

# 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

渡邊 祥\* 代田 健二†

\* 愛知県立大学大学院情報科学研究科 † 愛知県立大学情報科学部

**概要.** 本研究では、密度型位相最適化問題に対する高精度数値的手法について考察する。高精度手法の基礎には勾配法による反復解法を採用し、反復内における偏微分方程式の数値解法には微分求積法的一种である任意多点差分法を用いる。高精度計算実施のために必要な多倍長環境には `exflib` を採用する。Poisson 方程式による密度型位相最適化問題に対して最急降下法と  $H^1$  勾配法を用いた数値実験を行い、それぞれの有効性と数値安定性・収束性を検証する。

## A High Accurate Topology Optimization Method by Using the Gradient Type Method and the Lattice-Free Finite Difference Method

Akira Watanabe\* Kenji Shirota†

\*Graduate School of Information Science and Technology,  
Aichi Prefectural University

†Department of Information Science and Technology,  
Aichi Prefectural University

*Abstract.* In this paper, we consider a high accurate method for SIMP (Solid Isotropic Material with Penalization) type topology optimization problem. We adopt the gradient type method to solve our problem. In order to get high accurate solution of the partial difference equation in our algorithm, we use the lattice-free finite difference method which is a kind of the differential quadrature method. The library “`exflib`” for the scientific multiple-precision arithmetic is used in our calculation. By the numerical experiments, we check the effectiveness, stability, and convergency of our algorithm with the steepest descent and  $H^1$  gradient method.

## 1. はじめに

近年のものづくりの現場では、コンピュータを使った設計と数値解析が日常的に行われるようになった。さらに現在では、数値解析の結果を利用することで効率的に最適な設計を行う方法にも関心が高まっている。その一つに、最適設計分野で研究されている位相最適化問題 [5] 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、構

造物におけるトラス構造の最適化問題, 熱伝導問題, 音・振動連星問題, 電磁波伝搬問題と様々な分野で現れ, 利用されている [5, 16]. しかし, 位相最適化問題は非適切な問題であることが知られている. ここで (Hadamard の意味で) 適切な問題であるとは, 「解が一意である」, 「解が存在する」, 「解が与えられたデータに対して連続的に依存する」の三条件すべてを満たすことであり, どれか一つでも成り立たないとき, その問題は非適切であると呼ばれる [14]. そのため, 最急降下法などの従来法を位相最適化問題へ適用し近似解を求めようとする, 数値不安定現象 [6] が発生する. その数値不安定性を回避するために様々な方法が提案をされているが, その一つに畔上により提案された  $H^1$  勾配法 [1] がある.  $H^1$  勾配法は形状最適化問題や密度型位相最適化問題 [5] に対して提案されている方法であり, 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”と考え関数空間の違いを補正することを基礎として構築され, 現在までに製品設計の現場で活用されている [2, 18].

一方, 非適切問題へ数値解法を適用した場合に数値不安定現象を起こす原因としては, 離散化誤差, 丸め誤差, 観測誤差といった各種誤差も考えられる. 観測誤差がない非適切問題に対しては, 丸め誤差に 100 桁を超える多倍長計算環境, 離散化誤差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, 今井 [13], 藤原・磯 [8], 飯島・大西 [12] の研究により示されている. 密度型位相最適化問題においてデータは, 設計者が材料を固定する等の条件を誤差が無い関数の形で与えるものである. つまり密度型位相最適化問題において対処すべき誤差は, 離散化誤差と丸め誤差のみである. したがって, 今井らの方法を用いることが密度型位相最適化問題に対しても有効であると考えられる. また密度型位相最適化問題に対する各種勾配法の数値安定性は, ロバストな解法を倍精度環境で用いた場合において数値実験によりある程度明らかにされているものの, 理論的には問題の複雑さ故に明らかにされていない. さらに  $H^1$  勾配法が, 各種誤差の影響を抑え安定な数値解を得ているだけなのか, 計算桁数・方法によらない非適切問題に対する正則化解法なのか明らかになっていない.

本論文では, Poisson 方程式による密度型位相最適化問題に対する高精度最適設計手法を開発し, それを用いて各種勾配法の数値安定性と収束性を明らかにし, さらに密度型位相最適化問題の高精度解を得ることを目的とする. 高精度最適設計手法の基礎方法として勾配法を採用し, 境界値問題の高精度解法としては微分求積法 [3, 4] の一種である任意多点差分法 [11], また計算環境として多倍長計算ライブラリ exflib [7] を用いることで, 高精度手法の開発を行う. さらに数値実験を行い, 開発手法の有効性と, 密度型位相最適化問題に対する最急降下法,  $H^1$  勾配法の数値安定性と収束性を検証する.  $H^1$  勾配法については, 従来の有限要素法と倍精度計算環境での結果と比較し, 数値解の安定性と各種誤差との関係について数値実験を通して検討する.

## 2. 密度型位相最適化問題に対する勾配法

領域  $D \subset \mathbb{R}^d$  ( $d = 2, 3$ ) を有界な一様 Lipschitz 領域とし,  $\partial D = \Gamma_u \cup \Gamma_q$  ( $\Gamma_u \cap \Gamma_q = \emptyset$ ) とする.

$$\Theta = \{ \theta \in C^{0,1}(\bar{D}) \mid \theta = \theta_C \text{ in } D_C \}$$

とする. ここで  $D_C \subset D$  であり,  $\theta_C \in C^{0,1}(\bar{D})$  は与えられた関数とする. 関数  $\phi$  を

$$(2.1) \quad \phi(t) = \frac{1 + \tanh t}{2}$$

と定義する. このとき, 次の境界値問題を考える.

$$(2.2) \quad \begin{cases} -\nabla \cdot (\phi^\alpha(\theta) \nabla u) = f & \text{in } D, \\ u = u_D & \text{on } \Gamma_u, \\ \phi^\alpha(\theta) \partial_\nu u = p & \text{on } \Gamma_q. \end{cases}$$

ただし,  $f \in L^{2r}(D)$ ,  $p \in L^{2r}(\Gamma_q)$ ,  $u_D \in W^{1-\frac{1}{2r}, 2r}(\Gamma_u)$  ( $r \in \mathbb{N}$ ) は与えられた関数,  $\alpha > 1$  は与えられた定数とする. また  $\partial_\nu = \boldsymbol{\nu} \cdot \nabla$  であり,  $\boldsymbol{\nu} = {}^t(\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_d)$  は  $\Gamma_q$  上の外向き単位法線ベクトルである. この境界値問題の弱解  $u \in W^{1, 2r}(D) \subset H^1(D)$  は,  $\theta \in \Theta$  が与えられた場合,  $\partial D$  のカド点に一定の条件を課すことで一意に存在する [9].

境界値問題 (2.2) の弱解を用いて, 密度型位相最適化問題を定義する.  $Q$  を境界値問題 (2.2) の弱解の集合とし, 汎関数  $f_i : \Theta \times Q \rightarrow \mathbb{R}$  ( $i = 0, 1, \dots, m$ ) を次のとおりに定義する.

$$f_i(\theta, u) = \int_D \zeta_i(\theta, u) dx + \int_{\Gamma_q} \eta_{N_i}(u) ds + \int_{\Gamma_u} \eta_{D_i}(\partial_\nu u) ds + c_i \quad (i = 0, 1, \dots, m)$$

とする. ただし

$$\begin{aligned} \zeta_i &\in C^1(\Theta \times Q; L^1(D)), \quad \zeta_{i\theta} \in C^0(\Theta \times Q; L^r(D)), \quad \zeta_{iu} \in C^0(\Theta \times Q; L^{2r}(D)), \\ \eta_{N_i} &\in C^1(Q; L^{2r}(\Gamma_q)), \quad \eta_{D_i} \in C^1(Z; W^{1-\frac{1}{2r}, 2r}(\Gamma_u)). \end{aligned}$$

ここで  $\zeta_{i\theta}$ ,  $\zeta_{iu}$  は, それぞれ  $\zeta_i$  の  $\theta$ ,  $u$  方向の Fréchet 偏微分を表す. また,  $Z = \{ \partial_\nu u \mid u \in Q, \boldsymbol{\nu} \text{ on } \Gamma_u \}$  である. このとき, 次の制約条件付き最適化問題を考える.

### [密度型位相最適化問題]

$$(2.3) \quad \theta^* = \operatorname{argmin}_{\theta \in \Theta} \{ f_0(\theta, u) \mid f_i(\theta, u) \leq 0 \ (i = 1, 2, \dots, m), \ u = u(\theta) \in Q \}$$

を満たす  $\theta^* \in \Theta$  を求めよ.

