計算数理工学論文集 Vol. 21 (2021 年 12 月)，論文 No. 13-211218 JASCOME

二次元電磁波動散乱問題の複素固有値を対象とするNyström境界積分方程式法を用いたパラメトリック形状最適化

A PARAMETRIC SHAPE OPTIMIZATION USING THE NYSTRÖM-BOUNDARY INTEGRAL EQUATION METHOD FOR COMPLEX EIGENVALUES OF ELECTROMAGNETIC SCATTERING PROBLEMS IN 2D

三澤　亮太 1)，髙橋　勇二朗 2)，馬　哲旺 3)，大平　昌敬 4)

Ryota MISAWA, Yujiro TAKAHASHI, Zhewang MA and Masataka OHIRA

1) 埼玉大学大学院理工学研究科 (〒 338-8570 埼玉県さいたま市桜区下大久保 255, E-mail: misawa@mail.saitama-u.ac.jp)
2) 埼玉大学工学部 * (〒 338-8570 埼玉県さいたま市桜区下大久保 255)
3) 埼玉大学大学院理工学研究科 (〒 338-8570 埼玉県さいたま市桜区下大久保 255, E-mail: maz@mail.saitama-u.ac.jp)
4) 埼玉大学大学院理工学研究科 (〒 338-8570 埼玉県さいたま市桜区下大久保 255, E-mail: mohira@mail.saitama-u.ac.jp)

Complex eigenvalues in open space (scattering eigenvalues) are of great interest because they are expected to be a helpful index for designing electromagnetic devices, thus optimization of complex eigenvalues is an important problem. In this paper, we propose a simple shape optimization method for complex eigenvalues for two dimensional electromagnetic scattering problems. Specifically, we reduce the shape optimization problem to a parametric optimization problem with the help of boundary integral equation discretized with a high-order Nyström method. The reduced parametric optimization problem is solved with a gradient method and the CMA-ES. We show some numerical examples to show the effectiveness and performances of the method.

Key Words: Scattering eigenvalues, Shape optimization, Sakurai-Sugiura method, Boundary integral equation, Nyström method

1. 序論

電磁波動散乱問題の複素固有値は通信素子設計の有効な指標となることが期待され，それを対象とした最適設計は重要な課題である．そこで，本研究では二次元電磁波動散乱問題の固有値を対象とした形状最適設計を考える．

散乱問題の固有モードは遠方で指数的に増大するため，その数値計算は必ずしも容易ではない．固有値計算において一般的に用いられている有限要素法では，この遠方で増大する固有モードを陽に取り扱う難しさが生じる．一方で，境界積分方程式法を用いた解法では，必要となる計算は散乱体の境界のみで閉じ，遠方で指数的に増大する固有モードを陽に計算する必要がないため，比較的容易に固有値計算を行うことができる．また，PML などの放射条件を近似する人工的な条件を導入する必要がない利点も有する．境界積分方程式を用いた固有値計算には非線形固有値の計算が必要となるが，これは櫻井杉浦法 (以下，SSM)(1) により容易に解くことが可能である．

そこで，本論文では電磁波動散乱問題の固有値を対象とした素子設計の基礎的検討として，二次元 Helmholtz 方程式の外部 Dirichlet 問題の複素固有値を対象とした， Nyström 法によって離散化された境界積分方程式とパラメトリックな形状表現に基づく，パラメトリック形状最適化を提案する．具体的には，形状を Fourier 級数で表現し，その Fourier 係数を設計変数とした最適化を行う．最適化問題の解法の一つとして，本論文では勾配法を考える．ただし，上記の形状表現では，自己交差や曲率が無限大となる点が最適化の途中で現れることで，計算精度を著しく低下させたり，無意味な形状を得るなどのおそれがある．これらの望ましくない形状を抑制するための幾何的特性 (例えば最大曲率や形状の幅) の勾配を導出することは困難である．そこで，本論文では最適化問題の解法として勾配法に加え，勾配が不要な共分散行列適応進化戦略 (Covariance matrix adaptation-evolution strategy,

