均質化法を用いたトポロジー最適化における擬凹性と大域的最適化

Pseudo-concavity and global optimization in topology optimization using the homogenization

西岡 暁 (Akatsuki Nishioka)[1]
[1] 東京科学大学 情報理工学院 数理・計算科学系
e-mail : nishioka.a.aa@m.titech.ac.jp

1 概要

トポロジー最適化問題において，大域解でない局所解が存在するか否かは重要な課題である．本研究（プレプリント [1]）では，均質化法を用いた固有振動数のトポロジー最適化問題の擬凹性を示すことによって，この問題の任意の停留点が大域解となることを示す．この性質により，勾配法などの単純なアルゴリズムによって大域解を求めることができる．

2 問題例：均質化法を用いたトポロジー最適化

問題例として，文献 [2] で扱われているトポロジー最適化問題（最適設計問題）を扱う．形状を表す変数（形状 ω の特性関数 χ_ω）に依存する楕円型微分作用素の固有値問題

$$\begin{cases} -\nabla\cdot c(\chi_\omega)\nabla u = \lambda\rho(\chi_\omega)u & \text{in } \Omega \\ u = 0 & \text{on } \partial\Omega \end{cases} \tag{1}$$

の解のうち，最小のものの最大化を目的とするトポロジー最適化問題

$$\sup_{\substack{\chi_\omega\in L^\infty(\Omega;\{0,1\})\\ \int_\Omega \chi_\omega(x)dx=\gamma}} \lambda_1(\chi_\omega) \tag{2}$$

を考える．ここで，$\gamma > 0$ は形状 ω の体積の指定値であり，

$$\begin{aligned} \lambda_1(\chi_\omega) &= \inf_{u\in H_0^1(\Omega)\setminus\{0\}} \frac{\int_\Omega c(\chi_\omega(x))|\nabla u(x)|^2dx}{\int_\Omega \rho(\chi_\omega(x))|u(x)|^2dx} \\ c(\chi_\omega(x)) &:= c_2 + (c_1 - c_2)\chi_\omega(x) \quad (0 < c_1 < c_2) \\ \rho(\chi_\omega(x)) &:= \rho_2 + (\rho_1 - \rho_2)\chi_\omega(x) \quad (0 < \rho_1 < \rho_2) \end{aligned} \tag{3}$$

である（最小固有値の Rayleigh 商による特徴付けを用いた）．この問題は膜の固有振動数や熱伝導の時間変化を決定するパラメータなどの最適化として解釈できる．

問題 (2) のような特性関数を変数とする最適化問題（変分問題）は一般には解が存在しないため，均質化法によって問題を緩和する．このとき，変数は $\{0,1\}$ の離散値のみを値にとる特性関数 $\chi_\omega \in L^\infty(\Omega;\{0,1\}$ から $[0,1]$ の連続値を値にとる密度関数 $\theta \in L^\infty(\Omega;[0,1])$ に置き換えられる（詳細は [3] を参照されたい）．問題 (2) の均質化法による緩和問題は以下のようになる：

$$\max_{\substack{\theta\in L^\infty(\Omega;[0,1])\\ \int_\Omega \theta(x)dx=\gamma}} \lambda_1(\theta). \tag{4}$$

問題 (4) は，解の存在性が保証され，その最小値が問題 (2) の下限値と一致するという点で適切な緩和問題になっている [2].

