

# 円筒孔トポロジー導関数と周期多重極法を用いた 電磁メタマテリアルの最適設計法について

## AN OPTIMAL DESIGN METHOD FOR ELECTROMAGNETIC METAMATERIALS USING CYLINDRICAL-HOLE TOPOLOGICAL DERIVATIVES AND PERIODIC FMM

福田 哲史<sup>1)</sup>, 西村直志<sup>2)</sup>

Satoshi FUKUDA and Naoshi NISHIMURA

1) 京都大学情報学研究科 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: s\_fukuda@acs.i.kyoto-u.ac.jp)

2) 京都大学情報学研究科 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: nchml@i.kyoto-u.ac.jp)

In this paper, we present a cylindrical-hole topological derivative in periodic transmission problems for Maxwell's equations. We also propose a topological optimisation scheme for electromagnetic metamaterials using the topological derivative and the level-set method.

**Key Words:** topological optimization, topological derivative, electromagnetic metamaterial, periodic FMM

### 1. 序論

メタマテリアルとは、自然界に存在する物質が通常もたないような電磁気的性質をもつ人工物質である。代表的なものとして、NIM(negative-index materials)と呼ばれる見掛け上負の屈折率をもつメタマテリアルがある。それらのメタマテリアルの設計に向けて、種々の基礎的研究が進められている。またメタマテリアルを用いた応用研究も行われており、クローキング装置、完全レンズなどのさまざまな光学デバイスの設計が考えられている。

メタマテリアルは、人工的に周期的な構造を作ることによって実現できると考えられている。その構造の一つに、誘電体薄膜を金属薄膜で挟み、周期的に孔をあけたフィッシュネット構造がある<sup>(1)</sup>。このような構造の最適設計を考えるには、孔の形状最適化だけでなく、孔の数の最適設計ができるトポロジー最適化<sup>(2)(3)</sup>を用いることが好ましいと考えられる。しかし、例に挙げたフィッシュネット構造に限らず、一般的にメタマテリアルは対象とする波長と比べ十分に小さい周期単位をもつ周期構造から構成されると考えられている。そのため、その実現には数十ナノメートルスケールでの材料加工を行う必要があり、そのような材料加工により得ることのできる構造は2次元的なものに制限されると考えられる。一方従来のトポロジー最適化で考えられてきたトポロジー導関数は球状のトポロジー変化に対するものであり、2次元的な構造に制限されるという実状にそぐわない。そこで、円筒孔状のトポロジー変化によるトポロジー導関数(以下、円筒孔トポロジー

導関数と呼ぶ)を考える。この円筒孔トポロジー導関数を用いて最適化を行うことで、2次元的な構造に制限したうえで、この構造の最適化を行うことができると期待される。

Maxwell方程式に支配される周期トランスミッション問題における円筒孔トポロジー導関数の導出、およびトポロジー最適化については、竹内ら<sup>(4)</sup>がすでに取り上げている。しかしそこでは計算に誤りがあった。本論文ではその誤りを修正し、新たな円筒孔トポロジー導関数の計算方法を提案する。さらに提案した計算方法の妥当性の検証を行ったうえで、トポロジー導関数をレベルセット法<sup>(5)(6)</sup>に適用することで、電磁メタマテリアルのトポロジー最適化を試みる。

本論文の構成は以下の通りである。まず第2節において、Maxwell方程式に支配される周期トランスミッション問題における円筒孔トポロジー導関数の導出を行う。さらに得られた円筒孔トポロジー導関数から透過電場のトポロジー導関数を導く。第3節では、トポロジー最適化に用いるレベルセット法について述べる。第4節では、まず第2節で得られた円筒孔トポロジー導関数の妥当性を数値計算で検証する。次に第3節で述べたレベルセット法を用いて、遠方場係数のトポロジー最適化を試みる。第5節では結論と今後の課題を述べる。

### 2. トポロジー導関数の計算

#### 2.1. トポロジー導関数の定義

領域  $\Omega$  を考え、 $\Omega$  に依存する目的関数を  $J(\Omega)$  とおく。 $\Omega$  内部に、形状パラメータ  $\rho$  をもつ領域  $\Omega_\rho$  のトポロジーの変

化を考える。このときの目的関数の変化率は

$$\check{J}(\Omega \setminus \Omega_\rho) = \lim_{\rho \downarrow 0} \frac{J(\Omega \setminus \Omega_\rho) - J(\Omega)}{c|\rho^\alpha|} \quad (1)$$

で与えられ、 $\check{J}$  をトポロジ-導関数と呼ぶ。ここに  $c$  は適当な定数、 $\alpha$  は、式 (1) 右辺の非自明な極限が存在するように選ぶものとする<sup>(2)</sup>。例えば、目的関数が

$$J = J_0 + \frac{\rho^2}{2} J_2 + \dots \quad (2)$$

を満たすなら  $\alpha = 2$  であり、トポロジ-導関数

$$J_2 = \lim_{\rho \downarrow 0} \left( \frac{1}{\rho} \frac{\partial J}{\partial \rho} \right) \quad (3)$$

