

# SS 法と境界要素法を用いた周期構造のトポロジー最適化

## A TOPOLOGY OPTIMISATION OF PERIODIC STRUCTURES WITH THE SAKURAI-SUGIURA METHOD AND THE BOUNDARY ELEMENT METHOD

釜堀 瑞生<sup>1)</sup>, 飯盛 浩司<sup>2)</sup>, 高橋 徹<sup>3)</sup>, 松本 敏郎<sup>4)</sup>

Mizuki KAMAHORI, Hiroshi ISAKARI, Toru TAKAHASHI and Toshiro MATSUMOTO

- 1) 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: m\_kamahori@nuem.nagoya-u.ac.jp)  
 2) 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: isakari@nuem.nagoya-u.ac.jp)  
 3) 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: ttaka@nuem.nagoya-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)

In the last several decades, periodic structures such as photonic and phononic crystals have attracted much attention of researchers and engineers because these materials have various special properties such as full bandgaps. The full bandgap is defined as a “frequency range in which waves cannot propagate in any direction”. It is expected that the distinguished property can realise advanced wave devices such as photonic crystal laser, cloaking etc. To design such sophisticated devices, it is required to establish a method for controlling full bandgaps of periodic structures. The main scope of this paper is to design periodic structures with large full bandgaps. We present a topology optimisation for 2D photonic crystals with the square and the hexagonal lattice.

**Key Words** : Topology optimisation, Level set method, Boundary element method, Sakurai-Sugiura method, Topological derivative, Periodic structures, Full bandgap

### 1. 緒言

近年, フォトニック結晶やフォノン結晶等, その周期構造に起因して特異な波動特性を持つ新規材料が注目を集めている. フォトニック結晶は電磁波に対するフルバンドギャップ, すなわち任意の方向に進む波が伝播できない周波数帯を有する材料であり, フォノン結晶は弾性波に対するフルバンドギャップを有する材料である. これらの材料は, これまでにない波動特性を有する新規デバイスへの応用が見込まれるとして, その研究開発が進められている<sup>(1)</sup>.

周期構造の設計開発においては, 所望の周波数帯におけるフルバンドギャップを実現する構造を設計することが重要である. したがって, このような材料の最適設計問題は所望の周波数帯におけるフルバンドギャップ幅の最大化問題として定式化することができる. フルバンドギャップは, 第一 Brillouin ゾーン中の全ての波数ベクトルに対し, 周期境界値問題の固有値が存在しない周波数帯として定義される. したがって, フルバンドギャップの上下端を周期境界値問題の固有値問題 (周期固有値問題) を解いて求め, これらをフルバンドギャップ幅を広げるように移動させる最適化問題を解くことで周期構造の最適設計を行うことができる. しばしば,

設計領域を張る Euler メッシュを利用した最適化が行われるが<sup>(2)</sup>, 領域形状を高精度に保持するためにはメッシュを逐次更新しながら順解析を行うことが望ましい. その場合にはメッシングのコストが小さい境界要素法が考えられる. ところが, 周期固有値問題を有限要素法で再定式化した場合には一般化固有値問題になる一方で境界要素法で再定式化した場合には非線形固有値問題となる. このことに起因して, 従来は周期構造の最適設計に境界要素法はあまり用いられてこなかった. しかし, 近年提案された Sakurai-Sugiura (SS) 法<sup>(3)</sup>を利用することにより, 非線形固有値問題を比較的容易に解くことが可能となった. 実際, 境界要素法に由来する非線形固有値問題を SS 法で解いた例として Gao ら<sup>(4)</sup>, 周期固有値問題を境界要素法と SS 法を利用して解いた例として野瀬・西村<sup>(5)</sup>を挙げることができる. 著者らの研究グループでも, 境界要素法を用いた非周期固有値問題のトポロジー最適化手法を開発し<sup>(6)</sup>, 周期固有値問題についても多重極法に基づく高速直接境界要素法と SS 法を用いた解法を確立した<sup>(7)</sup>.

そこで本研究では, フォトニック結晶の TE 偏光の電磁場に対するフルバンドギャップ幅の最大化問題を, SS 法と境界要素法を用いたトポロジー最適化によって解く手法を開発する.