3　主結果

本研究では，変数 θ に依存するより一般の楕円型微分作用素の最小固有値の擬凹性（定義は [4] などを参照されたい）を証明する．以下の前提を満たす最小固有値を考える：

$$\lambda_1(\theta) := \inf_{u \in H \setminus \{0\}} \frac{\langle A(\theta)u, u \rangle_H}{\langle B(\theta)u, u \rangle_H} \tag{5}$$

- V, H は Hilbert 空間（$V \Subset H$，V は H で稠密），X は Banach 空間，$S \subset X$ は凸集合
- パラメータ $\theta \in S \subset X$ に依存する自己随伴な線形作用素 $A(\theta), B(\theta) : V \to V$ は以下の条件を満たす：
  - 楕円性と有界性：任意の $u \in V$ と $\theta \in S$ に対して $\underline{a}\|u\|_V^2 \leq \langle A(\theta)u, u \rangle_H \leq \overline{a}\|u\|_V^2$ $(0 < \underline{a} < \overline{a})$ および $\underline{b}\|u\|_V^2 \leq \langle B(\theta)u, u \rangle_H \leq \overline{b}\|u\|_V^2$ $(0 < \underline{b} < \overline{b})$
  - 凹性と凸性：任意の $u \in V$ に対して $\langle A(\theta)u, u \rangle_H$ と $\langle B(\theta)u, u \rangle_H$ はそれぞれ θ に関して凹関数および凸関数.

定理 1　上記の前提のもと，最小固有値 (5) は S 上で擬凹関数となる.

定理 1 は，Laplace 作用素のみを扱った先行研究 [5] の一般化であり，Clarke 劣微分の理論を用いて，微分可能とは限らない最小固有値に結果を拡張している．また，行列の固有値に関する筆者の研究 [6] の一般化でもある．定理 1 より，問題 (4) が擬凹関数の凸集合上での最大化問題となり，任意の停留点が大域解となることがわかる．これにより勾配法などで大域解を求めることができる．

謝辞　本研究は JSPS 科研費 JP25KJ0120 の助成を受けたものです.

参考文献

[1] A. Nishioka. Pseudo-concave optimization of the first eigenvalue of elliptic operators with application to topology optimization by homogenization. arXiv:2503.02391. https://arxiv.org/abs/2503.02391

[2] S. J. Cox and R. Lipton. Extremal eigenvalue problems for two-phase conductors. Archive for Rational Mechanics and Analysis, 136(2):101–117, 1996.

[3] G. Allaire. Shape Optimization by the Homogenization Method. Springer-Verlag, New York, 2002.

[4] J.-P. Penot and P. H. Quang. Generalized convexity of functions and generalized monotonicity of set-valued maps. Journal of Optimization Theory and Applications, 92:343–356, 1997.

[5] C. Jouron. Sur un probl‘eme d’ optimisation ou la contrainte porte sur la fr ´ equence fondamentale. RAIRO. Analyse Num ´ erique, 12(4):349–375, 1978.

[6] A. Nishioka, M. Toyoda, M. Tanaka, and Y. Kanno. On a minimization problem of the maximum generalized eigenvalue: properties and algorithms. Computational Optimization and Applications, 90:303–336, 2024.

Wasserstein 空間上の勾配流によるトポロジー最適化

Topology optimization via gradient flows on the Wasserstein space

岡嵜 郁也 (Fumiya Okazaki)[1], 山田 崇恭 (Takayuki Yamada)[2],
[1,2] 東京大学 工学系研究科 (The University of Tokyo)
e-mail : fumiya.okazaki.q4@alumni.tohoku.ac.jp

1 概要

トポロジー最適化は, 与えられた目的関数について最適な形状を求める手続きの一つであり, 形状のなす空間における最適化問題として定式化される．一般にトポロジー最適化の実行の際には, 形状のなす空間を何らかの方法で緩和して設計変数を設定する必要がある．その緩和の仕方に応じて, フェーズフィールド法やレベルセット法などの手法が提案されている．

本研究では体積の等式制約の下でのトポロジー最適化を念頭に置き, 確率測度のなす空間を設計変数とする手法について考察する．これはトポロジー最適化を Wasserstein 空間上の勾配流により実行する手法であり, 質量を保存する性質を内在的に持つ．

