

# フォノンによる微視系熱輸送における エネルギー最小化問題を対象とした感度解析

Sensitivity analysis for energy minimization problems in phonon heat transfer systems

古田 幸三<sup>1)</sup>, 佐藤 綾美<sup>2)</sup>, 泉井 一浩<sup>2)</sup>, 山田 崇恭<sup>2)</sup>, 松本 充弘<sup>2)</sup>, 西脇 眞二<sup>2)</sup>

Kozo FURUTA, Ayami SATO, Kazuhiro IZUI, Takayuki YAMADA, Mitsuhiro MATSUMOTO 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: furuta.kozo.52r@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)

Thermal design is an essential aspect of electronic device design, since reliability and performance improvements depend upon it, especially in nano devices. Design sensitivity is an effective design criterion that indicates how material interfaces can be dealt with based on mathematics and physics, and sensitivity analysis methods for thermal designs are widely reported in the literature. However, conventional sensitivity analysis methods of heat conduction problems are not applicable to nanoscale thermal design problems, since heat conduction at the nanoscale has unique properties, such as ballistic conduction and temperature discontinuities on material interfaces. In this paper, we propose a shape sensitivity analysis method for minimization of energy in nanoscale heat conduction based on the Boltzmann transport equation. This analysis method is useful when developing nanoscale electronic devices that provide high performance cooling. We first set the design problem for the minimization of energy and then construct a method for the shape sensitivity analysis. Finally, we demonstrate the validity of our proposed method through a numerical example.

**Key Words:** Sensitivity Analysis, Nanoscale Heat Conduction, Boltzmann Transport Equation, Thermal Design, Energy Minimization

## 1. 緒言

近年,電子デバイスの高性能化を目的としたデバイスの小型化が進んでおり,ナノ,サブミクロンサイズのデバイス開発が盛んに行われている.この小型化の中で,熱伝導制御性の向上が益々重要となっている.

熱伝導制御のための設計手法に,設計感度を指針として設計変更あるいは,設計感度を用いて最適化を行う方法がある.これまでに,熱伝導制御を対象とした感度解析手法が多く報告されている.線形熱伝導問題に対し,Dems は寸法や形状を設計変数とする感度解析を行っている<sup>(1)</sup>.Novtony らは,定常熱伝導問題を含む一般的な楕円型偏微分方程式を対象としたトポロジー感度解析手法を構築している<sup>(2)</sup>.そして,Pantz は,異なる熱伝導率を持つ二相材料における熱伝導問題を対象とした形状感度解析手法を行っている<sup>(3)</sup>.これら全ては,巨視系熱伝導問題を対象としたものであり,材料界面において温度が不連続となるナノ,サブミクロンサイ

ズの小型デバイスを対象とした感度解析に着目した研究は未だほとんど行われていない.

微視系と巨視系とでは,熱伝導現象が大きく異なることが知られている.Joshi と Majumdar は格子振動の量子であるフォノンが熱伝導について主要な役割を担うとし,その振る舞いを放射伝達方程式を用いて解析する手法を提案した<sup>(4)</sup>.系がフォノンの平均自由行程より十分に大きいとき,フォノンの散乱が十分に行われ,系内で熱は拡散的に輸送される.一方で,フォノンの平均自由行程が系に対し,同程度かそれより大きいとき,フォノンの散乱は十分に行われず,弾道的な熱輸送が行われる.その結果,材料界面において温度が不連続となる.Tien らはフォノンキャリアとするボルツマン輸送方程式を用いた微視系熱輸送解析手法を提案し,その後,多くの数値解析手法が提案されている<sup>(5, 6, 7)</sup>.

本研究では,小型電子デバイスの性能向上のための,微視系熱伝導制御を目的とした感度解析手法の構築を行う.本研究グループはすでに,温度不連続性を考慮した微視系熱輸送

問題における設計領域全体の温度最小化を目的とした形状感度解析手法の構築を行った<sup>(8)</sup>。しかしながら、従来に無い熱伝導特性をもった小型電子デバイス開発のためには、フォノンの粒子速度に依存する熱伝導率やエネルギーを目的関数とする感度解析や、設計領域内の一部領域のみの冷却を目的とした感度解析手法の構築などが必要となる。

そこで本研究では、小型電子デバイスの熱制御性の向上を目的とし、フォノンによる微視系熱輸送を対象とした特定領域内のエネルギー最小化問題の形状感度解析手法を構築する。本論文の構成は、第二章においてエネルギー最小化問題の定式化および形状感度解析を行う。そして第三章において、数値例を通し、本提案手法の妥当性を示す。

## 2. 感度解析

本章ではまず初めに、巨視系と微視系における熱伝導現象の違いをクヌーセン数をもとに説明したのち、フォノンによる微視系熱輸送におけるエネルギー最小化問題の定式化を行い、随伴場および形状感度の導出を行う。