この問題において, 境界値問題 (2.2) を主問題と呼ぶ. 位相最適化問題では, 境界値問題 (2.2) の係数関数  $\phi^\alpha$  として特性関数を選択し, 穴の位置・形状を最適化問題を解くこと

により得ることを考える. 一方, 密度型位相最適化問題 (2.3) では,  $[0, 1]$  内に値域を持つ密度関数  $\phi$  の濃淡により穴の位置・形状を近似的に得ることを考えている. さらに密度関数を直接同定するのではなく, 密度関数自身は (2.1) のような滑らかな関数として与えておき, その値を制御する設計変数  $\theta \in \Theta$  を求めるのが大きな特徴である. 密度型位相最適化問題 (2.3) は, SIMP (Solid Isotropic Material with Penalization) problem とも呼ばれる.

密度型位相最適化問題を解く方法として, Lagrange の未定乗数法を採用する. (2.3) の Lagrange 関数は, 次のとおりである.

$$(2.4) \quad \mathcal{L}(\theta, u, \boldsymbol{\lambda}) = f_0(\theta, u) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(\theta, u), \quad \theta \in \Theta, \quad u = u(\theta) \in Q.$$

ただし,  $\boldsymbol{\lambda} = {}^t(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m)$  である. この Lagrange 関数の最小化関数を求める方法として, KKT 条件を基礎とした勾配法を用いることにする. 密度型位相最適化問題の KKT 条件は, 次のとおりになる.

$$(2.5) \quad g_0 + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i = 0,$$

$$(2.6) \quad f_i(\theta, u) \leq 0 \quad (i = 1, 2, \dots, m),$$

$$(2.7) \quad \lambda_i f_i(\theta, u) = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, m),$$

$$(2.8) \quad \lambda_i \geq 0 \quad (i = 1, 2, \dots, m).$$

ただし  $g_i$  は  $f_i$  の  $\theta$  に関する勾配, すなわち

$$f_{i\theta}(\theta, u)[\varphi] = \langle g_i, \varphi \rangle, \quad \forall \varphi \in \Theta$$

である. ここで  $f_{i\theta}$  は,  $f_i$  の  $\theta$  方向の Fréchet 偏微分である. 勾配法を用いるためには, Lagrange 関数の Fréchet 微分が必要となる.  $v_i \in H^1(D)$  を, 次に定義する随伴問題の解とする.

$$(2.9) \quad \begin{cases} -\nabla \cdot (\phi^\alpha(\theta) \nabla v_i) = \zeta_{iu}(\theta, u) & \text{in } D, \\ v_i = \eta_{Di\partial_\nu u}(\partial_\nu u) & \text{on } \Gamma_u, \\ \phi^\alpha(\theta) \partial_\nu v_i = \eta_{Ni u}(u) & \text{on } \Gamma_q. \end{cases}$$

このとき Lagrange 関数の Fréchet 微分は, 次のとおりに与えられる [2].

$$\mathcal{L}'(\theta, u)[\vartheta] = \langle g_0 + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i, \vartheta \rangle.$$

ただし,

$$g_i = \zeta_{i\theta} - \alpha \phi^{\alpha-1} \phi_\theta \nabla u \cdot \nabla v_i \quad (i = 0, 1, \dots, m).$$

$u \in W^{1,2r}(D)$ ,  $v_i \in W^{1,2r}(D)$  および仮定より  $g_i \in L^r(D)$  となるが,  $g_i \in C^{0,1}(\bar{D})$  となることは一般に保証できない.

最急降下法では, 条件 (2.6), (2.7), (2.8) を各ステップ満たしながら勾配  $g_0 + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i$  により設計変数を更新していく. しかし  $g_i \in C^{0,1}(\bar{D})$  が保証できないため, 初期設計変数を  $\theta_0 \in \Theta$  としても, 更新設計変数が  $\Theta$  の元になることを保証できないという問題がある. 畔上 [1] は, このことが数値不安定現象の原因の一つと考え,  $H^1$  勾配法を考案した.

$a : H^1(D) \times H^1(D) \rightarrow \mathbb{R}$  を

$$a(\phi, \psi) = \int_D (\nabla \phi \cdot \nabla \psi + c \phi \psi) dx$$

と定義する. ただし,  $c > 0$  は与えられた定数である.  $a(\cdot, \cdot)$  は  $H^1(D)$  上の有界な強圧的雙一次形式である. このとき  $H^1$  勾配法は, 探索方向  $\varphi_g$  を

$$(2.10) \quad \gamma a(\varphi_{g_i}, \psi) = -\langle g_i, \psi \rangle, \quad \forall \psi \in H^1(D)$$

の解  $\varphi_{g_i} \in H^1(D)$  により,  $\varphi_g = \varphi_{g_0} + \sum_{i=1}^m \varphi_{g_i}$  と定める方法である. ただし,  $\gamma > 0$  は与えられた正定数である. この方法は, 2次近似問題

$$\varphi_g = \operatorname{argmin}_{\varphi \in H^1(D)} \left\{ \frac{\gamma}{2} a(\varphi, \varphi) + \langle g_0, \varphi \rangle \mid f_i + \langle g_i, \varphi \rangle \leq 0 \ (i = 1, 2, \dots, m) \right\}$$

による逐次2次近似法と同じものである. Lax-Milgram の定理より,  $\varphi_g \in H^1(D)$  は唯一存在する. さらに  $g_i \in L^r(D)$  より  $\varphi_{g_i} \in W^{2,r}(D) \hookrightarrow C^{0,1}(\bar{D})$ , すなわち探索方向は  $\varphi_g \in C^{0,1}(\bar{D})$  となることが保証できる. よって  $\Theta = C^{0,1}(\bar{D})$  ( $D_C = \emptyset$ ) であれば, 初期設計変数  $\theta_0 \in \Theta$  に対して勾配法による更新  $\theta_k = \theta_{k-1} + \epsilon \varphi_g \in \Theta$  を保証することができる. ここで,  $\epsilon > 0$  は適切に選ばれたステップサイズである. しかし, 収束性については明らかになっていない. なお (2.10) は, 次の境界値問題と同値である.

$$(2.11) \quad \begin{cases} -\Delta \varphi_{g_i} + c \varphi_{g_i} = -\frac{g_i}{\gamma} & \text{in } D, \\ \partial_\nu \varphi_{g_i} = 0 & \text{on } \partial D. \end{cases}$$

### 3. 高精度位相最適化手法と任意多点差分法

密度型位相最適化問題に対する高精度解法は, 前節で示した Lagrange 未定乗数法を基礎とした勾配法により構成することにする. その際, アルゴリズムにおけるすべての計算を多倍長計算環境下で実行することにより, 丸め誤差の影響を極力小さくすることで高精度計算を実現する. しかし勾配法により高精度に計算するためには, さらに境界値問題 (2.2), (2.9), (2.11) を高精度に近似計算する必要がある. 位相最適化問題に現れる境界

値問題の近似計算には、一般に有限要素法が用いられる。有限要素法は汎用性が非常に高くロバストな方法であるが、本研究で開発を目指している高精度位相最適化手法に必要な方法は、今井 [13] らが用いているスペクトル選点法と同程度の高精度性、すなわち指数関数的に誤差が減少する方法である。そこで本研究では、偏微分方程式に対する高精度近似解法として微分求積法的一种である任意多点差分法 [11] を採用する。微分求積法 [3, 4] は、微分方程式に現れる微分項の近似を与えられた求積点と基底関数による差分形式で離散化し近似解を求める方法であり、求積点配置を格子に限定しないメッシュフリー解法である。微分求積法では、一般に基底関数として有限次元多項式が選ばれる。それに対して任意多点差分法は、その基底関数として指数関数を用いることで無限次元多項式に対する微分求積法を実現した方法であり、数値実験により Poisson 方程式、定数係数熱伝導方程式に対しては指数関数的に誤差が減少する方法であることが示されている。一方、係数が定数でない偏微分方程式については、その高精度性が明らかにされていない。そこで本節では、密度型位相最適化問題に現れる次の境界値問題に対して任意多点差分法を適用する。

$$(3.1) \quad \begin{cases} -\nabla \cdot (\gamma(\mathbf{x})\nabla u) + cu = f & \text{in } D, \\ u = u_D & \text{on } \Gamma_u, \\ \gamma(\mathbf{x})\partial_\nu u = p & \text{on } \Gamma_q. \end{cases}$$