*現所属：エクシオグループ株式会社
2021 年 10 月 15 日受付，2021 年 11 月 12 日受理

以下 CMA-ES)[2, 3] をともに考える．

境界積分方程式法を用いた複素固有値の最適化に関する先行研究として，以下のような研究が存在する．松島ら [4, 5] は開空間における散乱問題の複素固有値を対象とした，境界積分方程式法を用いたレベルセットトポロジー最適化法を提案している．先行研究で行われたトポロジー最適化と比すると本論文の方法の自由度は低く，また境界をパラメトリックに表現しているため，適用範囲や得られる最適形状に制約は課されるものの，一方で本論文の方法の定式化と実装は極めて容易である．また，メッシュ生成が不要であり，高精度数値積分公式を用いることによって，少ない未知数で問題を解くことができる利点を有する．また，Kleefeld らの研究 [6, 7] は境界積分方程式と周回積分型固有値解法を用いたパラメトリックな形状表現に基づく固有値の最適化を行っているという点で本研究と一致しているが，彼らは内部問題や内部 transmission 問題を対象とし，それらの固有値を最大化や最小化するような形状を求めることを目的とした研究を行っている．一方で，本論文は散乱問題の，特に共振器のような構造の複素固有値の制御を目的としており，対象とする問題が異なっている．また，彼らは陰的形状表現に基づきメッシュを生成し，最適化には Nelder-Mead 法を用いている．一方で，本論文では勾配を容易に計算するために陽的形状表現と Nyström 法を利用し，勾配法と CMA-ES を用いた最適化を行っている点が異なる．Fourier 級数を用いたパラメトライズは素朴な方法であり新しくは無いが，散乱問題の複素固有値を対象とし本論文と同一の方法で共振器型の形状の形状最適化を行った例は著者らの知る限りなく，本論文の数値計算結果が提供する知見は有用であると考えられる．

本論文の構成は以下の通りである．第 2 節では，境界値問題および取り扱う最適化問題の定式化を行う．第 3 節では，形状最適化の手法と複素固有値の勾配の導出について説明する．第 4 節では，数値計算例を示し提案方法の有用性を示す．第 5 節では，本研究で得られた成果と今後の課題をまとめる．

2. 問題の定式化

2.1. 二次元 Helmholtz 方程式の外部 Dirichlet 境界値問題

本論文では時間方向に $e^{-j\omega t}$ (ここに ω は角周波数，$j=\sqrt{-1}$) で依存する二次元の時間域 Maxwell 方程式により導かれる二次元 Helmholtz 方程式の境界値問題を考える．本論文で考える境界値問題の定式化を以下に示す．領域 $\Omega\subset\mathbb{R}^2$ を有界な散乱体とし，その境界を $\partial\Omega$, 補領域を $\Omega^C:=\mathbb{R}^2\backslash(\Omega\cup\partial\Omega)$ とし，Ω^C 中に入射波 u^{inc} があるとする．

二次元 Helmholtz 方程式の外部 Dirichlet 境界値問題は

$$\left(\nabla^2+k^2\right)u(\boldsymbol{X})=0 \text{ in } \Omega^C \tag{1}$$

$$u(\boldsymbol{X})=0 \text{ on } \partial\Omega \tag{2}$$

かつ，十分大きい $R>0$ に対して散乱波が以下の級数で表されるという放射条件を満たす u を求める問題である．

$$u(\boldsymbol{X})-u^{\mathrm{inc}}(\boldsymbol{X})=\sum_{n=-\infty}^{\infty}a_nH_n^{(1)}(k|\boldsymbol{X}|)e^{in\theta},\ \text{for } |\boldsymbol{X}|>R \tag{3}$$