### 2.1. クヌーセン数

巨視系の固体材料における熱伝導現象は、フーリエの法則に従い、次式のように熱流束  $q$  が温度勾配に比例することが知られている。

$$q = -\lambda \nabla T \quad (1)$$

ここで、 $T$  は温度、 $\lambda$  は熱伝導率である。一方で、微視系材料内では、熱伝導はフーリエの法則に従わないことが知られている。Joshi と Majumdar は熱伝導率のサイズ依存性を熱輸送のキャリアであるフォノンの平均自由行程  $l$  と系の代表長さ  $L$  の比で表されるクヌーセン数  $Kn$  を用いて説明した<sup>(4)</sup>。

$$Kn = \frac{l}{L} \quad (2)$$

$Kn$  が 1 より十分に小さいとき、つまり巨視系において、フォノンは輸送中に互いに干渉し散乱される。これは、エネルギーの受け渡しが十分に行われた後に、フォノンが系の端から端へと輸送されることを意味している。その一方で、 $Kn$  が 1 より大きい系、つまり微視系においてキャリアは十分に干渉される前に系の他端に輸送されるため、フォノンは弾道的に輸送される。その結果微視系においては、熱伝導方程式はフーリエ則に基づくものから、ボルツマン輸送方程式に移行する。

また、クヌーセン数が大きい系では、熱伝導特性が界面抵抗による影響を強く受け、材料界面において、温度の不連続性が生じる。この温度の不連続性を利用し、熱伝導特性を制御した小型電子デバイスの開発が近年盛んに行われている。

### 2.2. エネルギー最小化問題の定式化

図 1 のような内部に界面を持つ熱伝導体内の領域  $\Omega_0$  のエネルギー最小化問題の定式化を以下で示す。この熱伝導体全

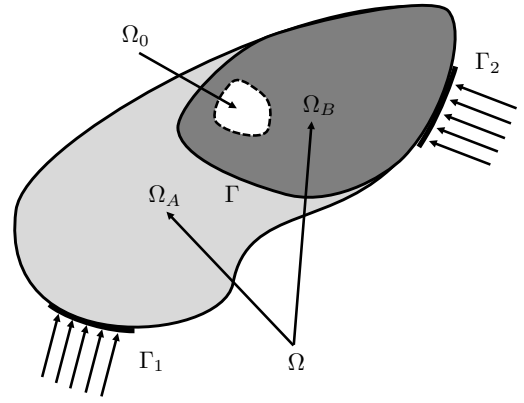


Fig. 1 Boundary conditions for a nanoscale heat conducting structure

体を設計領域  $\Omega$  と定義し、系は熱浴に接しているとする。領域  $\Omega_A$  における分布関数を  $f_A(t, x, \xi)$ 、領域  $\Omega_B$  における分布関数を  $f_B(t, x, \xi)$  とする。ただし、 $\xi$  は、波数ベクトル  $k$  により定義されるフォノンの粒子速度である。境界における領域  $\Omega_A$  内向きへの単位法線ベクトルを  $n$  とする。界面における温度不連続性を考慮した設計手法構築の第一段階として、簡単化のために、材料界面  $\Gamma$  においては、フォノンがある一定の割合  $\alpha$  のみ透過し、残りの割合  $1 - \alpha$  が鏡面反射する境界条件を適用する。この反射により、界面  $\Gamma$  においてフォノンの分布関数  $f(t, x, \xi)$  が不連続になり、温度が不連続となる。

時刻  $t \in I[0, t_f] \subseteq \mathcal{R}_{\geq 0}$ 、位置  $x \in \Omega \subseteq \mathcal{R}^2$ 、波数  $k \in D_\xi \subseteq \mathcal{R}^2$  のときの目的汎関数を次式のように定義する。

$$\inf_{\Omega} J(\Omega) = \int_I \int_{D_\xi} \int_{\Omega} \frac{\hbar \omega}{\tau} \frac{D_0}{\exp\left(\frac{\hbar \omega}{k_B T_B}\right) - 1} dx dk dt \quad (3)$$

ここで、 $k_B$  はボルツマン定数、 $D_0$  はフォノンの状態密度に関する材料定数であり、 $\omega$  は波数  $k$  に関する分散関係である。また、波数空間  $D_\xi$  は第一ブリルアンゾーンより  $D_\xi = \{k; -k_{\max} \leq k_x, k_y \leq k_{\max}\}$  と定義される。本目的汎関数は、先行研究では考慮されなかった波数空間に依存する被積分関数を有しており、さらに領域  $\Omega_0$  内のみのエネルギー最小化を目的としている<sup>(8)</sup>。そのため、従来法では考慮されなかった小型電子デバイス内の特定の領域のみの熱制御、特に冷却性向上を目的とした設計が可能となり、従来に無い微視系熱伝導特性を持ったデバイスの開発に繋がることを期待できる。