は形状導関数の極限として表される。

## 2.2. 問題設定

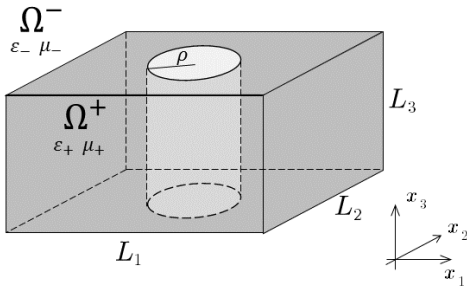


Fig. 1 Unit of periodicity

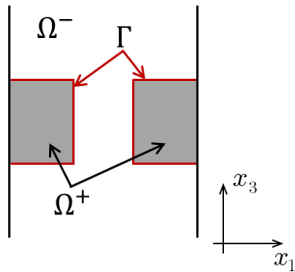


Fig. 2  $x_1x_3$  cross section of the unit cell near the cylindrical hole

以下のトポロジ-導関数の導出で想定する問題を定義する。3次元空間にデカルト座標  $(x_1, x_2, x_3)$  を導入し、 $x_1, x_2$  方向に周期性をもつ板状の物質を考える。 $x_1, x_2$  方向の周期単位長さをそれぞれ  $L_1, L_2$ 、板の厚み方向の長さを  $L_3$  とする。周期単位において、板状の領域を  $\Omega^+, \Omega^-$  の外側を  $\Omega^-$  とする。領域  $\Omega^\pm$  での誘電率、透磁率をそれぞれ  $\epsilon_\pm, \mu_\pm$  とする。板状の領域には半径  $\rho$  の円筒状の孔が開いているものとする。円筒孔の側面および板の上下の面を境界  $\Gamma$  とする (Fig. 1, Fig. 2)。入射波は  $x_3 = -\infty$  から与えられるものとし、周波数を  $\omega$  とすると領域  $\Omega^\pm$  での波数はそれぞれ  $k_\pm = \omega \sqrt{\epsilon_\pm \mu_\pm}$  となる。このような領域で、支配方程式として Maxwell 方程式

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} - k_\pm^2 \mathbf{E} = \mathbf{0} \quad \text{in } \Omega^\pm \quad (4)$$

を考え、 $\Gamma$  上で境界条件として

$$[\mathbf{E} \times \mathbf{n}] = \mathbf{0}, \quad [\mathbf{H} \times \mathbf{n}] = \mathbf{0} \quad (5)$$

が満たされているものとする。ここに、 $\mathbf{E}, \mathbf{H}$  は電場、磁場であり、 $[f] = f^+ - f^-$  は量  $f$  の  $\Gamma$  上でのギャップを、 $f^\pm$  は  $\Omega^\pm$  から  $\Gamma$  への極限を表す。更に、 $x_1, x_2$  方向の周期境界上では、それぞれ位相差  $\beta_1, \beta_2$  の周期境界条件

$$\mathbf{E}(L_1/2, x_2, x_3) = e^{i\beta_1} \mathbf{E}(-L_1/2, x_2, x_3) \quad (6)$$

$$\mathbf{E}(x_1, L_2/2, x_3) = e^{i\beta_2} \mathbf{E}(x_1, -L_2/2, x_3) \quad (7)$$

$$\mathbf{H}(L_1/2, x_2, x_3) = e^{i\beta_1} \mathbf{H}(-L_1/2, x_2, x_3) \quad (8)$$

$$\mathbf{H}(x_1, L_2/2, x_3) = e^{i\beta_2} \mathbf{H}(x_1, -L_2/2, x_3) \quad (9)$$

を課す。加えて遠方場  $x_3 \rightarrow \pm\infty$  での散乱波に対する外向き放射条件が満たされているものとする。

## 2.3. 解の漸近展開

トポロジ-導関数の導出のために、円筒孔内での電場、磁場の、 $\rho \downarrow 0$  での極限值が必要となる。 $x_3 \rightarrow k_3$  の Fourier 変換を行い、Fourier 変換された電場、磁場の  $x_3$  方向成分について matched asymptotic expansion を用い、さらに  $k_3 \rightarrow x_3$  の逆 Fourier 変換をすることで、 $\rho \downarrow 0$  での円筒孔内での電場、磁場の極限值  $\mathbf{E}^-, \mathbf{H}^-$  が以下のように得られる。

$$H_3^- = H_3^\infty \quad E_3^- = E_3^\infty \quad (10)$$

$$H_\alpha^- = \frac{2\mu_+}{\mu_+ + \mu_-} H_\alpha^\infty \quad E_\alpha^- = \frac{2\epsilon_+}{\epsilon_+ + \epsilon_-} E_\alpha^\infty \quad (11)$$

$$\frac{\partial H_3^-}{\partial x_\alpha} = \frac{2\epsilon_-}{\epsilon_+ + \epsilon_-} \frac{\partial H_3^\infty}{\partial x_\alpha} + \frac{2(\mu_+ \epsilon_+ - \mu_- \epsilon_-)}{(\mu_+ + \mu_-)(\epsilon_+ + \epsilon_-)} \frac{\partial H_\alpha^\infty}{\partial x_3} \quad (12)$$

$$\frac{\partial E_3^-}{\partial x_\alpha} = \frac{2\mu_-}{\mu_+ + \mu_-} \frac{\partial E_3^\infty}{\partial x_\alpha} + \frac{2(\mu_+ \epsilon_+ - \mu_- \epsilon_-)}{(\mu_+ + \mu_-)(\epsilon_+ + \epsilon_-)} \frac{\partial E_\alpha^\infty}{\partial x_3} \quad (13)$$