ただし，k は波数であり，角周波数 ω を用いて $k=\omega\sqrt{\epsilon\mu}$, $\epsilon>0$, $\mu>0$ とする．ここに，ϵ,μ はそれぞれ誘電率，透磁率を表す．本研究では真空を想定し，さらに光速を 1 とする無次元化を行い $\epsilon=1$, $\mu=1$ とする．また，$\partial/\partial n$ は法線微分 (法線ベクトル $\boldsymbol{n}$ は Ω の外向きを正とする) であり，以下では $q:=\partial u/\partial n$ とする．また，式 (3) において $H_n^{(1)}$ は第一種 n 次の Hankel 関数，$a_n\in\mathbb{C}$ は定数係数，θ は $\boldsymbol{X}$ の偏角である．以上の境界値問題の固有値は入射波が $u^{\mathrm{inc}}\equiv 0$ である斉次問題が非自明解 $u\neq 0$ を持つような $\omega\in\mathbb{C}$ と定義され，$u\neq 0$ は対応する固有関数となる．このような ω は負の虚部を持つ複素数となり，固有関数 u は遠方で指数的に増大する．

2.2. 境界積分方程式

本論文では，境界値問題 (1)-(3) およびその固有値問題は，以下の Burton-Miller 型の境界積分方程式 [8] を用いて解く．

$$\left(\left(S+\frac{\alpha}{2}I+\alpha D^T\right)q\right)(\boldsymbol{X})=u^{\mathrm{inc}}(\boldsymbol{X})+\alpha\frac{\partial u^{\mathrm{inc}}(\boldsymbol{X})}{\partial n} \tag{4}$$

ここに，α, I はそれぞれ定数，恒等作用素であり，S, D^T は二次元 Helmholtz 方程式の基本解 $G(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}')=(j/4)H_0^{(1)}(k|\boldsymbol{X}-\boldsymbol{X}'|)$ を用いて以下のように表される積分作用素である．

$$\left(Sq\right)(\boldsymbol{X}):=\int_{\partial\Omega}G(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}')q(\boldsymbol{X}')\,ds_{X'} \tag{5}$$

$$\left(D^Tq\right)(\boldsymbol{X}):=\int_{\partial\Omega}\frac{\partial G(\boldsymbol{X},\boldsymbol{X}')}{\partial n_X}q(\boldsymbol{X}')\,ds_{X'} \tag{6}$$

本論文では，境界 $\partial\Omega$ は角度方向の媒介変数表示 $\boldsymbol{\xi}:\theta\in[0,2\pi]\to\boldsymbol{X}\in\mathbb{R}^2$ で表せる滑らかな閉曲線とする．すなわち，境界 $\partial\Omega$ は $\partial\Omega=\left\{(x,y)\in\mathbb{R}^2|(x,y)=\boldsymbol{\xi}(\theta),\ \theta\in[0,2\pi]\right\}$ とかける．式 (5),(6) は，$\boldsymbol{X}=\boldsymbol{\xi}(\tau)$ とし，積分点 $\boldsymbol{X}'=\boldsymbol{\xi}(\theta)$ とし，変数変換するとそれぞれ以下のようになる．

$$\left(Sq\right)(\tau)=\int_0^{2\pi}G(\boldsymbol{\xi}(\tau),\boldsymbol{\xi}(\theta))J(\theta)q(\theta)\,d\theta \tag{7}$$

$$\left(D^Tq\right)(\tau)=\int_0^{2\pi}\frac{\partial G(\boldsymbol{\xi}(\tau),\boldsymbol{\xi}(\theta))}{\partial n_X}J(\theta)q(\theta)\,d\theta \tag{8}$$

ここに，$J(\theta)$ は Jacobian，α は定数係数であり本論文では $\alpha=0$ または $\alpha=-j/k$ と選ぶ．

本論文では，式 (4) で $u^{\mathrm{inc}}\equiv 0$ とした斉次境界積分方程式が非自明解を持つような ω を求め，固有値を求める．このようにして得られた固有値は必ずしも元の境界値問題の固有値とは限らず「見かけの固有値」[9] であるおそれがあるが，係数 α を $\alpha=-j/k$ と選ぶことにより実軸の近くに固有値が現れることが防げ [10]，また見かけの固有値の虚部は正となるので，負の虚部を持つ境界値問題の固有値と容易に区別できる [11]．