微視系熱伝導体内のフォノンの熱輸送は以下のボルツマン方程式の初期値、境界値問題に従う。

$$\frac{\partial f_i(t, x, \xi)}{\partial t} + \xi \cdot \nabla f_i(t, x, \xi) = -\frac{1}{\tau} (f_i(t, x, \xi) - f_i^{\text{eq}}(\omega, T_i)) \quad \text{in } I \times \Omega_i \times D_\xi \quad (4)$$

$$f_A(t, x, \xi) = f_A^{\text{eq}}(\omega, T_1) \quad \text{on } I \times \Gamma_1 \times D_{\xi_+} \quad (5)$$

$$f_B(t, x, \xi) = f_B^{\text{eq}}(\omega, T_2) \quad \text{on } I \times \Gamma_2 \times D_{\xi_+} \quad (6)$$

$$f_A(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = \alpha f_B(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) + (1 - \alpha) f_A(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi} - 2(\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n})$$

$$\text{on } I \times \Gamma \times D_{\xi_+} \quad (7)$$

$$f_B(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = \alpha f_A(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) + (1 - \alpha) f_B(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi} - 2(\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n})$$

$$\text{on } I \times \Gamma \times D_{\xi_-} \quad (8)$$

$$f_i(0, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = f^0 \quad \text{in } \Omega_i \times D_{\xi} \quad (9)$$

ただし,  $i \in \{A, B\}$  であり,  $\tau$  は緩和時間を表す. ここで, 粒子速度  $\boldsymbol{\xi}$  は次式のように定義される.

$$\xi_j(\mathbf{k}) = \frac{\partial \omega(\mathbf{k})}{\partial k_j} = \text{sgn}(k_j) \frac{\pi}{2k_{\max}} \cos\left(\frac{\pi k_j}{2k_{\max}}\right), \quad j = x, y \quad (10)$$

さらに,  $D_{\xi_+}, D_{\xi_-}$  はそれぞれ  $D_{\xi_+} = \{\mathbf{k}; \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{n} \geq 0\}, D_{\xi_-} = \{\mathbf{k}; \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{n} < 0\}$  と定義する.

また, 平衡分布関数  $f_i^{\text{eq}}(\omega, T_i)$  は次式のように定義される.

$$f_i^{\text{eq}}(\omega, T_i) = \frac{D_0}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T_i}\right) - 1} \quad (11)$$

さらに, 巨視系の変数である温度  $T$  は次式の局所エネルギー保存則より求まる.

$$\int_{D_{\xi}} \hbar\omega \frac{f_i(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})}{\tau} d\mathbf{k} = \int_{D_{\xi}} \hbar\omega \frac{f_i^{\text{eq}}(\omega, T_i)}{\tau} d\mathbf{k}$$

$$\text{in } I \times \Omega_i \quad (12)$$

なお本研究では超格子構造をもつ材料を想定し, 材料 A, B において緩和時間などの材料に依存する定数は, 同じ値を持つとする

### 2.3. 感度解析

本節では, ラグランジュ未定乗数法と随伴変数法に基づき, 形状感度の導出を行う. 初めに, 形状感度の定義を行う<sup>(9)</sup>. 形状感度  $J'(\Omega)(\theta)$  は設計領域の形状が微小に変化した際の目的汎関数の変化量であり, フレッシュ微分を用いることで次式のように定義される.

$$J(\text{Id} + \theta)(\Omega) = J(\Omega) + J'(\Omega)(\theta) + o(\theta) \quad (13)$$

ただし,  $\theta$  は形状の微小変動を表す. さらに形状感度  $J'(\Omega)(\theta)$  はこの空間において線形で連続である. Pantz は, 異なる熱伝導率を持つ二相材料における巨視系熱伝導問題の形状感度解析を行った<sup>(3)</sup>. この手法をもとに, 温度不連続性を考慮した形状感度の導出を行う. ラグランジアン  $\mathcal{L}(\tilde{\mathbf{Q}}, \tilde{\mathbf{W}}, \Omega)$  において, 状態変数  $\tilde{\mathbf{Q}}$  および随伴変数  $\tilde{\mathbf{W}}$  が設計領域  $\Omega$  の形状に依存しない変数として定義する. このように変数を定義することで形状の変化を考慮することなく, ラグランジアン  $\mathcal{L}$  に対して変分をとることが可能となり, Allaire らが提案した以下の定理を用いることで容易に感度を導出することが可能となる<sup>(9)</sup>.

関数  $g_1(\mathbf{x}), g_2(\mathbf{x})$  を被積分関数にもつ次式のような汎関数  $G_1(\Omega), G_2(\Omega)$  に対し,

$$\begin{cases} G_1(\Omega) = \int_{\Omega} g_1(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \\ G_2(\Omega) = \int_{\Gamma} g_2(\mathbf{x}) d\mathbf{s} \end{cases} \quad (14)$$

次式が成り立つ.

$$\begin{cases} G'_1(\Omega)(\theta) = - \int_{\Gamma} g_1(\mathbf{x}) \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{n} d\mathbf{s}, \\ G'_2(\Omega)(\theta) = \int_{\Gamma} \left( \frac{\partial g_2(\mathbf{x})}{\partial n} + g_2(\mathbf{x}) H \right) \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{n} d\mathbf{s} \end{cases} \quad (15)$$

ただし,  $H$  は境界  $\Gamma$  に対する曲率であり,  $H = \text{div} \mathbf{n}$  で定義される.