ここに  $E^\infty, H^\infty$  は円筒孔がない状態での電場、磁場である。添字  $\alpha$  は 1 または 2 の値を取るものとする。

## 2.4. トポロジ-導関数の導出

次に電場、磁場のトポロジ-導関数の支配方程式を導出する。以降の計算で、添字  $i, j, k$  は 1, 2, 3 の値を取り、添字  $\alpha, \beta$  は 1 または 2 の値を取るものとする。また総和規約を用いる。 $\varphi, \psi$  を非常に滑らかかつ有界な台を持つテスト関数とする。Maxwell 方程式より

$$0 = \int_{\Omega^+ \cup \Omega^-} (\varphi \cdot (\nabla \times \mathbf{H} + i\omega\epsilon_\pm \mathbf{E}) + \psi \cdot (\nabla \times \mathbf{E} - i\omega\mu_\pm \mathbf{H})) dV \quad (14)$$

が成り立つ。いま、円筒の半径  $\rho$  が変化する場合を考え、 $\mathbf{E}, \mathbf{H}$  の  $\rho$  に関する微分を  $\dot{\mathbf{E}}, \dot{\mathbf{H}}$  で表す。このとき領域  $\Omega^\pm$  それぞれで Reynolds の輸送定理を用い、整理することで

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega^+ \cup \Omega^-} \left( (-e_{ijk} \varphi_{i,j} \dot{H}_k + i\omega\epsilon_\pm \varphi_i \dot{E}_i) + (-e_{ijk} \psi_{i,j} \dot{E}_k - i\omega\mu_\pm \psi_j \dot{H}_i) \right) dV \\ &= \int_{\Gamma_1} (\dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{n}) \left( \left[ \frac{1}{\mu} \right] \frac{\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \varphi) \mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{E})}{i\omega} + i\omega[\epsilon] (\mathbf{E} \cdot \varphi - (\mathbf{E} \cdot \mathbf{n})(\varphi \cdot \mathbf{n})) \right. \\ & \quad \left. - \left[ \frac{1}{\epsilon} \right] \frac{\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \psi) \mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{H})}{i\omega} - i\omega[\mu] (\mathbf{H} \cdot \psi - (\mathbf{H} \cdot \mathbf{n})(\psi \cdot \mathbf{n})) \right) dS \end{aligned} \quad (15)$$

を得る。ここに  $\Gamma_1$  は円筒孔の側面を表す。  $e_{ijk}$  は交代記号である。ここで式 (3) より

$$\check{H} = \lim_{\rho \downarrow 0} \frac{1}{\rho} \dot{H}, \quad \check{E} = \lim_{\rho \downarrow 0} \frac{1}{\rho} \dot{E} \quad (16)$$

が成り立ち、式 (15) の両辺  $\frac{1}{\rho} \lim_{\rho \downarrow 0}$  の極限をとると、

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega^+ \cup \Omega^-} \left( (-e_{ijk} \varphi_{i,j} \check{H}_k + i\omega \varepsilon_{\pm} \varphi_i \check{E}_i) + (-e_{ijk} \psi_{i,j} \check{E}_k - i\omega \mu_{\pm} \psi_j \check{H}_i) \right) dV \\ &= \pi \int_{x_3} \left( \left[ \frac{1}{\mu} \right] \frac{(\nabla \times \varphi)_{\alpha} (\nabla \times \mathbf{E})_{\alpha}}{i\omega} + i\omega [\varepsilon] (2E_i \varphi_i - E_{\alpha} \varphi_{\alpha}) \right. \\ & \quad \left. - \left[ \frac{1}{\varepsilon} \right] \frac{(\nabla \times \psi)_{\alpha} (\nabla \times \mathbf{H})_{\alpha}}{i\omega} - i\omega [\mu] (2H_i \psi_i - H_{\alpha} \psi_{\alpha}) \right) dx_3 \quad (17) \end{aligned}$$

を得る。この式に、式 (10), (11) を用い、整理することで、電場、磁場のトポロジ導関数は超関数の意味で次の式を満たすことがわかる。

$$\begin{aligned} & \langle \nabla \times \check{H} + i\omega \varepsilon_+ \check{E}, \varphi \rangle + \langle \nabla \times \check{E} - i\omega \mu_+ \check{H}, \psi \rangle \\ &= -2\pi \int_{x_3} \left( \frac{\mu_+ - \mu_-}{\mu_+ + \mu_-} H_{\alpha}^{\infty} ((\nabla \times \varphi)_{\alpha} + i\omega \mu_+ \psi_{\alpha}) + i\omega (\mu_+ - \mu_-) H_3^{\infty} \varphi_3 \right. \\ & \quad \left. + \frac{\varepsilon_+ - \varepsilon_-}{\varepsilon_+ + \varepsilon_-} E_{\alpha}^{\infty} ((\nabla \times \psi)_{\alpha} - i\omega \varepsilon_+ \varphi_{\alpha}) - i\omega (\varepsilon_+ - \varepsilon_-) E_3^{\infty} \varphi_3 \right) dx_3 \quad (18) \end{aligned}$$