## 2. 定式化

本節では、2周期構造のバンド構造におけるフルバンドギャップ幅の最大化を目的とした最適設計の理論を構築する。第2.1節から第2.3節で境界要素法を用いた2周期構造のバンド構造解析の定式化を行い、第2.4節から第2.6節で最適化問題の定義と、それを解くためのアルゴリズムを示す。

### 2.1. 2周期構造に対する固有値問題

Fig. 1のような、 $x_3$ 軸方向に一様な誘電体と完全導体からなる2周期構造 $\Omega$ の単位セル $U := \{x \mid x = pa_1 + qa_2, p, q \in \mathbb{R}, 0 < p < 1, 0 < q < 1\}$ を考える。ここに、 $a_i \in \mathbb{R}^2$  ( $i = 1, 2$ )は基本並進ベクトルであり、 $n$ は $U \cap \Omega$ の外向き単位法線である。

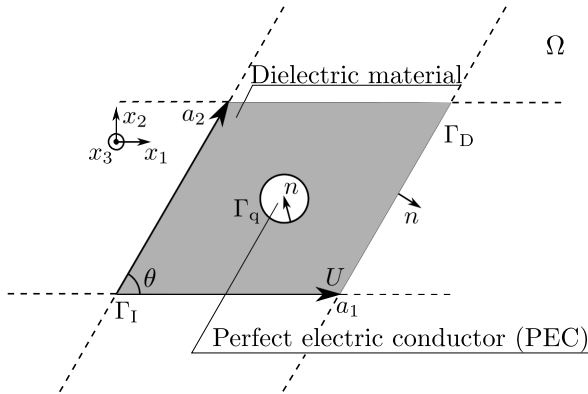


Fig. 1 A unit cell of the domain  $\Omega$ .

TE偏光の電磁場を考えると、磁場の面外成分 $u$ は単位セル $U$ 内で次の2次元Helmholtz方程式を満たす。

$$\nabla^2 u(x) + \varepsilon \omega^2 u(x) = 0 \quad x \in U \cap \Omega \quad (1)$$

ここに、 $\omega$ ,  $\varepsilon$ はそれぞれ、角周波数、誘電率を表す。また、 $u(x)$ が $\Gamma_q$ における斉次境界条件

$$q(x) := \frac{\partial u(x)}{\partial n} = 0 \quad x \in \Gamma_q \quad (2)$$

及び次の擬周期境界条件

$$u(x + a_i) = u(x) \exp(iK \cdot a_i) \quad x \in \Gamma_i \quad (i = 1, 2) \quad (3)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x_i}(x + a_i) = \frac{\partial u}{\partial x_i}(x) \exp(iK \cdot a_i) \quad x \in \Gamma_i \quad (i = 1, 2) \quad (4)$$

を満たすとする。ここに、 $K \in \mathbb{R}^2$ は、Blochの波数ベクトルである。 $\Gamma_I$ はユニットセル $U$ の境界の一部分であり、 $\Gamma_I := \cup_{i=1,2} \Gamma_{Ii}$ ,  $\Gamma_{Ii} = \{x \mid x = pa_i, p \in \mathbb{R}, 0 < p < 1\}$ と定義する。また、 $\Gamma_D$ 及び $\Gamma_{Di}$ を各々 $\Gamma_D = \cup_{i=1,2} \Gamma_{Di}$ ,  $\Gamma_{Di} = \{x \mid x - a_{3-i} \in \Gamma_{Ii}\}$ と定義し、 $\Gamma = \Gamma_q \cup \Gamma_I \cup \Gamma_D$ とする。

以降、上記の境界値問題(1)–(4)を満たす非自明な $u(x)$ が存在する $\omega$ を周期問題の固有値と呼び、それを求める問題を周期固有値問題と呼ぶ。

### 2.2. 境界要素法による周期固有値問題の定式化

周期固有値問題を境界要素法を用いて再定式化する。境界値問題(1)–(4)と等価な境界積分方程式は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} c(x)u(x) + (\mathcal{D}_{\Gamma_q} u)(x) + \sum_{k=1}^2 (\mathcal{D}_{\Gamma_{Ik}} u)(x) \\ + \sum_{k=1}^2 (\tilde{\mathcal{D}}_{\Gamma_{Dk}} u)(x) - \sum_{k=1}^2 (\mathcal{S}_{\Gamma_{Ik}} q)(x) + \sum_{k=1}^2 (\tilde{\mathcal{S}}_{\Gamma_{Dk}} q)(x) = 0 \end{aligned} \quad (5)$$