ただし、 $\gamma \in W^{1,\infty}(D)$  は  $\gamma(\mathbf{x}) \geq \bar{\gamma} > 0$  を満たす関数であり、 $\bar{\gamma}$ ,  $c > 0$  は与えられた定数である。さらに  $f \in L^{2r}(D)$ ,  $p \in L^{2r}(\Gamma_q)$ ,  $u_D \in W^{1-\frac{1}{2r}, 2r}(\Gamma_u)$  は与えられた関数である。ここで、 $\gamma = \phi^\alpha$ ,  $c = 0$  のときは (2.2), (2.9) と、 $\gamma \equiv 1$ ,  $\Gamma_u = \emptyset$  のときは (2.11) と同じタイプの境界値問題である。

微分作用素  $\tilde{P}(\partial_x)$  を次のとおりに定義する。

$$\tilde{P}(\partial_x)u(\mathbf{x}) = \begin{cases} -\nabla \cdot (\gamma(\mathbf{x})\nabla u)(\mathbf{x}) + cu(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in D, \\ u(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Gamma_u, \\ \gamma(\mathbf{x})\partial_\nu u(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Gamma_q. \end{cases}$$

このとき境界値問題 (3.1) は、次のとおりに書くことができる。

$$(3.2) \quad \tilde{P}(\partial_x)u(\mathbf{x}) = F(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \bar{D}.$$

ここで、

$$F(\mathbf{x}) = \begin{cases} f(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in D, \\ u_D(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Gamma_u, \\ p(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Gamma_q. \end{cases}$$

求積点  $\{\mathbf{x}^{(j)}\}_{j=1,2,\dots,N}$  を

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(N_D)} &\in D, \\ \mathbf{x}^{(N_D+1)}, \mathbf{x}^{(N_D+2)}, \dots, \mathbf{x}^{(N_D+N_u)} &\in \Gamma_u, \\ \mathbf{x}^{(N_D+N_u+1)}, \mathbf{x}^{(N_D+N_u+2)}, \dots, \mathbf{x}^{(N)} &\in \Gamma_q \end{aligned}$$

となるようにとる. ただし  $\mathbf{x}^{(i)} \neq \mathbf{x}^{(j)}$  ( $i \neq j$ ) とする. このとき  $\tilde{P}(\partial_x)u(\mathbf{x})$  を, 次のように近似することを考える.

$$(3.3) \quad \tilde{P}(\partial_x)u(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N w_j(\mathbf{x})u(\mathbf{x}^{(j)}) + \varepsilon(\mathbf{x}; \tilde{P}(\partial_x)u(\mathbf{x})), \quad \mathbf{x} \in \bar{D}$$

$w_j(\mathbf{x})$  は重み関数であり,  $\varepsilon(\mathbf{x}; \tilde{P}(\partial_x)u(\mathbf{x}))$  は離散化誤差を表している. ここで,  $u(\mathbf{x})$  が  $D$  を真に含む領域で解析的であると仮定する. このとき  $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \bar{D}$  に対して,

$$(3.4) \quad u(\mathbf{y}) = \sum_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{Z}_+^d} \frac{(\mathbf{y} - \mathbf{x})^{\boldsymbol{\alpha}}}{\boldsymbol{\alpha}!} \partial_x^{\boldsymbol{\alpha}} u(\mathbf{x})$$

と書くことができる. ただし,  $\mathbb{Z}_+ := \{z \in \mathbb{Z} \mid z \geq 0\}$ ,  $\mathbb{Z}_+^d = \prod_{i=1}^d \mathbb{Z}_+$ ,  $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_d) \in \mathbb{Z}_+^d$ ,  $\boldsymbol{\alpha}! := \alpha_1! \alpha_2! \dots \alpha_d!$  であり,

$$\mathbf{x}^{\boldsymbol{\alpha}} := x_1^{\alpha_1} x_2^{\alpha_2} \dots x_d^{\alpha_d}, \quad \partial_x := (\partial_1, \partial_2, \dots, \partial_d), \quad \partial_j = \frac{\partial}{\partial x_j}, \quad \partial_x^{\boldsymbol{\alpha}} := \partial_1^{\alpha_1} \partial_2^{\alpha_2} \dots \partial_d^{\alpha_d}$$

である. したがって,

$$(3.5) \quad u(\mathbf{x}^{(j)}) = \sum_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{Z}_+^d} \frac{(\mathbf{x}^{(j)} - \mathbf{x})^{\boldsymbol{\alpha}}}{\boldsymbol{\alpha}!} \partial_x^{\boldsymbol{\alpha}} u(\mathbf{x}) \quad (j = 1, 2, \dots, N).$$

$\tilde{P}(\partial_x)$  の記述を (3.4) に合わせると

$$(3.6) \quad \tilde{P}(\partial_x)u(\mathbf{x}) = \begin{cases} \sum_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{Z}_+^d} a_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x}) \partial_x^{\boldsymbol{\alpha}} u(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in D, \\ \sum_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{Z}_+^d} b_{\boldsymbol{\alpha}}^u(\mathbf{x}) \partial_x^{\boldsymbol{\alpha}} u(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Gamma_u, \\ \sum_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{Z}_+^d} b_{\boldsymbol{\alpha}}^q(\mathbf{x}) \partial_x^{\boldsymbol{\alpha}} u(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Gamma_q \end{cases}$$

となる. ただし

$$\begin{aligned} a_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x}) &= c \quad (|\boldsymbol{\alpha}| = 0), \quad a_{(0, \dots, 1, \dots, 0)}(\mathbf{x}) = -\frac{\partial \gamma}{\partial x_i}(\mathbf{x}) \quad (i = 1, 2, \dots, d), \\ a_{(0, \dots, 2, \dots, 0)}(\mathbf{x}) &= -\gamma(\mathbf{x}), \quad a_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x}) = 0 \quad (\boldsymbol{\alpha} : \text{その他}), \\ b_{\boldsymbol{\alpha}}^u(\mathbf{x}) &= 1 \quad (|\boldsymbol{\alpha}| = 0), \quad b_{\boldsymbol{\alpha}}^u(\mathbf{x}) = 0 \quad (\boldsymbol{\alpha} : \text{その他}), \\ b_{(0, \dots, 1, \dots, 0)}^q(\mathbf{x}) &= \nu_i \gamma(\mathbf{x}), \quad b_{\boldsymbol{\alpha}}^q(\mathbf{x}) = 0 \quad (\boldsymbol{\alpha} : \text{その他}). \end{aligned}$$

ここで  $|\boldsymbol{\alpha}| = \alpha_1 + \alpha_2 + \cdots + \alpha_d$  である.  $\boldsymbol{x} \in D$  とすると, (3.3), (3.5), (3.6) より

$$(3.7) \quad \varepsilon(\boldsymbol{x}; \tilde{P}(\partial_x)u) = \sum_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{Z}_+^d} \left\{ a_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{x}) - \sum_{j=1}^N w_j(\boldsymbol{x}) \frac{(\boldsymbol{x}^{(j)} - \boldsymbol{x})^{\boldsymbol{\alpha}}}{\boldsymbol{\alpha}!} \right\} \partial_x^{\boldsymbol{\alpha}} u(\boldsymbol{x}).$$

同様にして,

$$(3.8) \quad \varepsilon(\boldsymbol{x}; \tilde{P}(\partial_x)u) = \sum_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{Z}_+^d} \left\{ b_{\boldsymbol{\alpha}}^u(\boldsymbol{x}) - \sum_{j=1}^N w_j(\boldsymbol{x}) \frac{(\boldsymbol{x}^{(j)} - \boldsymbol{x})^{\boldsymbol{\alpha}}}{\boldsymbol{\alpha}!} \right\} \partial_x^{\boldsymbol{\alpha}} u(\boldsymbol{x}), \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma_u,$$

$$(3.9) \quad \varepsilon(\boldsymbol{x}; \tilde{P}(\partial_x)u) = \sum_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{Z}_+^d} \left\{ b_{\boldsymbol{\alpha}}^q(\boldsymbol{x}) - \sum_{j=1}^N w_j(\boldsymbol{x}) \frac{(\boldsymbol{x}^{(j)} - \boldsymbol{x})^{\boldsymbol{\alpha}}}{\boldsymbol{\alpha}!} \right\} \partial_x^{\boldsymbol{\alpha}} u(\boldsymbol{x}), \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma_q.$$