## 2.5. 遠方場係数のトポロジ導関数

前節で導出したトポロジ導関数を用いて、遠方場係数のトポロジ導関数を求める。

透過側の遠方場での電場が  $E \approx E^0 e^{iK \cdot x}$  で表されるとしたとき、電場の係数ベクトルに対して次の式が成り立つ。

$$E^0 \cdot F^0 = \frac{\omega \mu_-}{2L_1 L_2 (e_3 \cdot K)} \int_{S_f} (\mathbf{H} \cdot (\mathbf{n} \times \mathbf{F}) - (\mathbf{n} \times \mathbf{E}) \cdot \mathbf{G}) dS \quad (19)$$

ここに、 $S_f$  は十分大きい  $X > 0$  に対して  $x_3 = X$  と周期単位の交わりの面、 $e_3$  は  $x_3$  方向の単位ベクトル、 $K$  は  $\Omega^-$  における  $x_3 = -\infty$  からの入射波の波数ベクトルであり、 $K_{\alpha} = k_{-} \beta_{\alpha}$  を満たす。また  $E^0$  は  $E^0 \cdot K = 0$  を満たす。さらに、 $F, G$  はそれぞれ、 $x_3 = \infty$  から入射波を与え、位相差  $-\beta_1, -\beta_2$  の周期境界条件を満たす随伴問題の電場、磁場の解である。 $F^0$  は  $x_3 = \infty$  の遠方場での入射電場を  $F \approx F^0 e^{-iK \cdot x}$  とおいたときに現れる係数であり、 $F^0 \cdot K = 0$  を満たす。式 (19) と同様にして回折波の振幅を求めることも可能であるが、本論文では回折波を扱わないことにする。これは本論文では、メタマテリアルへの応用を想定しており、問題とする周期単位の大きさは入射波の波長に比べて同程度ないしは小さいものと仮定しているためである。このような条件下では、遠方場での電磁波の回折は起こらない。

$\Omega^-$  でトポロジの変化があると想定し、式 (19) と式 (18) を用いると、次の式を得る。

$$\begin{aligned} \check{E}^0 \cdot F^0 &= \frac{i\omega^2 \mu_- \pi}{L_1 L_2 (e_3 \cdot K)} \int_{x_3} \left( (\mu_+ - \mu_-) \left( \frac{2\mu_+}{\mu_+ + \mu_-} H_{\alpha}^{\infty} G_{\alpha} + H_3^{\infty} G_3 \right) \right. \\ & \quad \left. - (\varepsilon_+ - \varepsilon_-) \left( \frac{2\varepsilon_+}{\varepsilon_+ + \varepsilon_-} E_{\alpha}^{\infty} F_{\alpha} + E_3^{\infty} F_3 \right) \right) dx_3 \quad (20) \end{aligned}$$

$F^0$  として、 $K$  に直交する 2 つの基底をとり、それぞれに対して  $\check{E}^0 \cdot F^0$  を計算することにより、 $\check{E}^0$  を求めることができ

る。反射側の遠方場での電場の係数 (反射係数) についても、随伴問題を適切に設定することで式 (20) と同じ形になる。

また、 $\Omega^-$  での電場係数のトポロジ導関数、つまり  $\Omega^+$  の孔の内部に高さ  $L_3$  の微小円筒散乱体が発生するトポロジ変化のトポロジ導関数は式 (20) の誘電率、透磁率の添字を入れ替えた次のものとなる。

$$\begin{aligned} \hat{E}^0 \cdot F^0 &= \frac{i\omega^2 \mu_- \pi}{L_1 L_2 (e_3 \cdot K)} \int_{x_3} \left( (\mu_- - \mu_+) \left( \frac{2\mu_-}{\mu_- + \mu_+} H_{\alpha}^{\infty} G_{\alpha} + H_3^{\infty} G_3 \right) \right. \\ & \quad \left. - (\varepsilon_- - \varepsilon_+) \left( \frac{2\varepsilon_-}{\varepsilon_- + \varepsilon_+} E_{\alpha}^{\infty} F_{\alpha} + E_3^{\infty} F_3 \right) \right) dx_3 \quad (21) \end{aligned}$$

ここに  $\hat{E}$  は  $\Omega^-$  での電場係数のトポロジ導関数を表す。ただし式 (20) での  $\check{E}$  で想定しているトポロジの変化と区別するため記号を変えている。また、積分にかかる係数  $\frac{i\omega^2 \mu_- \pi}{L_1 L_2 (e_3 \cdot K)}$  の  $\mu_-$  については、遠方場の材質に依存するものであり、式 (20) と式 (21) で同じ添字 (-) であることに注意する。