ここに、 $c(x)$ は自由項、 $\mathcal{S}$ ,  $\mathcal{D}$ ,  $\tilde{\mathcal{S}}$ ,  $\tilde{\mathcal{D}}$ は次式で表される積分作用素である。

$$(\mathcal{S}_{\Gamma} q)(x) = \int_{y \in \Gamma} G(x-y) q(y) dS(y) \quad (6)$$

$$(\mathcal{D}_{\Gamma} u)(x) = \int_{y \in \Gamma} \frac{\partial G(x-y)}{\partial n(y)} u(y) dS(y) \quad (7)$$

$$(\tilde{\mathcal{S}}_{\Gamma_{Di}} q)(x) = \int_{y \in \Gamma_{Di}} G(x-y) \exp(iK \cdot a_i) q(y - a_i) dS(y) \quad (8)$$

$$(\tilde{\mathcal{D}}_{\Gamma_{Di}} u)(x) = \int_{y \in \Gamma_{Di}} \frac{\partial G(x-y)}{\partial n(y)} \exp(iK \cdot a_i) u(y - a_i) dS(y) \quad (9)$$

ただし、 $i = 1, 2$ である。また、 $G(x-y)$ は2次元Helmholtz方程式の基本解であり、次の表現を持つ。

$$G(x-y) = \frac{i}{4} H_0^{(1)}(k|x-y|) \quad (10)$$

ここに、 $H_0^{(1)}$ は0次の第一種Hankel関数である。したがって、周期固有値問題は、境界積分方程式(5)が非自明解を持つ固有値 $\omega$ を求める問題に帰着された。ここで、選点法を用いて積分方程式(5)を離散化すると次式のような代数方程式を得る。

$$A(\omega)\psi = 0 \quad (11)$$

ここに、 $A(\omega) \in \mathbb{C}^{N \times N}$ は影響係数マトリクス、 $\psi \in \mathbb{C}^N$ は成分に境界選点における $u$  on  $\Gamma_q \cup \Gamma_I$ ,  $q$  on  $\Gamma_I$ の値を含む列ベクトル、 $N$ は境界要素数である。

ところで、 $\omega$ は基本解(10)の非線形性に起因して $A(\omega)$ に非線形に含まれるので、解くべき問題は式(11)を満たす非自明解 $\psi$ が存在する固有値 $\omega$ を求める非線形固有値問題である。これを本稿ではSakurai-Sugiura(SS)法を用いて、一般化固有値問題に変換することで数値解析を行った。SS法の詳細については文献(3, 4, 5, 6, 7)を参照されたい。

### 2.3. 第一 Brillouin ゾーン

さて、フルバンドギャップは全ての波数ベクトル $K \in \mathbb{R}^2$ に対する、上述の非線形固有値問題の解が存在しない角周波数 $\omega$ の領域として定義される。実際には、構造の周期性を考えれば第一 Brillouin ゾーンの全ての波数ベクトル $K$ を考えれば十分である。2次元周期構造における第一 Brillouin ゾーンとは、次式で表される一般の逆格子ベクトル $G$ のうち、ゼロベクトルを除く大きさの最も小さい逆格子ベクトルの垂直

二等分線で囲まれる領域である。

$$G = l_1 b_1 + l_2 b_2 \quad (l_1, l_2 \in \mathbb{Z}) \quad (12)$$

$$a_i \cdot b_j = 2\pi \delta_{ij} \quad (i, j = 1, 2) \quad (13)$$

ここに、 $b_i \in \mathbb{R}^2$  ( $i = 1, 2$ ) は基本逆格子ベクトルであり、 $\delta_{ij}$  はクロネッカーのデルタである。正方格子と六方格子の第一 Brillouin ゾーンを Fig. 2 に示す。

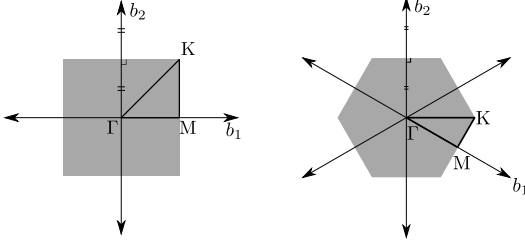


Fig. 2 The first Brillouin zone of (left:) square lattice, (right:) hexagonal lattice.