離散化誤差  $\varepsilon(\boldsymbol{x}; \tilde{P}(\partial_x)u)$  を小にする 1 つの方法は, (3.7), (3.8), (3.9) の  $\partial_x^{\boldsymbol{\alpha}} u(\boldsymbol{x})$  の係数をすべて小にするような重み関数  $\{w_j(\boldsymbol{x})\}_{j=1}^N$  を選ぶことである. しかし, そのような  $\{w_j(\boldsymbol{x})\}_{j=1}^N$  を選ぶことは難しい. そこで  $u(\boldsymbol{x})$  の高精度近似を導入し, その近似関数に対して離散化誤差が 0 になるように重み関数を選ぶことにする. 任意多点差分法では, 高精度近似として指数補間を採用している. 指数補間とは,  $\boldsymbol{\xi}^{(i)} \in \mathbb{R}^d$  ( $i = 1, 2, \dots, M$ ) を相異なる点とするとき,

$$\tilde{u}(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^M c_i e^{\boldsymbol{\xi}^{(i)} \cdot \boldsymbol{x}}, \quad \boldsymbol{x} \in \bar{D}$$

とし, 係数  $\{c_i\}$  を補間条件  $\tilde{u}(\boldsymbol{x}^{(j)}) = u(\boldsymbol{x}^{(j)})$  ( $j = 1, 2, \dots, N$ ) を満たすように選ぶ近似方法である. 指数補間が高精度であるかどうかは, 現在のところ理論的に明らかにされていないが, 指数関数の Taylor 展開により

$$\tilde{u}(\boldsymbol{x}) = \sum_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{Z}_+^d} \boldsymbol{x}^{\boldsymbol{\alpha}} \tilde{c}_{\boldsymbol{\alpha}}^{(i)}$$

と書き直すことができる. ここで,  $\tilde{c}_{\boldsymbol{\alpha}}^{(i)} = \left(\frac{1}{\boldsymbol{\alpha}!}\right) \sum_{i=1}^M \boldsymbol{\xi}^{(i)\boldsymbol{\alpha}} c_i$  である. つまり,  $\tilde{u}(\boldsymbol{x})$  は  $u(\boldsymbol{x})$  の無限次多項式補間と考えることができ, 求積点  $\{\boldsymbol{\xi}^{(i)}\}$  の取り方に工夫が必要であるものの, 指数関数的に誤差を減少させる方法であることが期待できる.

$$\partial_x^{\boldsymbol{\alpha}} \tilde{u}(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^M \boldsymbol{\xi}^{(i)\boldsymbol{\alpha}} e^{\boldsymbol{\xi}^{(i)} \cdot \boldsymbol{x}} c_i \quad \text{および (3.7) より, } \forall \boldsymbol{x} \in D \text{ に対して}$$

$$\varepsilon(\boldsymbol{x}; \tilde{P}(\partial_x)\tilde{u}) = \sum_{i=1}^M e^{\boldsymbol{\xi}^{(i)} \cdot \boldsymbol{x}} \left( \sum_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{Z}_+^d} \boldsymbol{\xi}^{(i)\boldsymbol{\alpha}} \left\{ a_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{x}) - \sum_{j=1}^N \frac{(\boldsymbol{x}^{(j)} - \boldsymbol{x})^{\boldsymbol{\alpha}}}{\boldsymbol{\alpha}!} w_j(\boldsymbol{x}) \right\} \right) c_i.$$

$\{\boldsymbol{\xi}^{(i)}\}_{i=1}^M$  は,  $\{e^{\boldsymbol{\xi}^{(i)} \cdot \mathbf{x}}\}$  が一次独立となるように選ばれていると仮定する. このとき任意の関数の指数補間に対して  $\varepsilon(\mathbf{x}; \tilde{P}(\partial_{\mathbf{x}})\tilde{u}) = 0$  ( $\forall \mathbf{x} \in D$ ) を成り立たせるには, 重み関数が次の式を満たすように選ばばよい.

$$(3.10) \quad \sum_{j=1}^N \left( \sum_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{Z}_+^d} \frac{(\mathbf{x}^{(j)} - \mathbf{x})^\alpha}{\boldsymbol{\alpha}!} \boldsymbol{\xi}^{(i)\alpha} \right) w_j(\mathbf{x}) = \sum_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{Z}_+^d} \boldsymbol{\xi}^{(i)\alpha} a_\alpha(\mathbf{x}) \quad (i = 1, 2, \dots, M).$$

同様にして,  $\forall \mathbf{x} \in \Gamma_u, \forall \mathbf{x} \in \Gamma_q$  に対して  $\varepsilon(\mathbf{x}; \tilde{P}(\partial_{\mathbf{x}})\tilde{u}) = 0$  が成り立つためには, それぞれ

$$(3.11) \quad \sum_{j=1}^N \left( \sum_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{Z}_+^d} \frac{(\mathbf{x}^{(j)} - \mathbf{x})^\alpha}{\boldsymbol{\alpha}!} \boldsymbol{\xi}^{(i)\alpha} \right) w_j(\mathbf{x}) = \sum_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{Z}_+^d} \boldsymbol{\xi}^{(i)\alpha} b_\alpha^u(\mathbf{x}) \quad (i = 1, 2, \dots, M),$$

$$(3.12) \quad \sum_{j=1}^N \left( \sum_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{Z}_+^d} \frac{(\mathbf{x}^{(j)} - \mathbf{x})^\alpha}{\boldsymbol{\alpha}!} \boldsymbol{\xi}^{(i)\alpha} \right) w_j(\mathbf{x}) = \sum_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{Z}_+^d} \boldsymbol{\xi}^{(i)\alpha} b_\alpha^q(\mathbf{x}) \quad (i = 1, 2, \dots, M)$$

を満たすように重み関数を選ばばよい. ここで, 多項式  $\tilde{P}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})$  を次のとおりに定義する.

$$\tilde{P}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = \begin{cases} \sum_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{Z}_+^d} a_\alpha(\mathbf{x}) \boldsymbol{\xi}^\alpha, & \mathbf{x} \in D, \\ \sum_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{Z}_+^d} b_\alpha^u(\mathbf{x}) \boldsymbol{\xi}^\alpha, & \mathbf{x} \in \Gamma_u, \\ \sum_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{Z}_+^d} b_\alpha^q(\mathbf{x}) \boldsymbol{\xi}^\alpha, & \mathbf{x} \in \Gamma_q. \end{cases}$$

また指数関数の Taylor 展開から,

$$e^{\boldsymbol{\xi}^{(i)} \cdot (\mathbf{x}^{(j)} - \mathbf{x})} = \sum_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{Z}_+^d} \frac{1}{\boldsymbol{\alpha}!} \boldsymbol{\xi}^{(i)\alpha} (\mathbf{x}^{(j)} - \mathbf{x})^\alpha.$$

これらを (3.10), (3.11), (3.12) に適用すると,  $\forall \mathbf{x} \in \bar{D}$  に対して,

$$(3.13) \quad \sum_{j=1}^N e^{\boldsymbol{\xi}^{(i)} \cdot \mathbf{x}^{(j)}} w_j(\mathbf{x}) = e^{\boldsymbol{\xi}^{(i)} \cdot \mathbf{x}} \tilde{P}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\xi}^{(i)}) \quad (i = 1, 2, \dots, M).$$

したがって,

$$L = \left( e^{\boldsymbol{\xi}^{(i)} \cdot \mathbf{x}^{(j)}} \right) \in \mathbb{R}^{M \times N}, \quad \mathbf{q}(\mathbf{x}) = \left( \tilde{P}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}^{(i)}) e^{\boldsymbol{\xi}^{(i)} \cdot \mathbf{x}} \right) \in \mathbb{R}^M, \\ \mathbf{w}(\mathbf{x}) = {}^t (w_1(\mathbf{x}), w_2(\mathbf{x}), \dots, w_N(\mathbf{x})) \in \mathbb{R}^N$$

と置くと,  $\forall \mathbf{x} \in \bar{D}$  に対して (3.13) は

$$(3.14) \quad L\mathbf{w}(\mathbf{x}) = \mathbf{q}(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \bar{D}.$$

(3.14) を満たすような重み関数  $\{w_j(\mathbf{x})\}$  を用いて偏微分作用素  $\tilde{P}(\partial_x)$  を

$$(3.15) \quad \tilde{P}(\partial_x)u(\mathbf{x}) \approx \sum_{j=1}^N w_j(\mathbf{x})u(\mathbf{x}^{(j)})$$

と近似する.