## 3. トポロジ最適化

本論文では、トポロジ最適化の手法としてレベルセット法を用いた。この節ではレベルセット法の概略を述べる。

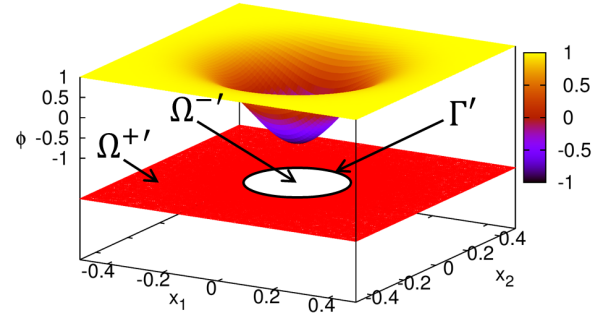


Fig. 3 Level-set function  $\phi$  and material distribution

レベルセット法では、レベルセット関数  $\phi$  を導入し、その正負で材質の分布を表す。さらに仮想的な時間を導入し、レベルセット関数の時間発展方程式 (熱方程式) を解くことで、材質の最適な分布を求める。本論文では、問題を  $x_1 x_2$  平面に投影したときの材質分布を決定するためにレベルセット法を用いる。そこで、レベルセット関数を次のように定義する (Fig. 3 参照)。

$$\begin{cases} 0 < \phi(\mathbf{x}, t) \leq 1 & \text{if } \mathbf{x} \in \Omega^{+'} \\ \phi(\mathbf{x}, t) = 0 & \text{if } \mathbf{x} \in \Gamma' \\ -1 \leq \phi(\mathbf{x}, t) < 0 & \text{if } \mathbf{x} \in \Omega^{-'} \end{cases} \quad (22)$$

ここに  $\Omega^{+'}, \Omega^{-'}, \Gamma'$  はそれぞれ問題を  $x_1 x_2$  平面に投影したときの  $\Omega^+, \Omega^-, \Gamma$  を表し、 $t$  は仮想的な時間を表す。

このように定義したレベルセット関数に対し、次の時間発展方程式を解くことでトポロジ最適化をおこなう<sup>(7)</sup>。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t}(\mathbf{x}, t) = \pm \check{J}(\mathbf{x}, t) + \lambda(\mathbf{x}, t) + \tau \Delta \phi(\mathbf{x}, t). \quad (23)$$

ここに  $\tilde{J}(x, t)$  は、目的関数を  $J$  としたときの、目的関数のトポロジー微分を表す。  $\pm\tilde{J}(x, t)$  の符号は、例えば透過係数の最大化においては以下のようにとる。

$$\pm\tilde{J}(x, t) = \begin{cases} -|\tilde{E}^0| & \text{if } x \in \Omega^+ \\ |\tilde{E}^0| & \text{if } x \in \Omega^- \end{cases} \quad (24)$$

$\lambda(x, t)$  の項は、制約条件から導かれる制約項である。今回の計算においては制約条件として、問題を  $x_1 - x_2$  平面に投影したときの空洞断面積  $S(t)$  に上限  $S_{\max}$  を設けており、  $\lambda(x, t)$  を次のように定義した。

$$\lambda(x, t) = \begin{cases} 0 & \text{if } S(t) \leq S_{\max} \\ \max\left\{1, \frac{S(t) - S_{\max}}{S_{\max}}\right\} & \text{if } S(t) > S_{\max} \end{cases} \quad (25)$$

$\tau\Delta\phi(x, t)$  の項は、  $\phi$  の急峻な変化に起因する不自然な構造が現れないようにするための正則化項であり、  $\tau$  は正則化パラメータと呼ばれる正の定数である。また、本論文では、問題を  $x_1x_2$  平面に投影したときの周期境界での材質は常に  $\Omega^+$  であるとし、周期境界上では常に  $\phi(x, t) = 1$  とする。この条件により  $\Omega^-$  の平行移動の自由度を消すことができる。

#### 4. 数値計算結果

本論文ではトポロジー導関数の計算に必要な電場、磁場の計算には周期多重極積分方程式法 (pFMM-BIEM<sup>(8)</sup>) を用いた。また、式 (20), (21) に含まれるトポロジー導関数の数値積分にはガウス求積を、レベルセット関数の時間発展方程式の計算には差分法を用いた。以下の計算では、周期方向の長さ  $L_1, L_2$  は無次元化し 1 とする。この周期単位長さが実問題における 500[nm] に対応すると仮定する。  $\Omega^-$  での誘電率、透磁率は  $\epsilon_- = 1.0, \mu_- = 1.0$  とする。

##### 4.1. トポロジー導関数の妥当性

まず、得られたトポロジー導関数 (20) の妥当性を検証する。妥当性の検証には次の近似式を用いる。

$$\tilde{E}^0(x) = \lim_{\rho \downarrow 0} \frac{1}{\rho} \frac{dE^0(x)}{d\rho} \approx 2 \left( \frac{E^0(x, \rho) - E^0(x, 0)}{\rho^2} \right) \quad (26)$$