従来のボルツマン方程式を対象とした感度解析手法では, 界面における不連続性を考慮してこなかった. 一方で, 微視系の熱伝導問題においては物質界面における温度の不連続性が, 電子デバイス開発のための重要な効果であり, 無視することができない. そこで本研究では, このような不連続性を含んだ問題に対し, 界面における境界条件をラグランジアンに加えることで, 不連続性を考慮した形状感度の導出を行う.

ラグランジアン  $\mathcal{L}(\tilde{\mathbf{Q}}, \tilde{\mathbf{W}}, \Omega)$  を次のように定義する.

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\tilde{\mathbf{Q}}, \tilde{\mathbf{W}}, \Omega) &= \mathcal{L}(\tilde{f}_i, \tilde{T}_i, \tilde{p}_i, \tilde{V}_i, \tilde{l}, \tilde{r}, \tilde{h}, \tilde{s}, \tilde{\eta}_i, \Omega) \\ &= \int_I \int_{D_{\xi}} \int_{\Omega_0} \frac{\hbar\omega}{\tau} \frac{D_0}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T_B}\right) - 1} d\mathbf{x} d\mathbf{k} dt \\ &+ \sum_i \int_I \int_{D_{\xi}} \int_{\Omega_i} \tilde{p}_i \left( \frac{\partial \tilde{f}_i}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla \tilde{f}_i + \frac{1}{\tau} (\tilde{f}_i - f_i^{\text{eq}}) \right) d\mathbf{x} d\mathbf{k} dt \\ &+ \sum_i \int_I \int_{\Omega_i} \tilde{V}_i \left[ \int_{D_{\xi}} \hbar\omega \frac{\tilde{f}_i}{\tau} d\mathbf{k} - \int_{D_{\xi}} \hbar\omega \frac{f_i^{\text{eq}}}{\tau} d\mathbf{k} \right] d\mathbf{x} dt \\ &+ \int_I \int_{D_{\xi}} \int_{\Gamma_1} \tilde{l} (\tilde{f}_A - f_A^{\text{eq}}) d\mathbf{s} d\mathbf{k} dt \\ &+ \int_I \int_{D_{\xi}} \int_{\Gamma_2} \tilde{r} (\tilde{f}_B - f_B^{\text{eq}}) d\mathbf{s} d\mathbf{k} dt \\ &+ \int_I \int_{D_{\xi_+}} \int_{\Gamma} \tilde{h} (\tilde{f}_A - \alpha \tilde{f}_B - (1 - \alpha) \tilde{f}_A) d\mathbf{s} d\mathbf{k} dt \\ &+ \int_I \int_{D_{\xi_-}} \int_{\Gamma} \tilde{s} (\tilde{f}_B - \alpha \tilde{f}_A - (1 - \alpha) \tilde{f}_B) d\mathbf{s} d\mathbf{k} dt \\ &+ \sum_i \int_{\Omega_i} \int_{D_{\xi}} \tilde{\eta}_i (\tilde{f}_i - f^0) d\mathbf{x} d\mathbf{k} \end{aligned} \quad (16)$$

ここで,  $\tilde{f}_i, \tilde{T}_i$  は状態変数,  $\tilde{p}_i, \tilde{V}_i, \tilde{l}, \tilde{r}, \tilde{h}, \tilde{s}, \tilde{\eta}_i$  は随伴変数である. また,  $\tilde{f}_i$  は次式のような境界  $\Gamma$  での反射項を表す.

$$\tilde{f}_i = \tilde{f}_i(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi} - 2(\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}) \quad (17)$$

次式の最適性の条件より, ラグランジアン  $\mathcal{L}$  を  $\phi$  方向について, 状態変数  $\tilde{\mathbf{Q}}$ , 随伴変数  $\tilde{\mathbf{W}}$  のそれぞれでフレッシュ微分を行う.

$$\left\langle \sum_j \frac{\partial \mathcal{L}(\tilde{\mathbf{Q}}, \tilde{\mathbf{W}}, \Omega)}{\partial \tilde{\mathbf{W}}_j}, \phi \right\rangle = 0, \quad (18)$$

$$\left\langle \sum_j \frac{\partial \mathcal{L}(\tilde{\mathbf{Q}}, \tilde{\mathbf{W}}, \Omega)}{\partial \tilde{\mathbf{Q}}_j}, \phi \right\rangle = 0. \quad (19)$$