Wasserstein 空間上の目的関数の感度は [1] において調べられており, 形状の更新の方程式が具体的に記述されていた．しかし [1] による定式化通りの実装では, 設計領域の外側の領域まで含めて感度を計算する必要があることや, 形状の物理場に強い正則性を課す必要があることなどいくつかの問題点があった．本研究の目的はそれらの問題点を解消する数値計算手法を提案することである．また Cahn-Hilliard 方程式に基づくフェーズフィールド法 (c.f. [2]) における定式化との差異についても述べる．

2 定式化・数値計算例

$D \subset \mathbb{R}^d$ を有界凸領域とし, 距離空間 $(\mathcal{P}_2(D), \mathcal{W}_2)$ を D 上の L^2-Wasserstein 空間とする．与えられた $\mathcal{P}_2(D)$ の部分集合 $\mathcal{D}$ 上の関数 $\mathcal{J}$ と $\overline{V} \in (0, |D|)$ に対し, 最適化問題

$$\inf\left\{\mathcal{J}(\rho) \mid \rho \in \mathcal{D},\ \int_\Omega \rho = \overline{V}\right\} \tag{1}$$

について考える．最適化問題 (1) の解の候補を見つけるための自然な方法として, 距離空間 $(\mathcal{P}_2(D), \mathcal{W}_2)$ 上の勾配流を用いる方法が考えられる．これは各 $\rho \in \mathcal{D}$ と連続の方程式による任意の摂動

$$\begin{cases} \partial\rho_t + \mathrm{div}(\rho_t \nabla\phi) = 0 & \text{in } \Omega, \\ \rho_0 = \rho, & \text{in } \Omega, \\ \partial_n \phi = 0 & \text{on } \partial D \end{cases}$$

に対し, 等式

$$\int_\Omega \rho \nabla^W \mathcal{J}[\rho] \cdot \nabla\phi = \left(\frac{d}{dt}\right)_{t=0} \mathcal{J}(\rho_t)$$

及び質量保存のための境界条件を満たす D 上のベクトル場 $\nabla^W \mathcal{J}[\rho]$ が存在するときに, それを $\mathcal{J}$ の ρ における Wasserstein 勾配として定め, $-\nabla^W \mathcal{J}[\rho]$ を速度とする連続の方程式

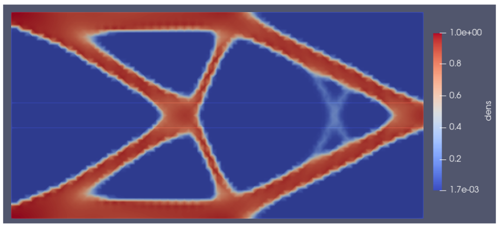
$$\partial_t \rho_t - \mathrm{div}(\rho_t \nabla^W \mathcal{J}[\rho_t]) = 0$$

により確率測度 ρ を更新する手法である．本研究では，トポロジー最適化における典型的な問題である平均コンプライアンス最小化問題を念頭に置き，それに対する Wasserstein 勾配流を用いた数値計算手法を提案する．本研究において提案する数値計算手法の要点は以下の通りである．

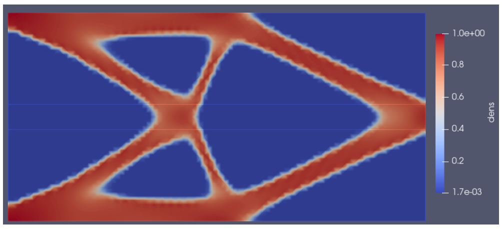
- 密度を二値化するための処罰を，従来の Cahn-Hilliard を用いた手法とは異なり，SIMP 法を念頭に置き密度のべき乗を用いる．
- 目的関数の Fréchet 微分を適当な Neumann 境界条件の下でフィルタリングを行い，その勾配を Wasserstein 勾配の代用とする．これにより設計領域を有界領域 D のみに制限でき，また計算を実行する際に状態場に課す正則性を弱めることができる．
- 従来の Cahn-Hilliard 方程式を用いた手法とは異なり，目的関数にエントロピーを足すことで正則化を行う．またこれにより，J の定義域 $\mathcal{D}$ が narow topology について閉かつ J が narrow topology について下半連続の時には最適化問題の解の存在が保証される．

実際にこの手法に基づき数値計算を行って得られる形状の例を以下に示す．

(a) Step 0



(b) Step 400



(c) Step 800

図 1: 初期形状を一様分布としたときの平均コンプライアンス最小化

参考文献

[1] F. Okazaki and T. Yamada, *On some sensitivities regarding shape and topology optimization as derivatives on Wasserstein spaces*, arXiv:2411.12234 (2024).