任意多点差分近似 (3.15) では,  $\forall \mathbf{x} \in \bar{D}$  に対しての近似について考えてきた. しかし一般には, 求積点上での値のみを求めることとなる. そこで, 求積点  $\{\mathbf{x}^{(j)}\}_{j=1}^N$  での近似値を求めることを考える. (3.15) より,

$$(3.16) \quad \tilde{P}(\partial_x)u(\mathbf{x}^{(i)}) \approx \sum_{j=1}^N w_j(\mathbf{x}^{(i)})u(\mathbf{x}^{(j)}) \quad (i = 1, 2, \dots, N).$$

ここで必要となるのは, 求積点上の重み行列  $W = (w_{ij}) = (w_i(\mathbf{x}^{(j)}))$  である. (3.14) より, 重み行列  $W$  を求める方程式は次のとおりになる.

$$(3.17) \quad LW = Q.$$

ただし,

$$Q = \left( \tilde{P}(\mathbf{x}^{(j)}; \boldsymbol{\xi}^{(i)})e^{\boldsymbol{\xi}^{(i)} \cdot \mathbf{x}^{(j)}} \right) \in \mathbb{R}^{M \times N}.$$

ここで, 多項式  $P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})$  の定義より

$$P(\mathbf{x}^{(j)}, \boldsymbol{\xi}^{(i)}) = \begin{cases} c - \nabla\gamma(\mathbf{x}^{(j)}) \cdot \boldsymbol{\xi}^{(i)} - \gamma(\mathbf{x}^{(j)})\|\boldsymbol{\xi}^{(i)}\|_2^2, & (j = 1, \dots, N_D), \\ 1 & (j = N_D + 1, \dots, N_D + N_u), \\ \gamma(\mathbf{x}^{(j)})\boldsymbol{\nu}(\mathbf{x}^{(j)}) \cdot \boldsymbol{\xi}^{(i)} & (j = N_D + N_u + 1, \dots, N). \end{cases}$$

よって,

$$Q_{ij} = \begin{cases} e^{\boldsymbol{\xi}^{(i)} \cdot \mathbf{x}^{(j)}} \left( c - \nabla\gamma(\mathbf{x}^{(j)}) \cdot \boldsymbol{\xi}^{(i)} - \gamma(\mathbf{x}^{(j)})\|\boldsymbol{\xi}^{(i)}\| \right) & (j = 1, 2, \dots, N_D), \\ e^{\boldsymbol{\xi}^{(i)} \cdot \mathbf{x}^{(j)}} & (j = N_D + 1, \dots, N_D + N_u), \\ e^{\boldsymbol{\xi}^{(i)} \cdot \mathbf{x}^{(j)}} \gamma(\mathbf{x}^{(j)})\boldsymbol{\nu}(\mathbf{x}^{(j)}) \cdot \boldsymbol{\xi}^{(i)} & (j = N_D + N_u + 1, \dots, N). \end{cases}$$

また, (3.16) より

$$(3.18) \quad \begin{pmatrix} \tilde{P}(\partial_x)u(\mathbf{x}^{(1)}) \\ \tilde{P}(\partial_x)u(\mathbf{x}^{(2)}) \\ \vdots \\ \tilde{P}(\partial_x)u(\mathbf{x}^{(N)}) \end{pmatrix} \approx {}^t W \mathbf{u}.$$

ただし,  $\mathbf{u} = {}^t(u_1, u_2, \dots, u_N)$  ( $u_j \approx u(\mathbf{x}^{(j)})$ ). したがって (3.2) より, 求積点上の近似解ベクトル  $\mathbf{u}$  を求めるための連立一次方程式は

$$(3.19) \quad {}^tW\mathbf{u} = \mathbf{F}$$

となる. ただし,

$$\mathbf{F} = {}^t(\mathbf{F}_1, \mathbf{F}_2, \dots, \mathbf{F}_N),$$

$$\mathbf{F}_j = \begin{cases} f(\mathbf{x}^{(i)}) & (j = 1, 2, \dots, N_D), \\ u_D(\mathbf{x}^{(i)}) & (j = N_D + 1, \dots, N_D + N_u), \\ p(\mathbf{x}^{(i)}) & (j = N_D + N_u + 1, \dots, N). \end{cases}$$

(3.17) により重み行列  $W$  を求め, それを用いて (3.19) を解くことで近似解を得る方法を任意多点差分法と呼ぶ.

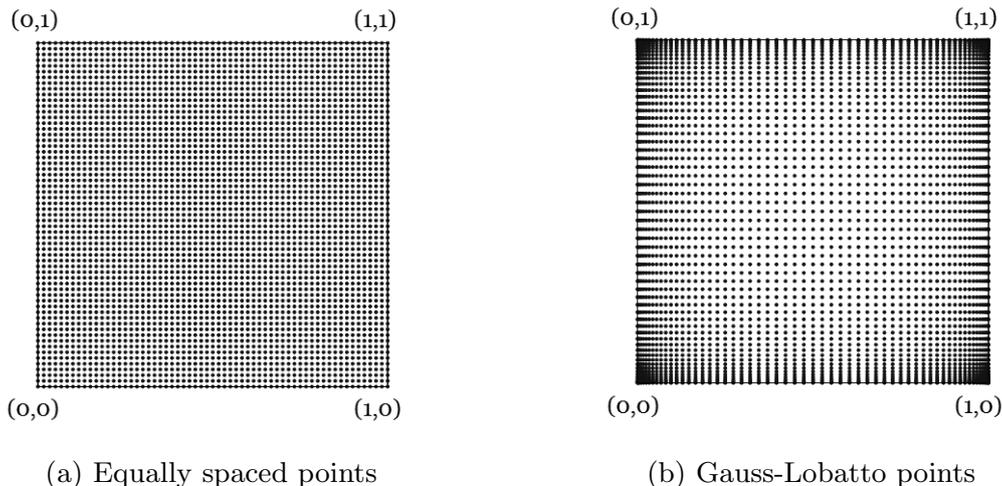
## 4. 数値実験

本節では, まず高精度化の基本である任意多点差分法の精度を, 数値実験により検証する. 任意多点差分法の高精度性を検証後, それを用いた高精度位相最適化手法の有効性と, 密度型位相最適化問題に対する最急降下法,  $H^1$  勾配法の数値安定性と収束性について数値実験により検証・考察する. なお  $d = 2$  とし,  $D = (0, 1) \times (0, 1)$  とする. また多倍長環境ライブラリは, exflib [7] を用いる.

### 4.1 密度型 Poisson 方程式に対する数値実験

Poisson 方程式の境界値問題 (3.1) に対する数値実験を行う. ここで, 真の解は  $u(x, y) = \sin 2\pi xy$  とし,  $\gamma(x, y) = \frac{1 + \tanh(x + y)}{2}$  とする. また計算桁数は 10 進 200 桁, 300 桁, 400 桁, 求積点は領域を ( $x$  方向,  $y$  方向) = (40, 40), (50, 50), (60, 60) と等間隔 (Fig. 1 (a)), 不等間隔で分割した格子点上に配置し, その違いによる精度を検証する. 特に不等間隔での求積点配置は, スペクトル選点法で用いられる Gauss-Lobatto 選点 [19] を使用する. Gauss-Lobatto 選点による求積点配置 (Fig. 1 (b)) は, 一辺の分割数が  $n + 1$  のとき, 次のとおりになる.

$$(4.1) \quad \begin{pmatrix} x_i \\ y_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\hat{x}_i + 1}{2} \\ \frac{\hat{x}_j + 1}{2} \end{pmatrix}, \quad \hat{x}_i = \cos\left(\frac{i\pi}{n}\right) \quad (i = 0, 1, \dots, n).$$

Fig. 1. Quadrature points ( $60 \times 60$ ).

数値実験は、Dirichlet 問題，すなわち  $\Gamma_u = \partial D$ ,  $\Gamma_q = \emptyset$  の場合と，Neumann 問題，すなわち  $\Gamma_u = \emptyset$ ,  $\Gamma_q = \partial D$  の場合について行う．また数値実験は，CPU: Intel(R) Xeon X5675 (3.07Ghz) (12 コア)，メモリ: 96 GB のワークステーションにおいて，ライブラリ MPICH 1.4.1 によりプログラムの並列化を行って実施した．

Dirichlet 問題，Neumann 問題に対する等間隔配置における誤差は，それぞれ Table 1, 2 のとおりである．また誤差の片対数グラフは，それぞれ Figs. 2, 3 のとおりである．10 進 200 桁の結果より，任意多点差分法により高精度解を得るためには適切な計算桁数が必要であることが示された．さらに 10 進 300 桁，400 桁の回帰直線は，Dirichlet 問題の場合はそれぞれ  $-0.356247 - 0.661629N_x$ ,  $-0.356214 - 0.661630N_x$ , Neumann 問題の場合はそれぞれ  $-0.230643 - 0.663057N_x$ ,  $-0.306574 - 0.661305N_x$  ( $N_x$ : 一辺の分割数) となり，任意多点差分法が密度型 Poisson 方程式の境界値問題 (3.1) に対して，指数関数的に誤差が減少する方法であることが示唆された．一方，10 進 300 桁における誤差分布は，Fig. 4 のとおりである．誤差はカド点付近に大きく表れており，最適設計手法に任意多点差分法を用いた場合，計算結果に悪影響を及ぼす可能性がある．なお計算桁数 300 桁における Dirichlet 問題の計算時間は，求積点配置 (40, 40), (50, 50), (60, 60) においてそれぞれ 1756 [s], 4852 [s], 11546 [s] であった．よって位相最適化問題へ本手法を用いる場合，多コア CPU を持つ計算機における並列計算が必須であるといえる．