ここで、ラグランジアン  $\mathcal{L}$  が式 (18) および (19) を満たすラグランジュ乗数  $\tilde{Q}$  および  $\tilde{W}$  を、それぞれ  $Q$ 、 $W$  と定義する。状態場 (式 (4)–(12)) はラグランジアン停留点である式 (18) を満たす。また式 (19) より、随伴場が次式のような分布関数  $p_i(t, \mathbf{x}, \xi)$  に関するボルツマン輸送方程式の初期値、境界値問題として得られる。

$$\frac{\partial p_i(t, \mathbf{x}, \xi)}{\partial t} + \xi \cdot \nabla p_i(t, \mathbf{x}, \xi) = \frac{1}{\tau} (p_i(t, \mathbf{x}, \xi) + \hbar\omega V_i) \quad \text{in } I \times \Omega_i \setminus \Omega_0 \times D_\xi \quad (20)$$

$$\frac{\partial p_B(t, \mathbf{x}, \xi)}{\partial t} + \xi \cdot \nabla p_B(t, \mathbf{x}, \xi) = \frac{1}{\tau} (p_B(t, \mathbf{x}, \xi) + \hbar\omega V_0) \quad \text{in } I \times \Omega_0 \times D_\xi \quad (21)$$

$$p_i(t, \mathbf{x}, \xi) = 0 \quad \text{on } I \times \Gamma_1 \times D_{\xi-} \quad (22)$$

$$p_i(t, \mathbf{x}, \xi) = 0 \quad \text{on } I \times \Gamma_2 \times D_{\xi-} \quad (23)$$

$$p_A(t, \mathbf{x}, \xi) = \alpha p_B(t, \mathbf{x}, \xi) + (1 - \alpha) p_A(t, \mathbf{x}, \xi - 2(\xi \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}) \quad \text{on } I \times \Gamma \times D_{\xi-} \quad (24)$$

$$p_B(t, \mathbf{x}, \xi) = \alpha p_A(t, \mathbf{x}, \xi) + (1 - \alpha) p_B(t, \mathbf{x}, \xi - 2(\xi \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}) \quad \text{on } I \times \Gamma \times D_{\xi+} \quad (25)$$

$$p_i(t_f, \mathbf{x}, \xi) = 0 \quad \text{in } \Omega_i \times D_\xi \quad (26)$$

ここで、 $V_0$  および  $V_i$  は温度に対応する随伴変数であり、次式より求まる。

$$V_0 = 1 + \frac{\int_{D_\xi} A_B p_B d\mathbf{k}}{\int_{D_\xi} A_B \hbar\omega d\mathbf{k}} \quad \text{in } I \times \Omega_0 \quad (27)$$

$$V_i = \frac{\int_{D_\xi} A_i p_i d\mathbf{k}}{\int_{D_\xi} A_i \hbar\omega d\mathbf{k}} \quad \text{in } I \times \Omega_i \setminus \Omega_0 \quad (28)$$

ここで、 $A_i$  は以下のように定義した。

$$A_i = \frac{D_0 \hbar\omega}{k_B \tau T_i^2} \exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T_i}\right) \left( \exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T_i}\right) - 1 \right)^{-2} \quad (29)$$

付録にて、随伴場の詳細な導出を行った。

形状感度は、次式のようにラグランジアン  $\mathcal{L}$  を領域  $\Omega$  について微分することで得られる。

$$\begin{aligned} J'(\Omega)(\theta) &= \frac{dJ(\Omega)(\theta)}{d\Omega} = \frac{d\mathcal{L}(\mathbf{Q}, \mathbf{W}, \Omega)(\theta)}{d\Omega} \\ &= \frac{\partial \mathcal{L}(\mathbf{Q}, \mathbf{W}, \Omega)(\theta)}{\partial \Omega} + \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}(\mathbf{Q}, \mathbf{W}, \Omega)(\theta)}{\partial \mathbf{Q}_i} \frac{\partial \mathbf{Q}_i}{\partial \Omega} \\ &\quad + \sum_j \frac{\partial \mathcal{L}(\mathbf{Q}, \mathbf{W}, \Omega)(\theta)}{\partial \mathbf{W}_j} \frac{\partial \mathbf{W}_j}{\partial \Omega} \end{aligned} \quad (30)$$

最適性の条件より、第二項、第三項を消去できるため、形状感度は次式の通りとなる。

$$J'(\Omega)(\theta) = \frac{\partial \mathcal{L}(\mathbf{Q}, \mathbf{W}, \Omega)(\theta)}{\partial \Omega} \quad (31)$$

式 (15) を用いることで、形状感度が以下のように求まる。

$$\begin{aligned} J'(\Omega)(\theta) &= - \int_I \int_{D_\xi} \int_{\partial\Omega_0 \cap \Gamma} \frac{\hbar\omega}{\tau} \frac{D_0}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T_B}\right) - 1} \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{n} ds d\mathbf{k} dt \\ &\quad - \int_I \int_{D_{\xi+}} \int_{\Gamma} p_A \xi \cdot \nabla (f_A - \alpha f_B - (1 - \alpha) \bar{f}_A) (\boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{n}) ds d\mathbf{k} dt \\ &\quad - \int_I \int_{D_{\xi-}} \int_{\Gamma} p_B \xi \cdot \nabla (f_B - \alpha f_A - (1 - \alpha) \bar{f}_B) (\boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{n}) ds d\mathbf{k} dt \end{aligned} \quad (32)$$