[2] S. Zhou and M. Y. Wang, *Multimaterial structural topology optimization with a generalized Cahn–Hilliard model of multiphase transition*, Structural and Multidisciplinary Optimization **33** (2007), 89–111.

Wasserstein 距離に基づくかたちの交叉：進化的トポロジー最適化への展開

Shape Crossover Based on the Wasserstein Distance: Application to Evolutionary Topology Optimization

喜井 大誠 (Taisei Kii)[1], 矢地 謙太郎 (Kentaro Yaji)[1], 寺本 央 (Hiroshi Teramoto)[2], 藤田 喜久雄 (Kikuo Fujita)[1]
[1] 大阪大学 大学院工学研究科 (Graduate School of Engineering, The University of Osaka)
[2] 関西大学 システム理工学部 (Faculty of Engineering Science, Kansai University)
e-mail：kii@syd.mech.eng.osaka-u.ac.jp

1　かたちの交叉

進化的アルゴリズム (Evolutionary Algorithm; EA) とは，生物の集団進化の過程に着想を得た最適化手法である．基本的なプロセスとしては，初期解集団を準備し，性能評価に基づく優秀な個体を選択し，それらから新たな解候補を生み出すという操作を繰り返す．なかでも，新たな個体の生成は EA の最適化性能を大きく左右する重要な操作であり，例えば遺伝的アルゴリズムでは，設計変数がコード化された遺伝子列を複数の個体間で組み替える交叉と呼ばれる操作がその主な役割を担う．遺伝子列には一般にビット列や実数値ベクトルが用いられ，各種パラメータ最適化や組合せ最適化においては，これらの交叉操作により有効な解候補の生成が可能である．しかしながら，最適化対象としてピクセルあるいはボクセル形式で表現された「かたち」を扱う場合には，その自由度の高さに起因して標準的な交叉では幾何学的に意味のない不自然なが生じやすく，かたちの特徴や構造を継承した有効な解候補を生み出すための独自の交叉操作が求められる．

そこで本研究では，Wasserstein 距離に基づくモーフィング手法 [1] に着目し，幾何学的な意味を持つ高自由度のかたちに対する新たな交叉として導入する．具体的には，かたちを確率分布 μ_i として扱い，次式で定義される Wasserstein 重心 μ^* を計算することで元のかたちを受け継いだ新たなかたちを生成する．

$$\mu^* = \arg\min_{\mu} \sum_i \lambda_i W_p(\mu, \mu_i) \tag{1}$$

ここで，$W_p(\mu, \mu_i)$ は確率分布 μ と μ_i の間の p-Wasserstein 距離であり，λ_i は重みを表す．このとき得られる確率分布 μ^* は，元のかたちの幾何学的特徴を最適輸送に基づいて滑らかに補間したものとなるため，高自由度のかたちの交叉として幾何学的整合性を保った新たな解候補を生成できると期待される．本講演では，上記の交叉方法を先行研究 [2] に基づき EA に組み込み，かたちを対象とする最適化問題としてトポロジー最適化に展開する．