上式において、左辺の値の妥当性を、右辺の近似計算から検証する。ここに、  $\tilde{E}^0(x)$  は位置  $x = (x_1, x_2)$  で計算される遠方場での電場係数のトポロジー導関数、  $E^0(x, \rho)$  は位置  $x = (x_1, x_2)$  に半径  $\rho$  の微小円筒孔があいた問題での遠方場の電場係数、  $E^0(x, 0)$  は微小円筒孔があいていない問題での遠方場の電場係数である。つまり、実際に微小円筒孔をあけてトポロジーを変化させた問題の解から、トポロジー導関数を近似する。

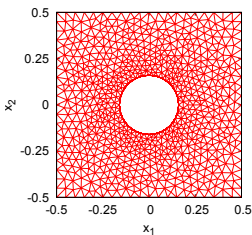


Fig. 4 Shape A

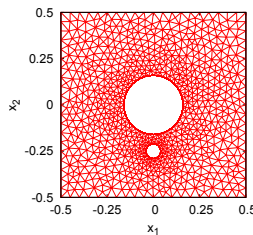


Fig. 5 Shape B

具体的な問題設定は以下のようなものである。形状 A を厚さ  $L_3 = 0.8$ 、原点中心の半径が 0.16 の円筒孔があいている形状、形状 B を厚さ  $L_3 = 0.8$ 、原点中心の半径が 0.16 の円筒孔および中心  $(0, x_2)$  の半径が  $\rho$  の微小円筒孔があいている形状とする。  $\tilde{E}^0(x), E^0(x, 0)$  を形状 A、  $E^0(x, \rho)$  を形状 B から計算するものとする。 Fig. 4 に形状 A の  $x_1 - x_2$  平面への投影図、 Fig. 5 に中心  $(0, -0.25)$ 、半径  $\rho = 0.04$  の微小円筒孔をあけたときの形状 B の  $x_1 - x_2$  平面への投影図を示す。入射波は、周波数  $\omega = 5.39377$ 、電場が入射面に対し  $45^\circ$  の角度をもった直線偏光の平面波とし、入射角を  $33^\circ$  とする。  $\Omega^+$  での誘電率、透磁率は  $\epsilon_+ = -8.11267 + 1.66054i, \mu_+ = 1.0$  とする。この誘電率は入射波の波長が 582[nm] であるときの金の誘電率を想定しており、Johnson-Christy の表<sup>(9)</sup> に従い決定した。以降の計算においても、金の誘電率はこの表から決定するものとする。

以上の条件で、式 (26) の左辺の絶対値と、右辺の絶対値の相対誤差を Fig. 6 に示す。ここで微小円筒孔の半径は  $\rho = 0.04, 0.03, 0.02$  の 3 つの場合を考え、中心座標は  $x_2 = -0.45 \sim 0.45$  の範囲で 0.025 刻みに設定した。ただし原点中心の円筒孔と微小円筒孔が重なる  $x_2 = -0.2 \sim 0.2$  での計算は行わない。 Fig. 6 より微小円筒孔の半径を小さくしていく

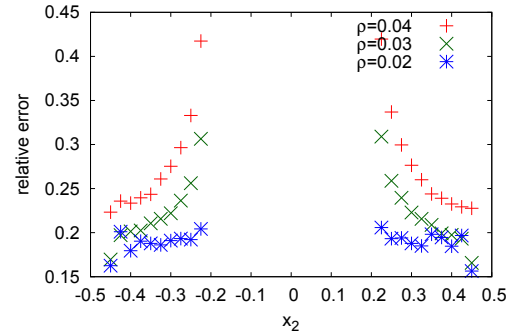


Fig. 6 Relative error of the topological derivative and its finite difference approximation

ことで、導出されたトポロジー導関数とトポロジー導関数の近似値の相対誤差が小さくなることが確認できる。形状 B の微小円筒孔の半径をより小さくすると、相対誤差が更に小さくなることが期待される。しかし、半径がより小さくなると、ごく微小な円筒孔の影響を正確に計算することが難しくなり、式 (26) 右辺の近似式を正確に計算できなくなる。そのため、今回の検証においては、半径を小さくするとき、相対誤差が減少する傾向を確かめることで、得られたトポロジー導関数の計算は妥当であると判断した。

##### 4.2. トポロジー最適化

トポロジー最適化の数値計算結果を示す。本論文では、最適化問題の一例として透過係数を最大化する最適化を行った。つまり、入射波の振幅を 1 とした上で、目的関数を  $J = |E^0|$  とし、  $J$  の最大化を行った。特に、入射波の波長を 1088[nm], 548[nm] とした 2 つの場合の計算結果を示す。以下の計算で、

式 (23) の計算では,  $x_1x_2$  平面を  $(21 \times 21)$  点の格子点で離散化した差分法を用いた. また, 周期多重極法において使用するメッシュは, 向かい合う周期境界で同一の節点配置を用いることを要するが, 本論文では, 考える問題の波長を考慮して, 周期境界上に等間隔に 21~28 点の節点を設け, これらを固定することで周期多重極法の要請を満たした. さらに  $S_{\max} = 0.25$  とする. 入射波は, 垂直入射の, 電場が振幅 1 で  $x_1$  方向に振動する直線偏光の平面波とする. 形状の厚さを  $L_3 = 0.08$  とする.