2.3. Nyström 法による境界積分方程式の離散化

本論文では，式 (4) を Hao らの論文 [12] の 4 節の，Alpert の数値積分公式 [13] を用いる Nyström 法により離散化する．

この定式化は以下のようになる．作用素 S, D^T を θ に関する積分で表した式 (7) および式 (8) の積分範囲 $[0, 2\pi]$ を等間隔に N 分割した点 θ_j : $2\pi j/N\,(j = 1, 2, \cdots, N)$ を積分点とし，固有関数 q の各積分点上の値を並べたベクトルを

$$\boldsymbol{q} := (q(\theta_1), q(\theta_2), \cdots, q(\theta_N))^T$$

とし，これが未知ベクトルとなる．このとき，作用素 S, D^T は以下のように数値積分で近似される．

$$(Sq)(\theta_i) \approx \sum_{j=1}^{N} w_j G(\boldsymbol{\xi}(\theta_i), \boldsymbol{\xi}(\theta_j)) J(\theta_j) q(\theta_j) =: \sum_{j=1}^{N} \hat{S}_{ij} q(\theta_j) \tag{9}$$

$$(D^T q)(\theta_i) \approx \sum_{j=1}^{N} w_j \frac{\partial G(\boldsymbol{\xi}(\theta_i), \boldsymbol{\xi}(\theta_j))}{\partial n_X} J(\theta_j) q(\theta_j) =: \sum_{j=1}^{N} \hat{D}^T_{ij} q(\theta_j) \tag{10}$$

ただし，右辺の $\hat{S}_{ij}, \hat{D}^T_{ij}$ はそれぞれ積分作用素 S および D^T の離散化係数行列 $\hat{S}, \hat{D}^T$ の (i, j) 成分，w_j は Alpert の数値積分公式 (本論文では 16 次のものを利用する) を用いる Hao らの Nyström 法によって与えられる重み係数である (ただし，対角項付近は積分点以外の関数値も利用され厳密にはこの形のみでは書けない)．以降，本論文では特に断りが無い限り作用素に$\hat{}$をつけたものはその作用素の Nyström 法による離散化係数行列を表すものとする．

2.4. 最適化問題の定式化

本論文で考える最適化問題の定式化を示す．境界 $\partial\Omega$ の媒介変数表示の x, y 成分が Fourier 級数を用いて以下のように表せるとする．

$$x(\theta) = \sum_{i=0}^{N_F} a_i \cos i\theta,\ y(\theta) = \sum_{i=1}^{N_F} b_i \sin i\theta \tag{11}$$

ここに，N_F は Fourier 級数の最大次数である．すなわち，境界 $\partial\Omega$ は式 (11) のパラメータ

$$\boldsymbol{p} = (a_0, \cdots, a_{N_F}, b_1, \cdots, b_{N_F})$$

により形状が決定される．本論文では，波を捉える窪みを持つ共振器型の構造 (例えば付録 A に示す形状) を想定し x 方向には (原点について) 非対称，y 方向には対称な形状として上記のような sine/cosine の Fourier 級数表現とした．このとき，Ω の面積 A は

$$A = \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega} \boldsymbol{X} \cdot \boldsymbol{n}\, ds_X, \tag{12}$$

(ここに $\boldsymbol{X} = (x, y)$)，および境界 $\partial\Omega$ の最大曲率 (Mcur とする) は以下で与えられる．

$$\mathrm{Mcur} := \max_{\theta} \frac{|x'(\theta)y''(\theta) - x''(\theta)y'(\theta)|}{(x'(\theta)^2 + y'(\theta)^2)^{3/2}} \tag{13}$$