本来的には第一 Brillouin ゾーンの全ての波数ベクトル  $K$  を考える必要があるが、構造にしかるべき対称性<sup>(8)</sup>があるときに、多くの場合に Fig. 2 で表される第一 Brillouin ゾーンの点  $K - \Gamma - M - K$  を結ぶ線に終点をもつ波数ベクトルに対して固有値が存在しない時にフルバンドギャップが実現されることが知られている。しかしながら、このことは常に成り立つとは限らない。

以上より、ここでは  $K - \Gamma - M - K$  上の波数ベクトル  $K$  に対して、代数方程式 (11) が非自明解  $\psi$  を持つ固有値  $\omega$  を求める非線形固有値問題を取り扱う。

#### 2.4. 最適化問題とその解法

本稿における最適化問題は Fig. 1 のような周期構造について、次式で表される目的関数  $J$  が最大となる領域  $\Omega$  を求める問題である。

$$J = \sum_i^m \sum_j^n W_{ij} \omega_{ij}^2 \quad (14)$$

ここに、 $\omega_{ij}$  は、前節で定義した非線形固有値問題を  $K - \Gamma - M - K$  上から  $n$  個選んだ波数ベクトルのうち第  $j$  波数ベクトルについて、SS 法を用いて解くことによって得られる  $m$  個の固有値のうち、第  $i$  モードのものであり、 $W_{ij}$  は適当な重みである。

本稿では、上記の最適化問題を解くための手法として、トポロジー最適化を用いる。トポロジー最適化の手順は、まず適当な初期形状に対して固有値解析を行い、得られた固有値  $\omega_{ij}$  に対するトポロジー導関数  $\mathcal{T}_{ij}$  を計算して、それを利用して設計対象の形状を更新する。なお、形状の表現には、後述のレベルセット法を用い、前述の対称性を維持するための操作をレベルセット関数に対して施す。以降は、得られた形状を同じ手順で逐次更新し、バンドギャップ幅が収束したら最適化を終了する。

#### 2.5. トポロジー導関数

本節では、トポロジー導関数の導出について述べる。

境界値問題 (1)–(4) を満たす非自明な関数  $u$  が存在する  $\lambda = \omega^2$  を求める周期固有値問題を考える。本節の目的は誘電体領域  $\Omega$  内に微小円形導体領域  $\Omega_\varepsilon$  が出現する際の  $\lambda$  の変化の割合、つまり、トポロジー導関数を導出することである。簡単のため、 $\lambda$  の重複度は 1 として、実数の  $\lambda$  について考える。周期境界値問題 (1)–(4) のある固有対  $(\lambda, u)$  に対し、次の弱形式が成り立つ。

$$0 = - \int_{\Gamma_1 \cup \Gamma_D} \tilde{u} u_{,j} n_j d\Gamma + \int_{\Omega} \tilde{u}_{,j} u_{,j} d\Omega - \lambda \int_{\Omega} \tilde{u} u d\Omega \quad (15)$$

ここに、 $\tilde{u}$  は試験関数である。なお、以降の数式において繰り返し現れる添字  $j$  について  $j = 1, 2$  の範囲で和をとる。ここで、Fig. 3 のように  $\Omega$  内部に完全導体  $\Omega_\varepsilon$  が出現し、 $(\lambda, u) \rightarrow (\lambda + \delta\lambda, u + \delta u)$  と変化したとする。このとき、

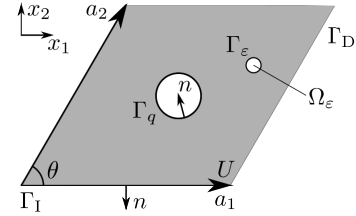


Fig. 3 An emergence of a conductor domain  $\Omega_\varepsilon$ .

$u + \delta u$  は次の境界値問題を満たす。

$$(u + \delta u)_{,jj}(x) + (\lambda + \delta\lambda)(u + \delta u)(x) = 0 \quad x \in \Omega \setminus \bar{\Omega}_\varepsilon \quad (16)$$

$$(u + \delta u)_{,j} n_j(x) = 0 \quad x \in \Gamma_q \cup \Gamma_\varepsilon \quad (17)$$

$$(u + \delta u)(x + a_i) = (u + \delta u)(x) \exp(iK \cdot a_i) \quad x \in \Gamma_1 \quad (18)$$

$$(u + \delta u)_{,j}(x + a_i) n_j(x + a_i) = (u + \delta u)_{,j}(x) n_j(x) \exp(iK \cdot a_i) \quad x \in \Gamma_1 \quad (19)$$

また、 $\Omega_\varepsilon$  の出現に伴い、式 (15) は次式となる。

$$0 = - \int_{\Gamma_1 \cup \Gamma_D} \tilde{u}(u + \delta u)_{,j} n_j d\Gamma + \int_{\Omega \setminus \bar{\Omega}_\varepsilon} \tilde{u}_{,j}(u + \delta u)_{,j} d\Omega - (\lambda + \delta\lambda) \int_{\Omega \setminus \bar{\Omega}_\varepsilon} \tilde{u}(u + \delta u) d\Omega \quad (20)$$