2　進化的トポロジー最適化への展開

トポロジー最適化とは，所望の性能を最大化する構造物のかたちを求める最適化手法である．その基本的な考え方は，設計領域 $D \subset \mathbb{R}^d\,(d = 2, 3)$ において，特性関数 $\chi : D \to \{0, 1\}$ で表される材料分布を最適化することである．一般には，設計変数に関する評価関数の感度を算出可能とするため，離散的な特性関数を連続関数に置きかえ，勾配ベースの最適化手法が用いられる．一方で Yaji ら [2] は，こうした勾配ベースのトポロジー最適化が抱える課題に対し，変分オートエンコーダ (Variational Autoencoder; VAE) を用いた EA による最適化枠組みを提案している．VAE は深層

生成モデルの一種であり，学習データの特徴を捉え，それらに類似した新たなデータを生成可能である．VAE の潜在空間と呼ばれる低次元特徴空間において複数のデータを基に新たなデータをサンプリングすることで，材料分布に対する交叉を潜在空間上で実現している [3]．

本研究では，Yaji らの先行研究における VAE を用いた交叉に代わり，式 (1) による Wasserstein 重心を用いた交叉を導入する．提案手法の特徴は，材料分布を設計領域における確率分布 $\mu \in \mathcal{P}(D)$ として表現し，それらを最適輸送に基づいて滑らかに補間して新たな課候補を生成する点にある．

交叉としての補間挙動を比較するために，熱流体問題における流路データを用いてモーフィングの比較を行った．図 1 に，最も単純な線形補間を含む三種類の補間結果を示す．Wasserstein 重心による補間では，中間形状が白（流体領域）と黒（固体領域）で比較的明確に分離されており，グレースケールでぼやけた境界を持つ他の補間手法に比べて，流路としての幾何学的特徴を良好に保持していることが確認される．さらに，補間された流路に対して性能指標を評価した結果，いずれの指標も最小化すべきものであることを考慮すると，親個体よりも優れた性能を持つ子個体を生成可能である点において，本手法がかたちの交叉として有効であることが示唆される．

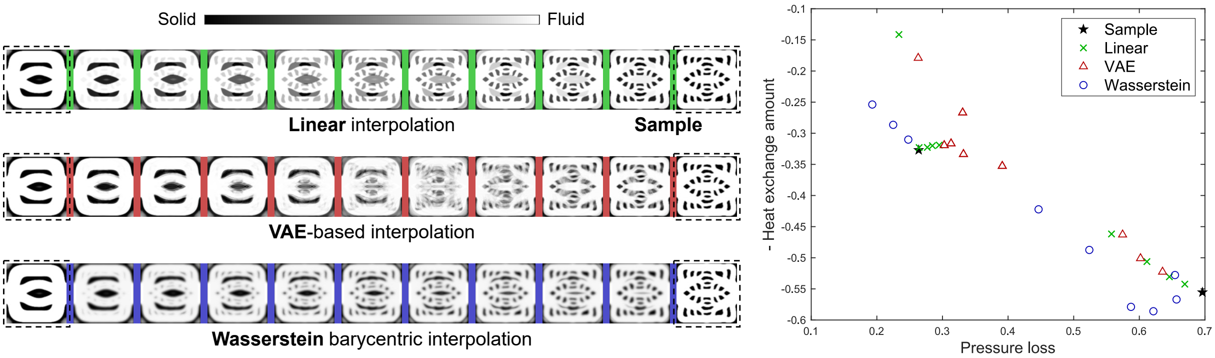


図 1. 異なる三種の補間方法によるモーフィングの比較

また，上記の Wasserstein 重心による交叉を Yaji らの枠組みに組み込んでトポロジー最適化を行った結果，従来の VAE を用いる場合よりも優れた性能値を持つ最適化結果が得られた．これらの計算結果については紙面の都合上省略するが，講演発表では三次元問題を含む様々な物理現象を考慮した工学設計問題に展開した事例を示し，さらなる応用可能性や今後の展望について論じる．

謝辞　本研究は JSPS 科研費 23H03799, 24KJ1640 の助成を受けたものです．

参考文献

[1] Solomon, J., de Goes, F., Peyré, G., Cuturi M., Butscher A., Nguyen, A., Du T. and Guibas L., Convolutional Wasserstein Distances: Efficient Optimal Transportation on Geometric Domains, ACM Transactions on Graphics, 34 (4) (2015), 1–11.