ただし、 $\partial\Omega_0$  は領域  $\Omega_0$  の境界を表わし、右辺第一項は、材料界面  $\Gamma$  と境界  $\partial\Omega_0$  が一致するときのみ値をもつ。

### 3. 数値例

本章では、得られた形状感度の妥当性を数値例を通して検証する。そのために本研究では、解析的に得られた式 (32) と、境界を実際に動かしたときに数値的に得られる目的汎関数の変化量である差分感度との比較を行う。図 2 のような両端を熱浴で囲まれ、 $x = L/2$  において材料界面を有する微視系熱伝導体を考える。このとき、上下については周期境界条件を設ける。エネルギー最小化を考える領域は  $\Omega_0 = \{x; 4L/7 \leq x \leq 5L/7, H/4 \leq y \leq 3H/4\}$  とし、実空間を  $70 \times 20$ 、波数空間を  $30 \times 30$  で離散化する。そして、無次元化のために、ボルツマン定数  $k_B = 1.000$ 、プランク定数  $\hbar = 1.000$  とし、その他のパラメータはそれぞれ、 $k_{\max} = 5.790 \times 10^3$ 、 $\tau_0 = 1.500 \times 10^2$ 、 $D_0 = 3.233$  とする。また、材料界面におけるフォノンの透過率  $\alpha$  を 0.75 とする。なお、本論文では実際の系の長さを  $1\mu\text{m}$ 、 $x$  方向の  $Kn$  を  $10^{-1}$  程度と想定する。

このときの、初期値および境界条件は次式のように設定する。

$$\begin{cases} f_i(0, \mathbf{x}, \xi) = f^0 = \frac{D_0}{\exp(\hbar\omega/k_B T_M) - 1} & \text{in } \Omega_i \times D_\xi \\ T_M = \frac{T_H + T_L}{2} \end{cases} \quad (33)$$

$$\begin{cases} f_A(t, \mathbf{x}, \xi) = \frac{D_0}{\exp(\hbar\omega/k_B T_1) - 1} & \text{on } I \times \Gamma_1 \times D_{\xi+} \\ T_1 = \frac{T_H - T_L}{2} \sin(2\pi y) + \frac{T_H + T_L}{2} \end{cases} \quad (34)$$

$$\begin{cases} f_B(t, \mathbf{x}, \xi) = \frac{D_0}{\exp(\hbar\omega/k_B T_2) - 1} & \text{on } I \times \Gamma_2 \times D_{\xi+} \\ T_2 = -\frac{T_H - T_L}{2} \sin(2\pi y) + \frac{T_H + T_L}{2} \end{cases} \quad (35)$$

ここで、 $T_H = 0.800$  および  $T_L = 0.550$  とする。図 3 にて、平衡状態における温度分布を示す。このときの領域内の温度は実単位系でおよそ 450K 程度である。

ボルツマン方程式である状態場 (式 (4)–(12)) および、随伴場 (式 (20)–(28)) は風上差分を用いた有限差分法で数値計算を行う。ルックアップテーブル法を用いて、非線形性の強いエネルギー保存則 (式 (12)) を数値的に解くことで、温度  $T_i$  を求める。

境界  $\Gamma$  において、得られた解析的な感度と、数値感度を比較したものを図 4 に示す。なお、それぞれの値については、その最大値が 1 になるように正規化を行った。本図より、両者が良く一致しており、得られた形状感度の妥当性が示せた。感度が正の値を持つとき、その点における境界は  $x$  方向について負の方向に動くことを示し、逆に負の値を持つとき、その点の境界は  $x$  方向について正の方向に動くことを意味している。本図より、境界はそれぞれ高温部に近づくことが、エネルギー最小化に繋がることを示している。これは、より高温側に材料界面を設定し、高温部において温度ジャンプを生