ここで、 $\Gamma_\varepsilon$  上の法線は  $\Omega \setminus \bar{\Omega}_\varepsilon$  の外向きを正と定義した。 $\delta u \delta \lambda \approx 0$  と仮定し、式 (15) を利用すると次式を得る。

$$0 = - \int_{\Omega \setminus \bar{\Omega}_\varepsilon} (\tilde{u}_{,jj} + \lambda \tilde{u}) \delta u d\Omega + \int_{\Gamma_q} \tilde{u}_{,j} n_j \delta u d\Gamma + \int_{\Gamma_1 \cup \Gamma_D} (\tilde{u}_{,j} n_j \delta u - \tilde{u} \delta u_{,j} n_j) d\Gamma + \int_{\Omega \setminus \bar{\Omega}_\varepsilon} (\tilde{u}_{,j} u_{,j} - \lambda \tilde{u} u) d\Omega - \int_{\Gamma_\varepsilon} \tilde{u}_{,j} n_j \delta u d\Gamma - \delta\lambda \int_{\Omega \setminus \bar{\Omega}_\varepsilon} \tilde{u} u d\Omega \quad (21)$$

$\tilde{u}$  として、境界値問題 (1)–(4) の波数ベクトルを  $-K$  で置き換えた境界値問題を満たすものを選び、このような  $\tilde{u}$  が  $u$  と

複素共役な関係にあることに注意して式 (21) を  $\delta\lambda$  について整理すると、次式が得られる。

$$\delta\lambda = \frac{-\int_{\bar{\Omega}_\varepsilon} (|u_{,j}|^2 - \lambda|u|^2)d\Omega + \int_{\Gamma_\varepsilon} \tilde{u}_{,j}n_j\delta u d\Gamma}{\int_{\Omega \setminus \bar{\Omega}_\varepsilon} |u|^2 d\Omega} \quad (22)$$

以降は非周期構造の場合<sup>(6)</sup>と同様の式変形を施すことで、次式のトポロジー導関数  $\mathcal{T}(x)$  を導出することができる。

$$\mathcal{T}(x) = -2|\nabla u(x)|^2 + \lambda|u(x)|^2 \quad (23)$$

## 2.6. レベルセット法

本節では、 $\Omega$  の形状の表現に用いるレベルセット法について簡単に述べる<sup>(2)</sup>。レベルセット法とは、固定設計領域  $D \subset \Omega$  で定義されるスカラー関数であるレベルセット関数  $\phi$  の零等位面により、材料の分布を明確に表現する方法である。ここでは、レベルセット関数を次式で定義する。

$$\begin{cases} 0 < \phi(x) \leq 1 & \text{for } \forall x \in \Omega \\ \phi(x) = 0 & \text{for } \forall x \in \Gamma \\ -1 \leq \phi(x) < 0 & \text{for } \forall x \in D \setminus \bar{\Omega} \end{cases} \quad (24)$$

レベルセット関数  $\phi$  を導入することにより、上述の最適化問題はレベルセット関数の分布を求める問題となる。 $\phi$  に適当

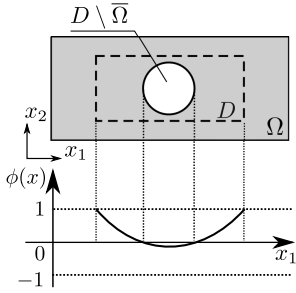


Fig. 4 A material distribution expressed with the level set method.

な初期仮定を与え、次式に基づいて  $\phi$  の分布を更新することで、 $\phi$  の最適な分布を探索する。

$$\frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} = \sum_j w_j \mathcal{T}_j(x, t) + \tau \nabla^2 \phi(x, t) \quad \text{in } D \quad (25)$$

$$\phi(x, t) = c \quad \text{on } \partial D \quad (26)$$

ここに、 $t$  は仮想的な時刻、 $\tau > 0$  は  $\phi$  の滑らかさを規定するパラメータ (複雑度係数) であり、 $c$  は適当な正の数である。また、 $\mathcal{T}_j(x, t)$  は次式で表される。

$$\mathcal{T}_j(x, t) = \sum_i^m W_{ij} \mathcal{T}_{ij}(x) \quad (27)$$

ここに、 $\mathcal{T}_{ij}(x)$  は固有値  $\lambda_{ij}$  に対するトポロジー導関数である。 $w_j$  は、各波数ベクトル毎に計算されたそれぞれのトポロジー導関数  $\mathcal{T}_j(x, t)$  に対する重みである。反応拡散方程式 (25) を用いることで多くの場合に最適解が求まることが知られている<sup>(2, 9)</sup>。