Table 1.  $W^{1,\infty}$  norm error (Dirichlet problem, equally spaced points)

Number of division	200 digit	300 digit	400 digit
40 × 40	$1.50532 \times 10^{-27}$	$1.50532 \times 10^{-27}$	$1.50532 \times 10^{-27}$
50 × 50	$8.72879 \times 10^{-34}$	$3.66637 \times 10^{-34}$	$3.66637 \times 10^{-34}$
60 × 60	$1.08968 \times 10^{-30}$	$8.81150 \times 10^{-41}$	$8.81119 \times 10^{-41}$

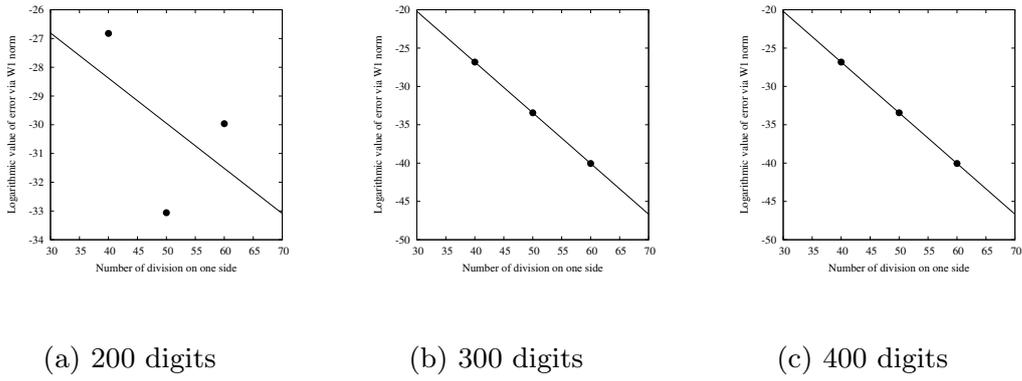


Fig. 2. Semilogarithmic graph of error (Dirichlet problem, equally spaced points).

Table 2.  $W^{1,\infty}$  norm error (Neumann problem, equally spaced points).

Number of division	200 digit	300 digit	400 digit
$40 \times 40$	$1.75154 \times 10^{-27}$	$1.75154 \times 10^{-27}$	$1.75154 \times 10^{-27}$
$50 \times 50$	$1.57825 \times 10^{-32}$	$4.20557 \times 10^{-34}$	$4.20557 \times 10^{-34}$
$60 \times 60$	$3.12169 \times 10^{-29}$	$9.60018 \times 10^{-41}$	$1.0407 \times 10^{-40}$

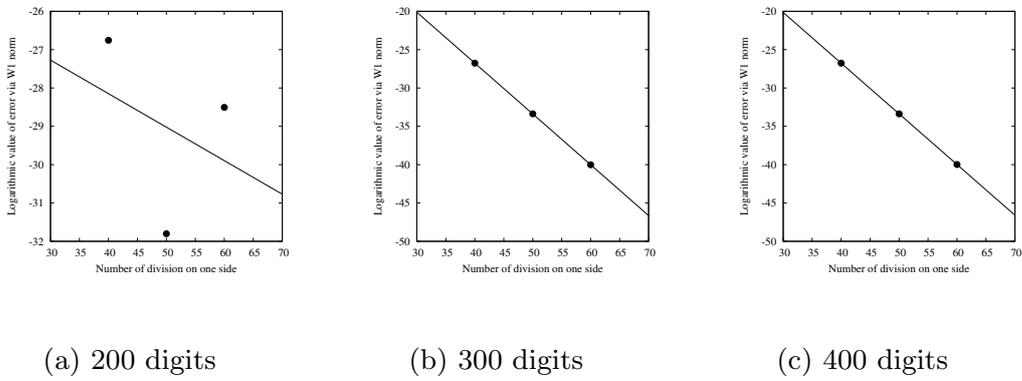


Fig. 3. Semilogarithmic graph of error (Neumann problem, equally spaced points).

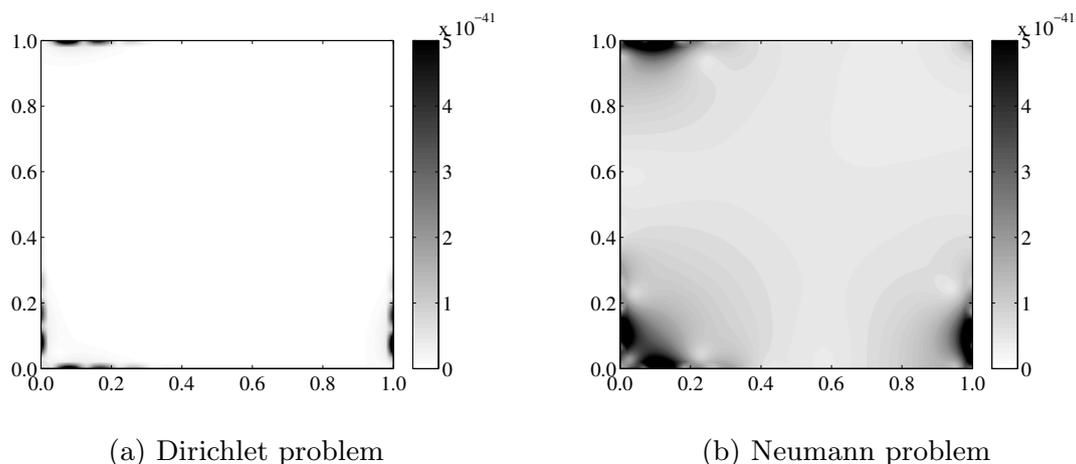


Fig. 4. Distribution of  $W^{1, \infty}$  error (equally spaced points).

Gauss-Lobatto 選点 (4.1) を求積点とした場合の計算結果および誤差分布は、それぞれ Table 3, 4, Fig. 5 のとおりである。等間隔配置の結果に比べ、Dirichlet, Neumann 問題ともに精度が改善された。さらに誤差分布についても、カド点への集中を緩和することができた。精度および誤差分布の観点から、最適設計手法においては Gauss-Lobatto 選点による任意多点差分法を用いることにする。

Table 3.  $W^{1, \infty}$  norm error (Dirichlet problem, Gauss-Lobatto points).

Number of division	200 digit	300 digit	400 digit
$40 \times 40$	$1.55640 \times 10^{-34}$	$1.55640 \times 10^{-34}$	$1.55640 \times 10^{-34}$
$50 \times 50$	$2.21442 \times 10^{-41}$	$6.88996 \times 10^{-43}$	$6.88996 \times 10^{-43}$
$60 \times 60$	$2.74704 \times 10^{-41}$	$3.14870 \times 10^{-51}$	$3.14870 \times 10^{-51}$

Table 4.  $W^{1, \infty}$  norm error (Neumann problem, Gauss-Lobatto points).

Number of division	200 digit	300 digit	400 digit
$40 \times 40$	$3.18098 \times 10^{-34}$	$3.18098 \times 10^{-34}$	$3.18098 \times 10^{-34}$
$50 \times 50$	$9.45472 \times 10^{-40}$	$1.42875 \times 10^{-42}$	$1.42875 \times 10^{-42}$
$60 \times 60$	$2.47085 \times 10^{-41}$	$6.55828 \times 10^{-51}$	$6.55828 \times 10^{-51}$

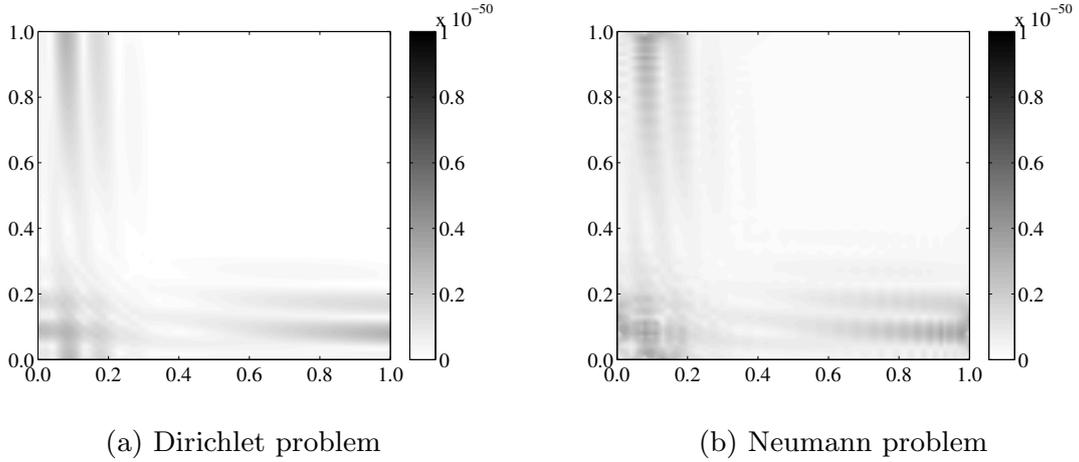


Fig. 5. Distribution of  $W^{1, \infty}$  error (Gauss-Lobatto points).