[2] Yaji, K., Yamasaki, S. and Fujita, K., Data-Driven Multifidelity Topology Design Using a Deep Generative Model: Application to Forced Convection Heat Transfer Problems, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 388 (2022), 114284.

[3] Kii, T., Yaji, K., Fujita K., Sha Z. and Seepersad, C. C., Latent Crossover for Data-Driven Multifidelity Topology Design, Journal of Mechanical Design, 146 (5) (2024), 051713.

楕円型方程式の解による厚みの表現と構造最適化への応用

Representation of thickness via solutions to elliptic equations and its application to structural optimization

岩本 直也 (Naoya Iwamoto)[1], 岡 大将 (Tomoyuki Oka)[1],
[1] 福岡工業大学 (Fukuoka Institute of Technology)
e-mail : mcm24102@bene.fit.ac.jp

1 概要

与えられた領域に対して, その境界に関する距離関数が得られると，様々な幾何学的特徴量が抽出でき，代表例として，法線や曲率などが挙げられる．本講演では，領域の厚みについて考察し，距離関数の特異点集合を用いることで中心線の情報が得られるため，中心線上の距離関数の値に注目する．特に，距離関数は線形楕円型方程式の解を用いて近似でき, 本講演では，その勾配を用いて中心線に関する近似的な特性関数が得られることを報告する．さらに, 厚みを規定するような汎関数を構成し, 厚み制約を伴う構造最適化，特に，トポロジー最適化へと応用する．

2 線形楕円型方程式の解を用いた距離関数の構成

滑らかな境界を持つ有界領域 $\Omega \subset \mathbb{R}^N, N \geq 1$ に対して，その境界 $\partial\Omega$ に関する距離関数 $d(\cdot, \partial\Omega)$ は以下の斉次 Dirichlet 境界条件を伴う Eikonal 方程式,

$$\begin{cases} |\nabla v|^2 = 1 & \text{in} \ \ \Omega, \\ v = 0 & \text{on} \ \ \partial\Omega \end{cases}$$

の解として特徴づけられることが知られている．また，粘性消去法に基づき，以下の方程式,

$$\begin{cases} -\varepsilon\Delta v_\varepsilon + |\nabla v_\varepsilon|^2 = 1 & \text{in} \ \ \Omega, \\ v_\varepsilon = 0 & \text{on} \ \ \partial\Omega \end{cases}$$

の解 v_ε を用いて v を近似的に扱うことができる．さらに v_ε は以下の方程式,

$$\begin{cases} -a\Delta u_a + u_a = 0 & \text{in} \ \ \Omega, \\ u_a = 1 & \text{on} \ \ \partial\Omega \end{cases} \tag{1}$$

の解 u_a を用いて，$v_\varepsilon = -\sqrt{a}\log u_a$, $\varepsilon = \sqrt{a}$ と表すことができるため，有限要素法が導入しやすい線形楕円型方程式の解によって $d(\cdot, \partial\Omega)$ を近似的に扱うこともでき，実際，$-\sqrt{a}\log u_a \to d(\cdot, \partial\Omega)$ $(a \to 0_+)$ となることが示されている [4].