## 3. 数値実験

以下の数値例では Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2640 v3 @ 2.60GHz プロセッサ (コア数: 16) を用い、OpenMP で並列化したプログラムを用いた。また、 $\varepsilon = 1$  とした。

### 3.1. 数値計算例 1

#### 3.1.1. 問題設定

Fig. 1 において  $\theta = 90^\circ$ 、 $|a_1| = |a_2| = 1$  とした、Fig. 5 のような初期形状を考える。初期形状に対してバンド計算を行ったところ Fig. 6 が得られた。ただし、波数ベクトル  $K$  は第一 Brillouin ゾーンの  $\Gamma$  点を除く  $K - \Gamma - M - K$  上に等間隔に 29 点設定した。

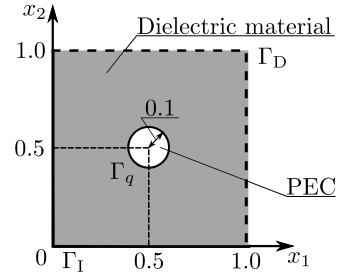


Fig. 5 The initial configuration of unit cell.

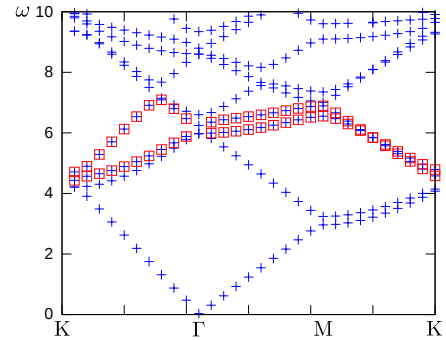


Fig. 6 The initial band diagram of unit cell.

式 (14) の目的関数  $J$  に含まれる重み関数  $W_{ij}$  を適当に設定することで得られる目的関数

$$J = \sum_j (\lambda_{4j} - \lambda_{3j}), \quad j = 1, \dots, 29 \quad (28)$$

を最大化する領域  $\Omega$  の形状を求める最適化問題を解いた。すなわち、第 3, 4 モードの間のフルバンドギャップ幅を最大化する最適化を行った。固定設計領域  $D$  は単位セル  $U$  とした。レベルセット関数の更新に用いたパラメータは各々、 $w_j = (\omega_{4j} - \omega_{3j})^{-1}$ 、 $\tau = 5.0 \times 10^{-3}$ 、 $c = 1.0$  であり、Fig. 6 の四角のシンボルは、トポロジー導関数の計算に利用した固有値を表す。なお目的関数としてフルバンドギャップ幅 ( $\min \omega_{4j} - \max \omega_{3j}$ ) を用いることも考えられるが、数値実験の結果は式 (28) を用いた場合の方が良好であった。

### 3.1.2. 計算結果

前節の最適化問題をトポロジー最適化を用いて解くことによって、Fig. 7のような最適形状とそのバンド構造が得られた。ただし、領域の境界  $\overline{\Gamma_1 \cup \Gamma_D}$  の要素分割数は240とし、境界  $\Gamma_q$  は境界  $\overline{\Gamma_1 \cup \Gamma_D}$  と要素長が同程度となるように、レベルセット関数から自動的に境界要素を分割した<sup>(9)</sup>。最適形状のバンド構造に注目すると、初期形状では存在しなかった第3, 4モードの間のフルバンドギャップが出現していることがわかる。また、得られた最適形状には、トポロジー導関数を計算した第3, 4モードの間だけでなく、他のモード間にも幾つかのフルバンドギャップが達成されている。

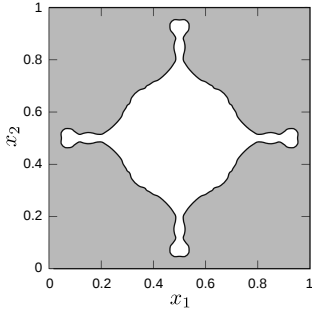


Fig. 7 The configuration of unit cell in step 37.

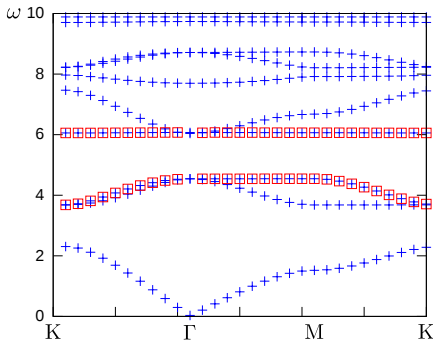


Fig. 8 The band diagram of unit cell in step 37.