ここに $'$ は θ に関する微分を表す．なお，0 次項 a_0 は位置を変更するだけで形状には寄与しないため，全空間中の単一散乱体を考えている限りは無視してよいが，導波路問題や散乱体が複数ある問題では考慮する必要がある．本論文では，初期形状における特定の固有値 ω を与えられた目標値 ω_0 へ近づける最適化問題を考え，目的関数 $f(\boldsymbol{p})$ を ω と ω_0 の距離 $f(\boldsymbol{p}) := |\omega(\boldsymbol{p}) - \omega_0|$ とする以下の最小化問題を考える．

$$\inf_{\boldsymbol{p}} |\omega(\boldsymbol{p}) - \omega_0| \tag{14}$$

3. CMA-ES、勾配法を用いた形状最適化

3.1. 最適化問題の数値解法

本論文では，最適化問題 (14) を数値的に解き最適な形状パラメータ $\boldsymbol{p}$ を求め，最適形状を決定する．ただし，式 (11) による形状表現では必ずしも閉曲線が得られるとは限らず，自己交差するような構造や，またそうでなくとも曲率が非常に大きな点を持つ形状が得られる可能性がある．最適化を勾配法を用いて行う場合，最適化の過程においてこのような望ましくない形状の出現を抑制するために自己交差などの幾何的条件をパラメータ $\boldsymbol{p}$ を用いて解析的に表しさらにその微分を求め，制約条件として加える必要がある．しかしながら，そのような条件と形状パラメータ $\boldsymbol{p}$ の関係およびその微分を求めることは必ずしも容易ではない．そこで，本論文では幾何的制約を取り入れるために，勾配が不要である CMA-ES[2, 3] の利用を考える．CMA-ES は実関数の最小化問題における確率論的方法の一つであり，構造最適化にも多数利用されている (例えば [14])．CMA-ES は目的関数の勾配が不要であるという利点を持ち，また局所最適解に陥りにくいと期待される．詳細は原著 [2, 3] を参照されたい．一方で勾配法は，確率論的方法と異なり一般に目的関数値を各ステップで減少させることができるので，[14] で触れられているように上述の CMA-ES の解を初期値として勾配法による最適化を行うことで解を洗練させられると考えられる．そこで，本論文では CMA-ES と勾配法の二通りによる最適化を考える．

3.2. 形状感度の導出

勾配法で必要となる固有値の形状感度 ($= \nabla_p \omega$) を導出する．ここでは，Kao ら [15] の論文で体積積分方程式の密度関数に関する摂動から導出しているのと同様に，$\alpha = 0$ とした式 (4) の直接微分に基づき導出する．いま，ω は形状パラメータ $\boldsymbol{p}$ で与えられる境界の非重複な固有値とする．形状パラメータ $\boldsymbol{p}$ の成分のうちの一つを代表して p とする．また，境界上において定義される関数の $\mathcal{L}^2$ 内積の記号を以下のように導入する．

$$f \cdot g := \int_{\partial\Omega} \overline{f(x)} g(x)\, ds_x$$

いま，形状パラメータ p が Δp 変化し，固有値 ω および固有関数 q がそれぞれ $\Delta\omega$, Δq 変化したときの境界積分方程式 $S(\omega, p)q = 0$ の摂動を考えると以下のようになる：

$$S(\omega, p)q = 0 \ \longrightarrow S(\omega + \Delta\omega, p + \Delta p)(q + \Delta q) = 0$$

変化量の 2 次以上の項を無視すると

$$\left(S(\omega,p)+\frac{\partial S}{\partial\omega}\Delta\omega+\frac{\partial S}{\partial p}\Delta p\right)(q+\Delta q)=0$$
$$\Rightarrow S\frac{\Delta q}{\Delta p}+\frac{\Delta\omega}{\Delta p}\frac{\partial S}{\partial\omega}q+\frac{\partial S}{\partial p}q=0$$