## 4.2 高精度位相最適化手法に対する数値実験

先行研究 [15] における例題を用いて、開発手法の有効性と密度型位相最適化問題に対する最急降下法、 $H^1$  勾配法の数値安定性と収束性について検証する。主問題 (2.2) における外力項を  $f(x_1, x_2) = 2(x_1^2 + x_2^2 - (x_1 + x_2))$  とし、 $\Gamma_u = \partial D$  ( $\Gamma_q = \emptyset$ ),  $u_D \equiv 0$ ,  $\phi(\theta) = \frac{1 + \tanh \theta}{2}$ ,  $\alpha = 2$  とする。また  $D_C = \emptyset$ , すなわち  $\Theta = C^{0,1}(\bar{D})$  とする。コスト関数および制約汎関数は、次のとおりとする。

$$f_0(\theta, u) = \int_D f u \, dx, \quad f_1(\theta, u) = \int_D \phi(\theta) \, dx - \frac{1}{2}.$$

すなわち  $m = 1$ ,  $\zeta_0(\theta, u) = f u$ ,  $\zeta_1(\theta, u) = \phi(\theta)$ ,  $\eta_{D_i}(\partial_\nu u) = 0$ ,  $c_0 = 0$ ,  $c_1 = 1/2$  であり、 $\theta \in \Theta$  のとき第 2 章の仮定を満たす。また  $\zeta_{0\theta}(\theta, u) = 0$ ,  $\zeta_{0u}(\theta, u) = f$ ,  $\zeta_{1\theta}(\theta, u) = \phi_\theta$ ,  $\zeta_{1u}(\theta, u) = 0$  より、随伴問題 (2.9) の解は  $v_0 = u$ ,  $v_1 \equiv 0$  であり、勾配は

$$g_0 = -2\phi\phi_\theta|\nabla u|^2, \quad g_1 = \phi_\theta$$

となる。ステップサイズ  $\epsilon > 0$  の選択には、直線探索法の一つであるバックトラック法 (Armijo の基準) [17] を用いる。

初期設計変数を  $\theta_0 \equiv 0$  とし、求積点は Gauss-Lobatto 選点により配置する。計算桁数は 10 進 300 桁、反復終了判定は計算機イプシロン  $\epsilon \approx 5.56268 \times 10^{-309}$  により

$$|f_0(\theta_{k+1}, u_{k+1}) - f_0(\theta_k, u_k)| < \epsilon$$

とする。計算結果は Fig. 6, またコスト関数  $f_0$  のグラフは Fig. 7 のとおりである。

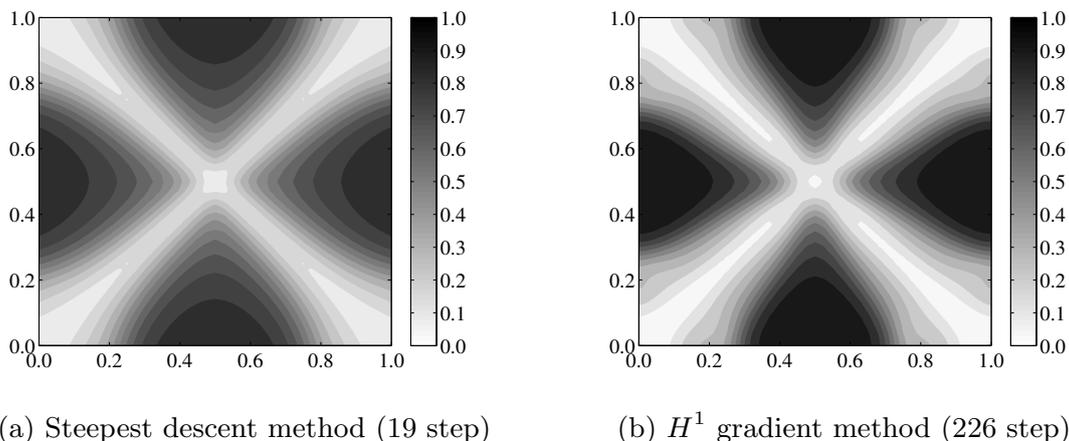


Fig. 6. Calculated density function  $\phi$  (Gauss-Lobatto points,  $60 \times 60$ ).

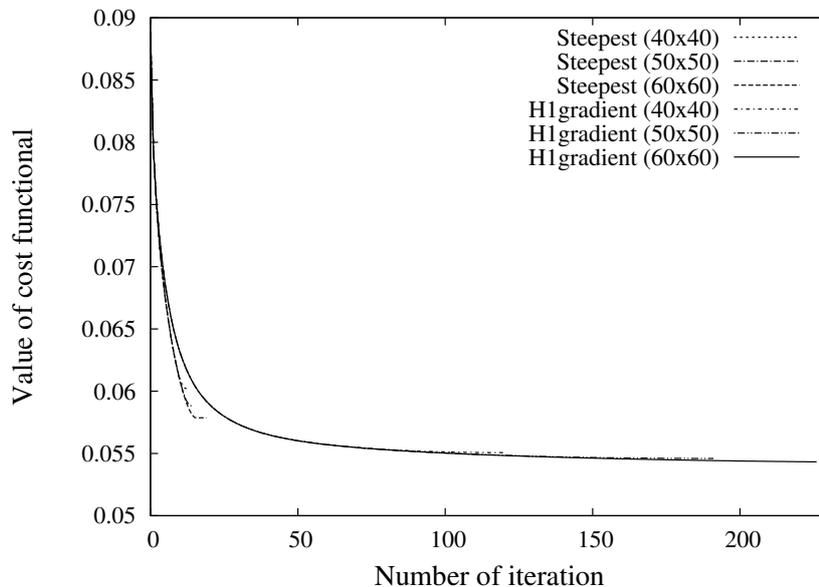


Fig. 7. Graph of cost functional  $f_0$ .

Fig. 7 より，最急降下法は同じ反復ステップにおいて  $H^1$  勾配法よりコスト関数値を小さくするという意味で良好な結果を得ることができた．しかし，計算したすべての求積点配置において少ない反復ステップでステップサイズ  $\epsilon$  の選択に失敗し終了した．それに対して  $H^1$  勾配法は， $60 \times 60$  の求積点配置で収束， $40 \times 40$ ， $50 \times 50$  の求積点配置で最急降下法と同じくステップサイズ  $\epsilon$  の選択に失敗し停止したものの，収束した場合と近い形状が得られるまで反復を継続することができた．これらの結果より，丸め誤差・離散化誤差を十分小にした場合においても，最急降下法は  $H^1$  勾配法に比べ誤差の影響を大きく受けることが明らかになった．よって最急降下法は，密度型位相最適化問題に対して計算桁数・方法によらず不安定な手法である可能性が示唆された．一方，計算桁数・方法によら