3 部分集合の境界に関する距離関数の構成

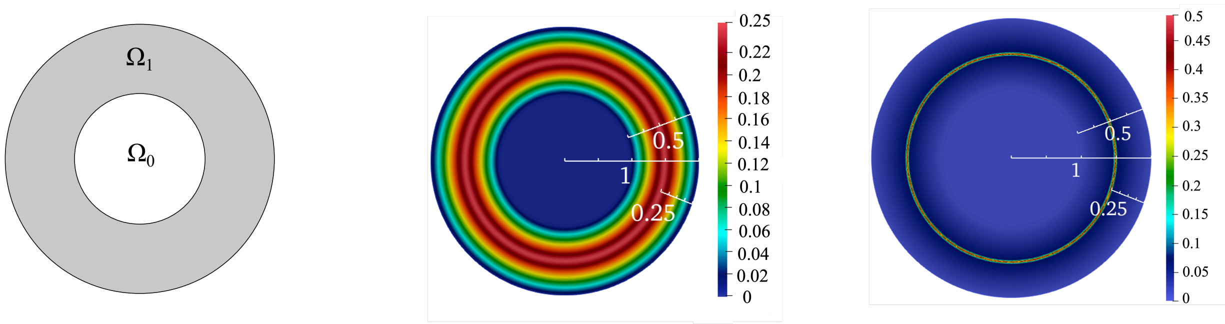
次に, Ω は滑らかな境界を持つ Ω_0 と Ω_1 によって構成される領域とし, $\Omega_0 \cap \Omega_1 = \emptyset$, $\Omega_0 \cup \Omega_1 = \Omega$ とする．ここでは部分集合に対する境界 $\partial\Omega_i \, (i = 0, 1)$ が考察対象であり，$\partial\Omega$ とは異なる境界上では，境界条件を用いることができない観点から，極限操作が困難になるが，Ω_i に関する特性関数 χ_{Ω_i} を非斉次項とした (1) の解を γ_a とすると，$x \in \Omega_{1-i}$ に対して，$d_a(x) := -\sqrt{a}\log\gamma_a \to d(x, \partial\Omega_{1-i})$ となることが示されている [2]．また，同じ台を持つより一般の非負値関数を用いても同様の主張が得られることが報告されている．

4　部分集合の厚みの表現

本講演では，Ω_1 を材料, Ω_0 を空洞とし, Ω_1 の厚みに関する情報について抽出する．ここでは, $d(\cdot, \partial\Omega)$ を $\gamma_a \in W^{2,p}(\Omega)$, $p > N$ を用いて近似している観点から，∇d_a を用いた特異点集合の表現が期待でき，実際，以下のように定める Ω 上の関数,

$$S(x) = \left\{ \frac{1}{1 + (\nabla d_a(x))^2} \right\}^q \quad \text{for} \quad q > 1$$

を用いて中心線に関する特性関数を近似する (Fig.1 参照).



(a) $\Omega = B_1(0)$.　(b) d_a.　(c) $2d_aS$.

Fig.1: 円環領域 Ω_1 における厚みの表現.

5　構造最適化への応用

近年，考察対象となるエネルギーが最小化されるような材料の形状や位相を決定する構造最適化において，製造性を考慮した研究が注目されている．例えば，[1] のように材料の厚みを制御する研究や [3] のようにトポロジーの変更を許容した材料の最大厚み制約に関する研究が行われている．本講演では，Fig.1 の (C) のように d_a と S を用いた厚みを規定するための汎関数を構成し，この汎関数を摂動させた構造最適化問題に対して得られた数値結果について報告する．

謝辞　本研究は, 科学研究費補助金 (JP23K12997) 及び, 福岡工業大学 総合研究機構 エレクトロニクス研究所 2025 年度若手卓越研究支援制度の助成を受けたものである．

参考文献

[1] G. Allaire, F. Jouve, G. Michailidis, Thickness control in structural optimization via a level set method, Struct. Multidisc. Optim. **53** (2016), 1349–1382.

[2] T. Hasebe, J. Masamune, T. Oka, K. Sakai, T. Yamada, Construction of signed distance functions with an elliptic equation, arXiv:2401.17665 [math.AP] (2024), pp. 1–19.

[3] T. Oka, K. Sakai, T. Yamada, Topology optimization with geometric constraints via diffusion-based level set methods and distance functions, JSIAM Letters **17** (2025), 49–52.

[4] S. R. S. Varadhan, On the behavior of the fundamental solution of the heat equation with variable coefficients, Comm. Pure Appl. Math. **20** (1967), 431–455.