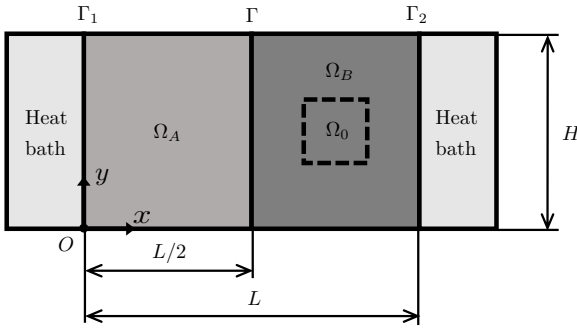


Fig. 2 Design settings for a nanoscale heat conducting structure

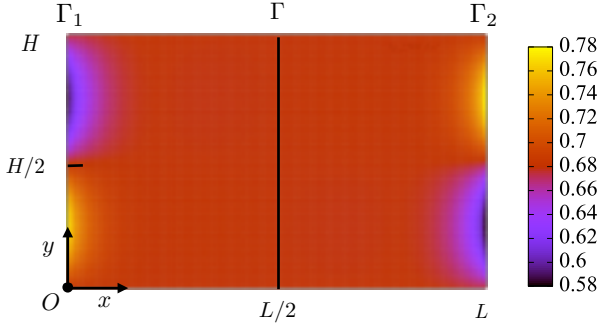


Fig. 3 Temperature distribution

じさせることで、領域  $\Omega_0$  におけるエネルギーを減少させることを意味しており、物理的にも妥当であるといえる。

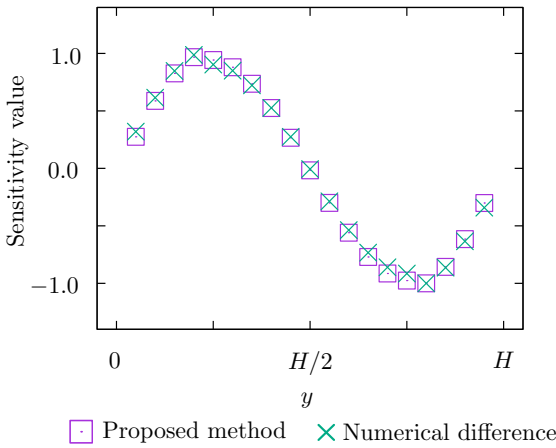


Fig. 4 Comparison between shape sensitivity obtained by our proposed method and numerical differences

#### 4. 結言

本研究では、フォノンによる微視系熱輸送におけるエネルギー最小化問題を対象とした形状感度解析手法を構築した。本手法を用いることで、高性能な冷却性を持ったナノ、サブミクロンサイズの小型電子デバイスの設計が可能になると期待できる。まとめると、以下のとおりである。

- 熱輸送のキャリアであるフォノンの粒子速度に依存す

る目的汎関数を用いて、ボルツマン輸送方程式に基づくエネルギー最小化問題の定式化を行った。

- エネルギー最小化問題に対して、ラグランジュ未定乗数法と随伴変数法に基づき、材料界面での温度不連続性を考慮した形状感度の導出を行った。
- 簡単な例題を通じて、本提案手法で導出した形状感度の妥当性を検証した。求めた形状感度と、差分法より得られた差分感度との比較を行い、両者が一致することを確認した。

#### 5. 付録

本章では、式 (19) に基づく随伴場の導出を行う。はじめに、時間  $t$  について部分積分を行うことで、 $\tilde{f}_i(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})$  に関する停留点は次式ようになる。

$$\begin{aligned}
& \sum_i \left\langle \frac{\partial \mathcal{L}(\tilde{\mathbf{Q}}, \tilde{\mathbf{W}}, \Omega)}{\partial \tilde{f}_i}, \phi_i \right\rangle = 0 \\
& = \sum_i \int_{D_\xi} \int_{\Omega_i} [\tilde{p}_i \phi_i]_0^{t_f} d\mathbf{x} d\mathbf{k} - \sum_i \int_I \int_{D_\xi} \int_{\Omega_i} \frac{\partial \tilde{p}_i}{\partial t} \phi_i d\mathbf{x} d\mathbf{k} dt \\
& - \sum_i \int_I \int_{D_\xi} \int_{\Omega_i} \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla \tilde{p}_i \phi_i d\mathbf{x} d\mathbf{s} dt \\
& + \sum_i \int_I \int_{D_\xi} \int_{\partial \Omega_i} \tilde{p}_i \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{n} \phi_i d\mathbf{s} d\mathbf{k} dt \\
& + \sum_i \int_I \int_{D_\xi} \int_{\Omega_i} \frac{\tilde{p}_i}{\tau} \phi_i d\mathbf{x} d\mathbf{k} dt + \sum_i \int_I \int_{D_\xi} \int_{\Omega_i} \tilde{V}_i \frac{\hbar \omega}{\tau} \phi_i d\mathbf{x} d\mathbf{k} dt \\
& + \int_I \int_{D_{\xi^+}} \int_{\Gamma_1} \tilde{l} \phi_A d\mathbf{s} d\mathbf{k} dt + \int_I \int_{D_{\xi^+}} \int_{\Gamma_2} \tilde{r} \phi_B d\mathbf{s} d\mathbf{k} dt \\
& + \int_I \int_{D_{\xi^+}} \int_{\Gamma} \tilde{h} (\phi_A - \alpha \phi_B - (1 - \alpha) \bar{\phi}_A) d\mathbf{s} d\mathbf{k} dt \\
& + \int_I \int_{D_{\xi^-}} \int_{\Gamma} \tilde{s} (\phi_B - \alpha \phi_A - (1 - \alpha) \bar{\phi}_B) d\mathbf{s} d\mathbf{k} dt \\
& + \sum_i \int_{D_\xi} \int_{\Omega_i} \tilde{\eta}_i \phi_i d\mathbf{x} d\mathbf{k}, \tag{36}
\end{aligned}$$