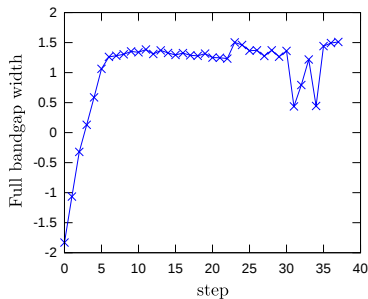


Fig. 9 The history of the full bandgap width.

最適化の各ステップにおけるフルバンドギャップ幅 ( $\min \omega_{4j} - \max \omega_{3j}$ ) を Fig. 9 に示した。ステップを追う毎にフルバンドギャップ幅が増加し、step 6あたりから一定の範囲内に収束していることがわかる。step 31からstep 34でフルバンドギャップ幅が大きく変化しているが、その原因としては単位

セルのトポロジーが大きく変化していることが考えられる。最適形状 (step 37) のフルバンドギャップ幅は1.511であった。また、step 37の計算時間は1814secであった。

### 3.2. 数値計算例 2

#### 3.2.1. 問題設定

Fig. 1において  $\theta = 60^\circ$ ,  $|a_1| = |a_2| = 1$  とした, Fig. 10のような初期形状を考える。初期形状はFig. 11の様なバンド構造を持つ。この初期形状に対して数値計算例1と同様の条件で最適化問題を解くことで、第3, 4モードの間のフルバンドギャップ幅を最大化する最適化を行った。ただし、 $\tau = 8.0 \times 10^{-4}$  とした。

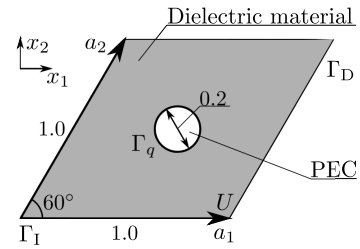


Fig. 10 The initial configuration of unit cell.

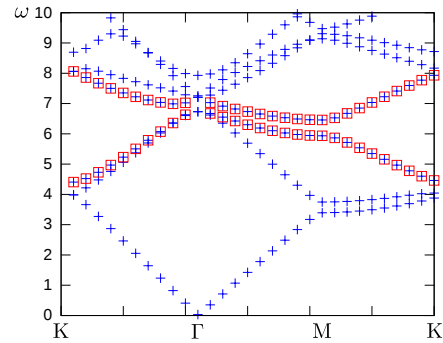


Fig. 11 The initial band diagram of unit cell.

#### 3.2.2. 計算結果

前節の最適化問題をトポロジー最適化を用いて解くことによって、Fig. 12のような最適形状とそのバンド構造が得られた。ただし、領域の境界  $\overline{\Gamma_1 \cup \Gamma_D}$  の要素分割数は240と

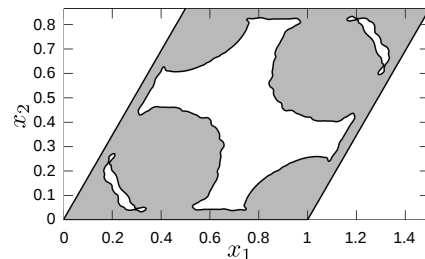


Fig. 12 The configuration of unit cell in step 20.

した。また、境界  $\Gamma_q$  は数値計算例1と同様の手法を用いて要素分割した。最適形状のバンド構造に注目すると、初期形状では存在しなかった第3, 4モードの間のフルバンドギャップ

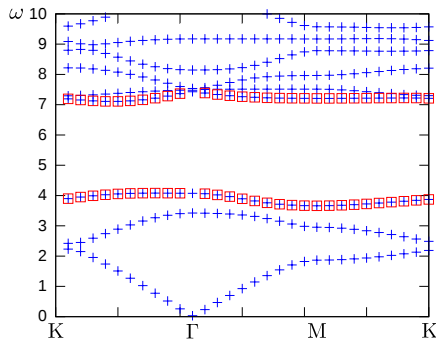


Fig. 13 The band diagram of unit cell in step 20.