#### 4.2.1. 透過係数最大化問題 (入射波の波長:1088[nm])

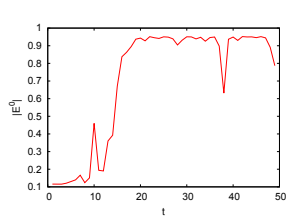


Fig. 7 Variation of the objective function

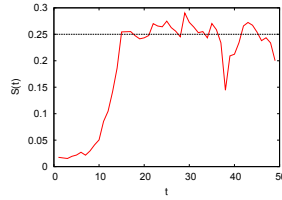


Fig. 8 Variation of the area of holes and its constraint(0.25)

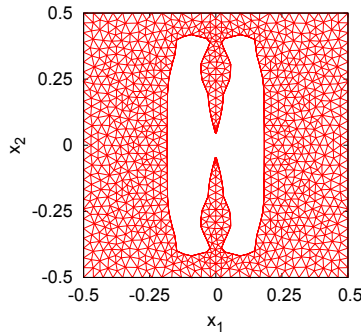


Fig. 9 Optimal shape (t=47)

入射波の波長を 1088[nm] としたときの計算結果を示す. このとき, 周波数は  $\omega = 2.88681$ ,  $\Omega^+$  での誘電率, 透磁率は  $\epsilon_+ = -51.0496 + 3.861i$ ,  $\mu_+ = 1.0$  となる. また  $\tau = 0.015$  とし, 問題の対称性を用いレベルセット関数の更新を行う. Fig. 7 はレベルセット法における仮想的な時間ステップ  $t$  を横軸としたときの目的関数の値の変化, Fig. 8 は時間ステップ  $t$  を横軸としたときの,  $x_1x_2$  平面上の孔の面積の変化を表す. Fig. 9 は面積制約を満たしたうえで, 目的関数の値が最も大きくなった 47 ステップでの孔の形状を表す. このときの目的関数の値は 0.944429, 孔の面積は 0.243478 となった. Fig. 7, Fig. 8 から, 最適化ステップを進めることで目的関数の値が概ね増大していくことが確認できる. 20 ステップ以降では, 面積制約を満たすよう形状がわずかに変化していくが, 目的関数の値はおおむね大きい値を維持している.

得られた最適形状が妥当かどうかを確認するために, 円筒状の孔をあけた形状 C, 角柱状の孔をあけた形状 D, 形状

E, 形状 F での目的関数の値を計算した. 形状 C, 形状 D, 形状 E, 形状 F をそれぞれ  $x_1x_2$  平面に投影したときの形状を Fig. 10~Fig. 13 に示す. 投影したときの孔の面積は形状 C, 形状 D, 形状 E, 形状 F すべてで 0.25 となるようにした. また, 最適化で得られた形状と比べ, 形状 D では孔の  $x_1$  方向長さが同じとなるようにし, 形状 E では孔の  $x_2$  方向長さが同じとなるようにした. 形状 F は形状 E の孔の  $x_1$  方向,  $x_2$  方向の長さを反転させたものである. それぞれの形状での目的関数の値を Table 1 に記す. Table 1 より, 最適形状での目的関数の値が最も大きいことがわかる. よって, 得られた最適形状は妥当であると考えられる.

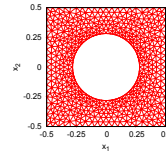


Fig. 10 Shape C

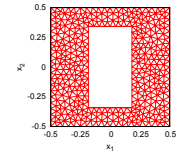


Fig. 11 Shape D

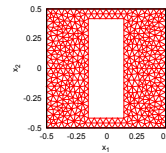


Fig. 12 Shape E

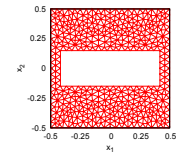


Fig. 13 Shape F

Table 1 Comparison of the values of objective function for optimal and other holes

| 形状   | 目的関数の値   |
|------|----------|
| 最適形状 | 0.944429 |
| 形状 C | 0.431535 |
| 形状 D | 0.836654 |
| 形状 E | 0.911306 |
| 形状 F | 0.264601 |

#### 4.2.2. 透過係数最大化問題 (入射波の波長:548[nm])

入射波の波長を 548[nm] としたときの計算結果を示す. このとき, 周波数は  $\omega = 5.72297$ ,  $\Omega^+$  での誘電率, 透磁率は  $\epsilon_+ = -5.84213 + 2.1113i$ ,  $\mu_+ = 1.0$  となる. また  $\tau = 0.03$  とし, 問題の対称性を用いレベルセット関数の更新を行う. Fig. 14 は目的関数の値の変化, Fig. 15 は孔の面積の変化を表す. Fig. 16 は面積制約を満たしたうえで, 目的関数の値が最も大きくなった 37 ステップでの孔の形状を示す. このときの目的関数の値は 0.639312, 孔の面積は 0.236426 となった. Fig. 14, Fig. 15 から, 面積制約が満たされたまま, 35 ステップ前後から目的関数が収束していることが確認できる.

