{-0.661629N})$ となり，任意多点差分法はスペクトル的精度を持つことが示唆された．ここで，N は x 方向の分割数である．

表 1　$W^{1,\infty}$ による誤差

	10 進 300 桁	
分点数	等間隔	Gauss-Lobbato 選点
40×40	1.7515×10^{-27}	1.5564×10^{-34}
50×50	1.5783×10^{-38}	6.8900×10^{-43}
60×60	3.1217×10^{-29}	3.1487×10^{-51}

3 密度型位相最適化問題に対する高精度解法

Poisson 方程式に対する密度型位相最適化問題 [2] を定義する．問題を定義するため，次の境界値問題を考える．

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (\phi^\alpha(\theta)\nabla u) = f & \text{in } D, \\ u = u_D & \text{on } \Gamma_D, \\ \phi^\alpha(\theta)\partial_\nu u = p & \text{on } \Gamma_N \end{cases} \tag{4}$$

$\phi(\theta)$ は与えられたシグモイド関数 [2]，f, u_D, p は適切に与えられた関数，$\alpha > 1$ は与えられた定数である．このとき密度型位相最適化問題は，コスト関数 $f_0(\theta, u)$，制約関数 $f_i(\theta, u)$ $(i = 1, 2, \cdots, m)$ を

$$f_i(\theta, u) = \int_D \zeta_i(\theta, u)\mathrm{d}x + \int_{\Gamma_N} \eta_{N_i}(u)\mathrm{d}s + \int_{\Gamma_D} \eta_{D_i}(\partial_\nu u)\mathrm{d}s + c_i$$

とするとき，次式を満たす θ^* を求める問題となる．

$$\theta^* = \underset{\theta \in \Theta}{\operatorname{argmin}}\{f_0(\theta, u) \mid f_i(\theta, u) \leq 0 \ (i = 1, 2, \cdots, m)\}$$

ここで，ζ_i，η_{N_i}，η_{D_i} は与えられた関数，c_i は与えられた定数，設計集合 $\Theta = \{\theta \in C^{0,1}(\overline{D}) \mid \theta = \theta_C \ \mathrm{in} D_C\}$ である．$D_C \subset \Theta$ は D 上で設計上の制約で ϕ を拘束する領域である．

H1 勾配法は，未定乗数法と逐次 2 次近似法 [5] を基礎とした方法であり，密度型位相最適化問題に対するアルゴリズムは次の通りである．

H1 勾配法アルゴリズム

(i) $k = 0$，θ_0 を与える．

(ii) θ_k に対する問題 (4) を解き，u_k を求める．

(iii) θ_k に対する次の問題を解き，$v_{i,k}$ $(i = 0, 1, \dots, m)$ を求める．

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (\phi^\alpha(\theta_k)\nabla v_{i,k}) = \zeta_{iu}(\theta_k, u_k) & \text{in } D, \\ v_{i,k} = \eta_{Di\partial_\nu u}(\partial_\nu u_k) & \text{on } \Gamma_D, \\ \phi^\alpha(\theta_k)\partial_\nu v_{i,k} = \eta_{Niu}(u_k) & \text{on } \Gamma_N. \end{cases}$$

(iv) 勾配 $g_{i,k}$ を，次により求める．

$$g_{i,k} = \zeta_{i\theta} - \alpha\phi^{\alpha-1}\phi_\theta \nabla u_k \cdot \nabla v_{i,k}.$$

(v) 次の問題の解 $\varphi_{g_{i,k}} \in H^1(D)$ $(i = 0, 1, \dots, m)$ を求める．

$$\int_D \left(\nabla\varphi_{g_{i,k}} \cdot \nabla\psi + c\varphi_{g_{i,k}}\psi\right) \mathrm{d}x = -\langle \varphi_{g_{i,k}}, \psi\rangle, \forall\psi \in H^1(D).$$

ここで c は与えられた定数である．

(vi) 未定乗数 λ_i $(i = 1, \dots, m)$ を求め，探索方向を定める．

$$\varphi_{g_k} = \varphi_{g_{0,k}} + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \varphi_{g_{i,k}}.$$

(vii) ステップサイズ $\varepsilon > 0$ を定め，設計変数を更新する．

$$\theta_{k+1} = \theta_k + \varepsilon\varphi_{g_k}$$

(viii) 収束条件を満たせば終了．満たさない場合は $k = k + 1$ として (ii) へ戻る．

なおステップサイズ ε は，Armijo の基準などの直線探索法を用いて各ステップごと決定される．また，(v) を行わず $g_{i,k}$ により探索方向決定，設計変数更新を行えば，未定乗数法と最急降下法で位相最適化問題を解いていることになる．