ここで、 $\bar{\phi}$  は反射項に関する変数であり、次式で定義される。

$$\bar{\phi} = \phi(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi} - 2(\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}) \tag{37}$$

次に、 $\tilde{T}_i$  に関する停留点は次のようになる。

$$\begin{aligned}
& \sum_i \left\langle \frac{\partial \mathcal{L}(\tilde{\mathbf{Q}}, \tilde{\mathbf{W}}, \Omega)}{\partial \tilde{T}_i}, \phi_i \right\rangle = 0 \\
& = \int_I \int_{D_\xi} \int_{\Omega_0} A_B \hbar \omega \phi_B d\mathbf{x} d\mathbf{k} dt + \sum_i \int_I \int_{D_\xi} \int_{\Omega_i} A_i \phi_i d\mathbf{x} d\mathbf{k} dt \\
& + \sum_i \int_I \int_{D_\xi} \int_{\Omega_i} A_i \hbar \omega \tilde{V}_i \phi_i d\mathbf{x} d\mathbf{k} dt \tag{38}
\end{aligned}$$

以上、式 (36) および (38) より、以下の随伴場が求まる。

$$\frac{\partial p_i(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla p_i(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{\tau} (p_i(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) + \hbar \omega V_i) \quad \text{in } I \times \Omega_i \setminus \Omega_0 \times D_\xi \tag{39}$$

$$\frac{\partial p_B(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla p_B(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{\tau} (p_B(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) + \hbar \omega V_0) \quad \text{in } I \times \Omega_0 \times D_\xi \tag{40}$$

$$p_i(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = 0 \quad \text{on } I \times \Gamma_1 \times D_{\xi^-} \tag{41}$$

$$p_i(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = 0 \quad \text{on } I \times \Gamma_2 \times D_{\boldsymbol{\xi}-} \quad (42)$$

$$p_A(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = \alpha p_B(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) + (1 - \alpha) p_A(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi} - 2(\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}) \\ \text{on } I \times \Gamma \times D_{\boldsymbol{\xi}-} \quad (43)$$

$$p_B(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = \alpha p_A(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) + (1 - \alpha) p_B(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi} - 2(\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}) \\ \text{on } I \times \Gamma \times D_{\boldsymbol{\xi}+} \quad (44)$$

$$p_i(t_f, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = 0 \quad \text{in } \Omega_i \times D_{\boldsymbol{\xi}} \quad (45)$$

$$V_0 = 1 + \frac{\int_{D_{\boldsymbol{\xi}}} A_B p_B d\mathbf{k}}{\int_{D_{\boldsymbol{\xi}}} A_B \hbar \omega d\mathbf{k}} \quad \text{in } I \times \Omega_0 \quad (46)$$

$$V_i = \frac{\int_{D_{\boldsymbol{\xi}}} A_i p_i d\mathbf{k}}{\int_{D_{\boldsymbol{\xi}}} A_i \hbar \omega d\mathbf{k}} \quad \text{in } I \times \Omega \setminus \Omega_0 \quad (47)$$

### 参考文献

- (1) Dems K.: Sensitivity analysis in thermal problems – II: structural shape variation, *Journal of Thermal Stresses*, **10**, (1) (1987), pp. 1–16.
- (2) Novotony, A. A., Feijóo, R., Taroco, E. and Padra, C.: Topological sensitivity analysis, *Computer methods in applied mechanics and engineering*, **192**, (7) (2003), pp. 803–829.
- (3) Pantz, O.: Sensibilité de l'équation de la chaleur aux sauts de conductivité, *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences*, **341**, (2005), pp. 333–337.
- (4) Joshi, A. and Majumdar, A.: Transient ballistic and diffusive phonon heat transport in thin films, *Journal of Applied Physics*, **74**(1993), pp. 31–39.
- (5) Tien, C., Majumdar, A. and Gerner, F. M.: *Microscale Energy Transport*, Taylor and Francis, (1998),
- (6) Escobar, R. A., Ghai, S. S., John, M. S. and Amon, C. H.: Multi-length and time scale thermal transport using the lattice Boltzmann method with application to electronics cooling, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **49**, (1) (2006), pp. 97–107.
- (7) Hamin, S., Yamada, T., Faghri, M. and Park, K.: Finite element analysis of transient ballistic-diffusive phonon heat transport in two-dimensional domains, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **80**, (2015), pp. 781–788.
- (8) Furuta, K., Sato, A., Izui, K., Yamada, T., Matsumoto, M. and Nishiwaki, S.: Shape sensitivity for a two-phase heat conduction problem considering nanoscale effects, *Journal of Advanced Mechanical Design, Systems, and Manufacturing* (Submitted),
- (9) Allaire, G. and Jouve, F.: Structural optimization using sensitivity analysis and a level-set method, *Journal of Computational Physics*, **194**, (2004), pp. 363–393.