ず不安定であることを示すためには、丸め誤差，離散化誤差を増加させていったときの理論解析が必須であり，今後検討する必要がある。

倍精度環境と有限要素法による  $H^1$  勾配法の計算結果は，Fig. 8 のとおりである．ここで有限要素法による  $H^1$  勾配法の計算プログラムは，FreeFem++ バージョン 3.36 [10] により作成・実行した．反復回数 180 回の結果 (Fig. 8 (a)) の結果は，任意多点差分法を用いた場合 (Fig. 6 (b)) とほぼ同形状の結果を得ることができた．一方，各種誤差の影響により，計算機イプシロンによる収束判定で反復は停止せず Fig. 8 (b) のとおりの結果となった．これらの結果より， $H^1$  勾配法は計算環境によらず安定な手法であり，さらに高精度最適化手法を用いることでより安定な手法となることが示唆された．しかし，任意多点差分法による高精度手法においても，コスト関数の変化量が非常に小であるという意味で計算は終了させられたものの， $H^1$  勾配法で基礎にしている KKT 条件 (2.5) の Lagrange 関数勾配値は  $1.01273 \times 10^{-2}$ ，つまり停留点に到達させることが出来なかった．よって，Fig. 8 (b) の結果はアイランド現象に近い数値不安定現象と考えられるものの，最適形状である可能性も残っており，この数値実験において  $H^1$  勾配法が過大な安定化手法ではないことを示すことができなかった．今後は，各ステップにおける未定乗数の決定手法などを検討することで，開発手法を停留点へ到達できるよう改良し， $H^1$  勾配法の収束性と安定性，特に過大な安定化となっていないかを明らかにする必要がある．

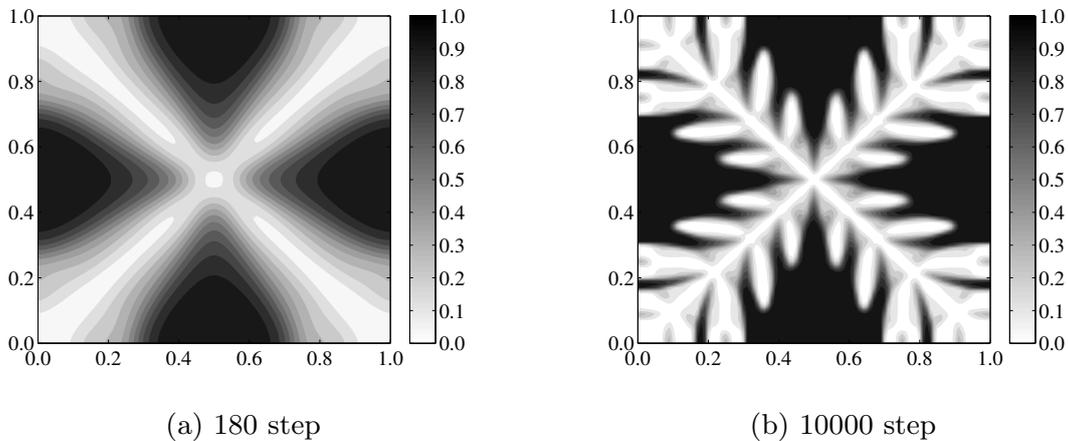


Fig. 8. Calculated density function  $\phi$  via FEM.

## 5. まとめ

本論文では，Poisson 方程式を支配方程式とする密度型位相最適化問題に対して高精度最適設計手法を開発し，その有効性の検証および最急降下法， $H^1$  勾配法の数値安定性と収束性について考察した．

密度型位相最適化問題に対する方法としては，KKT 条件を基礎とした勾配法を採用した．計算はすべて多倍長環境で実行し，コスト関数，勾配などを求めるのに必要な偏微分

方程式の境界値問題に対する解法として微分求積法の一つであり、高精度メッシュフリー解法でもある任意多点差分法 [11] を用いることで、高精度勾配法を構築した。

反復解法で現れる密度型 Poisson 方程式の境界値問題に対して、任意多点差分法を適用し、その高精度性を数値実験により検証した。その実験結果より、任意多点差分法は指数関数的に誤差が減少する方法であることが示唆された。さらに、計算精度を得るためには多倍長環境において十分な計算桁数が必要なこと、そして求積点配置に工夫することで精度が向上する可能性を見出した。

また、密度型位相最適化問題に対する実験結果から、最急降下法は同じ反復ステップにおいては  $H^1$  勾配法よりコスト関数値を小さくする点で良好な結果が得られたものの、実験をしたすべての結果でステップサイズの更新に失敗し、計算が終了した。しかし、計算桁数と求積点数を増加させる、すなわち丸め誤差と離散化誤差を減少させることで、 $H^1$  勾配法においてこの問題は回避可能であることを数値例により示した。最急降下法は、離散化・丸め誤差を減少させてもステップサイズの更新に失敗することから、密度型位相最適化問題に対して誤差の影響を受け易い不安定な方法であることが示唆された。また従来手法を用いた結果との比較により、 $H^1$  勾配法は計算環境によらず安定な手法であり、さらに高精度最適化手法を用いることで、より安定な手法となることが示唆された。しかし問題に対する手法の安定性を示すには、計算桁数および求積点数を増加させていったときの理論解析が必須であり、今後検討する必要がある。

一方、高精度解法を用いた提案手法によっても、KKT 条件 (2.5) を満足させることはできない、つまり停留点に到達させることが出来なかった。今後は、各ステップにおける未定乗数の決定手法などを検討し、開発高精度手法を停留点に到達できるよう改良する。また、その改良により  $H^1$  勾配法の収束性と安定性について、特に安定性については過大な安定化となっていないかを明らかにする。さらに、提案手法を線形弾性方程式など実用問題に現れる方程式を用いた密度型位相最適化問題に対して適用することも、今後の課題である。

**謝辞** 本研究は、日本学術振興会科学研究費 (基盤研究 (C) 23541052) の助成を受けています。

## 参考文献

- [1] 畔上秀幸, 形状最適化問題の正則化解法, 日本応用数学会論文誌, **24** (2014), 83–138.
- [2] Azegami, H., Kaizu, S. and Takeuchi, K., Regular solution to topology optimization problems of continua, JSIAM Letters, **3** (2011), 1–4.
- [3] Bellman, R., Differential quadrature and long-term integration, Journal of Mathematical Analysis and Applications, **34** (1971), 235–238.

- [4] Bellman, R., Differential quadrature: a technique for the rapid solution of nonlinear partial differential equations, *Journal of Computational Physics*, **10** (1972), 40–52.
- [5] Bendsøe, M. P. and Sigmund, O., *Topology Optimization: Theory, Methods, and Applications*, Springer-Verlag, Berlin, 2003.
- [6] Diaz, A. R. and Sigmund, O., Checkerboard patterns in layout optimization, *Structtural Optimization*, **10** (1995), 40–45.
- [7] 藤原宏志, 多倍長ライブラリ Exflib,  
<http://www-an.acs.i.kyoto-u.ac.jp/~fujiwara/exflib/>
- [8] Fujiwara, H. and Iso, Y., Application of multiple-precision arithmetic to direct numerical computation of inverse acoustic scattering, *Journal of Physics, Conference Series* 73, doi:10.1088/1742-6596/73/1/012007, 2007.
- [9] Grisvard, P., *Elliptic Problems in Nonsmooth Domains*, SIAM, Philadelphia, 2011.
- [10] Hecht, F., New development in FreeFem++, *Journal of Numerical Mathematics*, **20** (2012), 251-265.
- [11] Iijima, K., Application of high order finite difference approximation as exponential interpolation, *Theoretical and Applied Mechanics Japan*, **53** (2004), 239–247.
- [12] Iijima, K. and Onishi, K., Lattice-free finite difference method for numerical solution of inverse heat conduction problem, **15** (2007), 93–106.
- [13] 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.
- [14] Kirsch, A., *An Introduction to the Mathematical Theory of Inverse Problems*, Second edition, Springer, New York, 2011.
- [15] Murai, D. and Azegami, H., Error analysis of H1 gradient method for topology optimization problems of continua, *JSIAM Letters*, **3** (2011), 73–76.
- [16] 西脇眞二, 泉井一浩, 菊池昇, *トポロジー最適化*, 丸善出版, 2013.
- [17] Nocedal, J. and Wright, S. J., *Numerical Optimization*, Second edition, Springer, New York, 2006.
- [18] 株式会社くいと, *位相最適化: 構造最適化設計ソフトウェア OPTISHAPE-TS*.
- [19] Shien, J., Tang, T. and Wang, L.-L., *Spectral Method: Algorithms, Analysis, and Applications*, Springer-Verlag, Berlin, 2011.

渡邊 祥 (学生会員) 〒480-1198 愛知県長久手市茨ヶ廻間 1522-3

2013 年愛知県立大学情報科学部情報科学科卒業。現在，愛知県立大学大学院情報科学研究科博士前期課程 2 年生。日本応用数理学会学生会員 (投稿時)。

代田 健二 (正会員) 〒480-1198 愛知県長久手市茨ヶ廻間 1522-3

1995 年東京理科大学大学院理学研究科修士課程修了，博士 (理学)。現在，愛知県立大学情報科学部情報科学科准教授。日本応用数理学会代表会員，日本数学会・日本計算数理工学会・日本計算工学会会員。微分方程式の逆問題と数値解析・数値計算に興味を持つ。