数値例を示す．$D = (0, 1) \times (0, 1)$, $b(x_1, x_2) = 2\left(x_1^2 + x_2^2 - (x_1 + x_2)\right)$ とする．また，$\Gamma_D = \partial D$ $(\Gamma_N = \emptyset)$ とし，$u_D = 0$ とする．シグモイド関数としては $\phi(\theta) = \dfrac{1 + \tanh\theta}{2}$ を採用し，$\alpha = 2$ とする．コスト関数は $f_0(\theta, u) = \displaystyle\int_D f\, u\, \mathrm{d}x$，制約汎関数は $f_1(\theta) = \displaystyle\int_D \phi(\theta)\mathrm{d}x - \frac{1}{2}$，初期設計変数は $\theta_0 \equiv 0$ とする．計算桁数は，10 進 300 桁，分割数は (x 方向 ,y 方向) $= (40, 40), (50, 50), (60, 60)$ とし，Gauss-Lobatto 選点により求積点配置を行う．最急降下法による数値実験結果は図 1，H1 勾配法による数値実験結果は図 2，3，4 の通りである．最急降下法では，分割数 (x 方向, y 方向) $= (40, 40)$ において 12 ステップで未定乗数の計算に失敗したのに対し，H1 勾配法では 120 ステップまで反復ステップが進んだ．また，(x 方向, y 方向) $= (50, 50), (60, 60)$ と比較するとほぼ同一形状が得られている．しかし，図 5 においてコスト関数を比較すると分割数 (x 方向, y 方向) $= (60, 60)$ の場合では (x 方向, y 方向) $= (40, 40)$ に比べコスト関数が小さな値となっており，反復も 226 ステップで収束するまで進んだ．先行研究 [11] の結果と比較すると，形状の違いが確認できた．これらの結果から，H1 勾配法は最急降下法に比べ安定な方法であること，しかし誤差の影響は受けるため高精度解法を用いる場合は一定精度が必要となること，先行研究により現在までに得られている結果は不十分な可能性が示唆された．

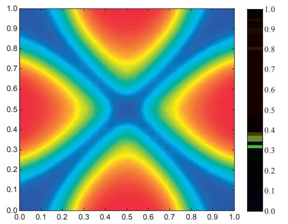

図 1　最急降下法によるシグモイド関数 $\phi(\theta_{12})(40 \times 40)$

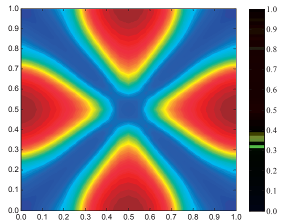

図 2　H1 勾配法によるシグモイド関数 $\phi(\theta_{120})$ (40×40)

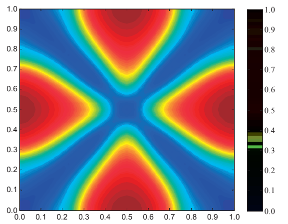

図 3　H1 勾配法によるシグモイド関数 $\phi(\theta_{120})$ (50×50)

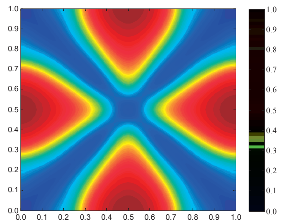

図 4　H1 勾配法によるシグモイド関数 $\phi(\theta_{120})$ (60×60)

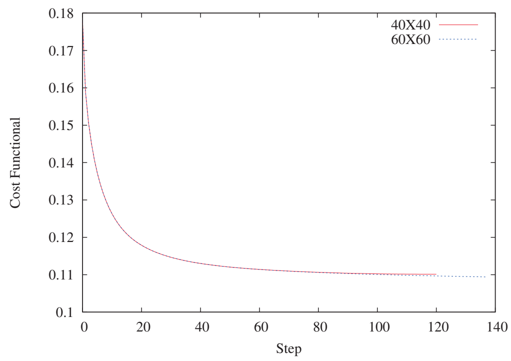

図 5　コスト関数

参考文献

[1] 畔上秀幸，形状最適化問題の正則化解法，日本応用数理学会論文誌，24 (2014), 83–138.

[2] M. P. Bendsøe and O. Sigmund, Topology Optimization: Theory, Methods, and Applications, Springer-Verlag, Berlin, 2003.

[3] 多倍長ライブラリ Exflib,
`http://www-an.acs.i.kyoto-u.ac.jp/~fujiwara/exflib/`

[4] H. Fujiwara and Y. Iso, Application of multiple-precision arithmetic to direct numerical computation of inverse acoustic scattering, Journal of Physics, Conference Series 73 (2007), doi:10.1088/1742-6596/73/1/012007.

[5] 福島雅夫，非線形最適化の基礎，朝倉書店，2001.

[6] 今井仁司, 無限精度計算が切り開く応用解析・数値解析の未来, 数理解析研究所講究録，1566 (2007)，96–118.

[7] A. R. Diaz and O. Sigmund. Checkerboard patterns in layout optimization, Structtual Optimization, 10 (1995), 40–45.

[8] 株式会社くいんと, OPTISHAPE-TS,
`http://www.quint.co.jp/jp/pro/ots/ots_fnc_tpo.htm`

[9] K. Iijima, Application of High Order Finite Difference Approximation as Exponential Interpolation, Theoretical and Applied Mechanics Japan, 53 (2004), 239–247.

[10] K. Iijima and K. Onishi, Lattice-free Finite Difference Method for Numerical Solution of Inverse Heat Conduction Problem, Inverse Problems in Science and Engineering, 15 (2007), 93–106.

[11] D. Murai and H. Azegami, Error analysis of H1 gradient method for topology optimization problems of continua, JSIAM Letters, 3 (2011), 73–76.