プが出現していることがわかる。また、得られた最適形状には、トポロジー導関数を計算した第3, 4モードの間だけでなく、他のモード間にも幾つかのフルバンドギャップが達成されている。

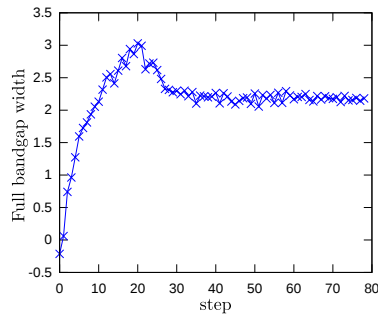


Fig. 14 The history of the full bandgap width.

最適化の各ステップにおけるフルバンドギャップ幅 ( $\min k_{4j} - \max k_{3j}$ ) を Fig. 14 に示した。ステップを追う毎にフルバンドギャップ幅が増加し、step 20 でピークに達し、その後は一定の範囲内に収束していることがわかる。収束の過程でフルバンドギャップ幅が大きく減少しているが、その原因としては式 (25) の正規化項  $\tau \nabla^2 \phi$  により、Fig. 12 の最適形状の単位セル中の右上と左下に見られる穴がステップを追う毎に小さくなり、step 30 で完全に消失していることが原因と考えられる。最適形状 (step 20) のフルバンドギャップ幅は 3.028 であった。また、step 20 の計算時間は 2993 sec であった。

#### 4. 結言

2 周期構造のバンド構造解析を境界要素法と SS 法を用いて行い、フルバンドギャップ幅の最大化を目的としたトポロジー最適化手法を開発した。誘電体と導体からなる 2 周期構造の TE 偏光の電磁場に対するフルバンドギャップ幅の最大化問題の数値実験を行い、数値計算結果を示した。またその実験結果において、所望のモード間のフルバンドギャップ幅が、最適形状で最大となったことから、本提案手法の有効性を確認した。今後の研究課題としては、完全導体領域が周期境界と交差する場合も考慮した最適設計アルゴリズムの開発や、順解析の高速化、最適化の過程で固有値の入れ替わりが生じる場合の対処法<sup>(10)</sup> の検討などが挙げられる。

#### 参考文献

- (1) Guilian Yi and Byeng D Youn. A comprehensive survey on topology optimization of phononic crystals. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, pp. 1–30, 2016.
- (2) Takayuki Yamada, Kazuhiro Izui, Shinji Nishiwaki, and Akihiro Takezawa. A topology optimization method based on the level set method incorporating a fictitious interface energy. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 199, No. 45, pp. 2876–2891, 2010.
- (3) Junko Asakura, Tetsuya Sakurai, Hiroto Tadano, Tsutomu Ikegami, and Kinji Kimura. A numerical method for nonlinear eigenvalue problems using contour integrals. *JSIAM Letters*, Vol. 1, No. 0, pp. 52–55, 2009.
- (4) Haifeng Gao, Toshiro Matsumoto, Toru Takahashi, and Takayuki Yamada. Eigenvalue analysis for 2D acoustic problem by BEM with block SS method. *Transactions of JASCOME*, Vol. 11, p. 59, 2011.
- (5) 野瀬大一郎, 西村直志. 2次元 Helmholtz 方程式の周期境界値問題に現れる固有値問題に対する Sakurai-Sugiura 法と周期多重極法を用いた数値計算. 日本応用数学会論文誌, Vol. 24, No. 3, pp. 185–201, 2014.
- (6) 飯盛浩司, 北林達也, 高橋徹, 松本敏郎. Helmholtz 方程式の境界値問題に関連する固有値のトポロジー導関数と高速直接境界要素法を用いたその数値計算. 計算数理工学論文集, Vol. 15, pp. 31–36, 2015.
- (7) Hiroshi Isakari, Toru Takahashi, and Toshiro Matsumoto. Periodic band structure calculation by the sakurai-sugiura method with a fast direct solver for the boundary element method with the fast multipole representation. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, Vol. 68, pp. 42–53, 2016.
- (8) Kersten Schmidt and Peter Kauf. Computation of the band structure of two-dimensional photonic crystals with hp finite elements. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 198, No. 13, pp. 1249–1259, 2009.
- (9) Hiroshi Isakari, Kenta Nakamoto, Tatsuya Kitabayashi, Toru Takahashi, and Toshiro Matsumoto. A multi-objective topology optimisation for 2D electro-magnetic wave problems with the level set method and BEM. *European Journal of Computational Mechanics*, pp. 1–29, 2016.
- (10) Tae Soo Kim and Yoon Young Kim. Mac-based mode-tracking in structural topology optimization. *Computers & Structures*, Vol. 74, No. 3, pp. 375–383, 2000.