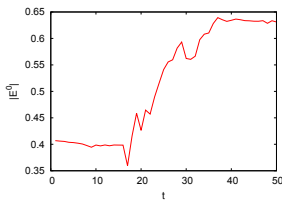


Fig. 14 Variation of the objective function

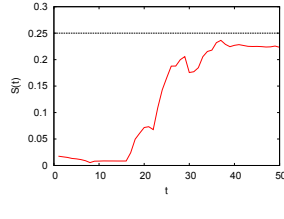


Fig. 15 Variation of the area of holes vs its constraint(0.25)

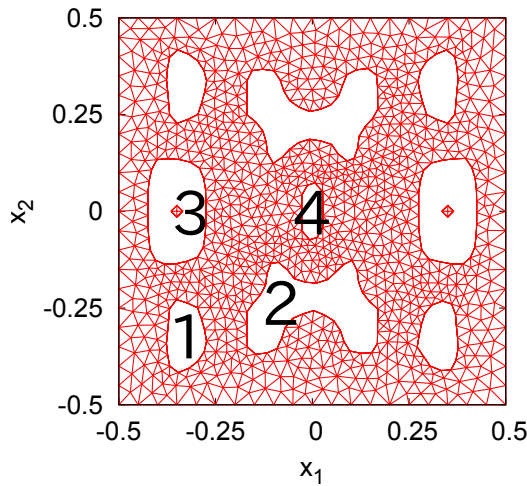


Fig. 16 Optimal shape (t=37)

次に、得られた最適形状が妥当かどうかを確認する。Fig. 16のように最適形状における孔に番号を付け、形状  $G_i$  ( $i = 1 \sim 4$ ) をそれぞれ最適形状で番号  $i$  の孔があいていない形状とする。形状  $G_i$  と、前項で用いた形状  $C$  について、目的関数の値を計算した結果が Table 2 である。Table 2 より、最適形状での目的関数の値が最も大きいことがわかる。このことより、最適形状はこの最適化問題の解として妥当であると考えられる。

Table 2 Comparison of values of the objective function

| 形状       | 目的関数の値   |
|----------|----------|
| 最適形状     | 0.639312 |
| 形状 $C$   | 0.463607 |
| 形状 $G_1$ | 0.618552 |
| 形状 $G_2$ | 0.564682 |
| 形状 $G_3$ | 0.531704 |
| 形状 $G_4$ | 0.631235 |

## 5. 結論

本論文では、Maxwell 方程式に支配される周期トランスミッション問題における、円筒孔トポロジー導関数を導出した。ま

た、その妥当性を数値計算により確認した。さらに、得られたトポロジー導関数をレベルセット法に用いることで、透過係数を最大化する構造の決定ができた。

今後の課題としては、現時点では直感に訴えて定式化しているレベルセット法に基づくトポロジー最適化の理論的補強や、解析精度を考慮したメッシュ作成法の改良等を挙げることができる。また、本論文では主に基礎的な問題を取り上げたが、今後の展望としては、得られたトポロジー導関数の計算法を、例えば横起電力<sup>(10)</sup>最大化問題などに適用し、様々な特性を持ったメタマテリアルの設計に応用することを検討している。

本研究は JSPS 科研費 15H03604 の助成を受けている。

## 参考文献

- (1) M. Kafesaki, I. Tsiapa, N. Katsarakis, Th. Koschny, C. M. Soukoulis, and E. N. Economou, Left-handed metamaterials: The fishnet structure and its variations, *Physical Review B*, vol. 75, 235114, 2007.
- (2) J. Sokolowski, and A. Żochowski, On the topological derivative in shape optimization, *SIAM J Control Optim*, vol. 37, No. 4, 1251–1272, 1999.
- (3) Lin He, Chiu-Yen Kao, and Stanlet Osher, Incorporating topological derivatives into shape derivatives based level set methods, *Journal of Computational Physics*, vol. 225, 891–909, 2007.
- (4) 竹内真樹, 新納和樹, 西村直志, 電磁メタマテリアルのトポロジー最適化に関する基礎的研究, 計算工学講演会論文集, vol. 20, 6, 2015.
- (5) 志知晋一郎, 山田崇恭, 松本敏郎, 高橋徹, レベルセット法に基づく境界要素法を用いた定常動弾性問題のトポロジー最適化, 計算数理工学論文集, vol. 12, 1-6, 2012.
- (6) 飯盛浩司, レベルセット法に基づくトポロジー最適化の波動問題への展開, 計算数理工学レビュー, No. 2014-1, 43-57, 2014.
- (7) 山田崇恭, 西脇真二, 泉井一浩, 吉村允孝, 竹澤晃弘, レベルセット法による形状表現を用いたフェーズフィールド法の考え方に基づくトポロジー最適化, 日本機械学会論文集 (A 編), vol. 75, No.753, 550-558, 2009.
- (8) Y. Otani and N. Nishimura, An FMM for orthotropic periodic boundary value problems for Maxwell's equations, *Waves in Random and Complex Media*, vol. 19, No. 1, 80–104, 2009.
- (9) P. B. Johnson and R. W. Christy, Optical Constants of Noble Metals, *Physical Review B*, vol. 6, No. 12, 4370–4379, 1972.
- (10) 吉見拓也, 新納和樹, 西村直志, 石原照也, 周期多重極境界要素法を用いたナノポラスゴールドの光起電力解析, 計算数理工学論文集, vol. 15, 85–90, 2015.