任意の ϕ に対して $q^*\cdot(S\phi)=0$ を満たす境界上定義される関数 q^* と上式の $\mathcal{L}^2$ 内積をとり，$\Delta p\to 0$ とすると $\partial\omega/\partial p$ は以下のように求まる．

$$\frac{\partial\omega}{\partial p}=-\frac{q^*\cdot\dfrac{\partial S}{\partial p}q}{q^*\cdot\dfrac{\partial S}{\partial\omega}q} \tag{15}$$

なお，境界積分方程式 (4) で $\alpha=0$ とした場合は $q^*=\overline{q}$(q の複素共役) となり，q^* は計算する必要はない．また，固有値計算においては見かけの固有値を避けるために Burton-Miller の式 (4) を用いるが，上記の感度計算においては得られた固有値の中から真のもののみを選択すればよいので $\alpha=0$ とした式を考えれば十分である．

式 (15) 中の作用素 $\partial S/\partial p$ は式 (7) を直接微分して以下のように計算できる (数学的正当化は例えば [16] を参照)

$$\frac{\partial S}{\partial p}q=\int_0^{2\pi}\left\{-\nabla_{X'}G(\boldsymbol{\xi}(\tau),\boldsymbol{\xi}(\theta))\cdot\left(\frac{\partial\boldsymbol{\xi}(\tau)}{\partial p}-\frac{\partial\boldsymbol{\xi}(\theta)}{\partial p}\right)J(\theta)+G(\boldsymbol{\xi}(\tau),\boldsymbol{\xi}(\theta))\frac{\partial J(\theta)}{\partial p}\right\}q(\theta)\,d\theta \tag{16}$$

同様に，作用素 $\partial S/\partial\omega$ は以下のように与えられる．

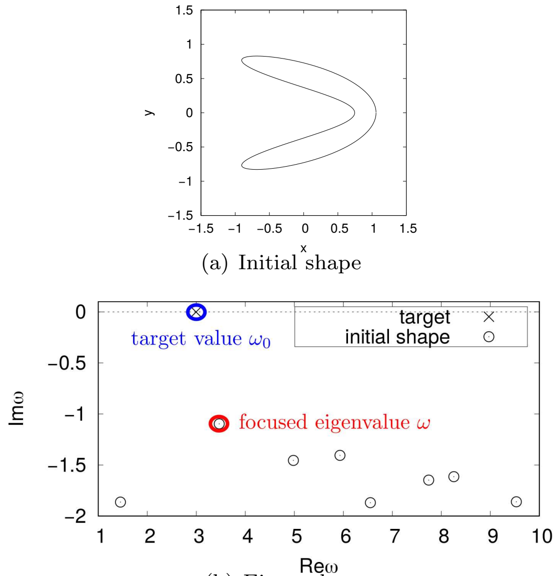
$$\frac{\partial S}{\partial\omega}q=\int_0^{2\pi}\frac{\partial G(\boldsymbol{\xi}(\tau),\boldsymbol{\xi}(\theta))}{\partial\omega}J(\theta)q(\theta)\,d\theta$$

本論文における勾配法では，以上のように直接微分法で求めた固有値の感度を用いて最適解の候補を更新する．一般に，直接微分法による感度計算では式 (16) の計算をすべての設計変数 p に対して行うため，計算コストが高くなり不利となるおそれがある．ただし，式 (16) の形からわかるように，設計変数に依存するベクトルに乗じられる核関数はどの設計変数による微分を考えているかに依らず，共通の係数行列と設計変数個のベクトルとの積になる．したがって，本論文では実装には至らなかったが高速直接解法により効率よく計算ができると期待される．さらに，本論文で利用する Nyström 法は他の離散化方法よりも比較的少ない離散化要素数 (積分点数 N) で十分に精度良く計算が可能であると期待されるため，計算コストは大きな問題とならないと考えられる．

以上の最適化法により最適化問題を解く．実装についていくつか付記する．本論文では CMA-ES の実装として libcmaes[17] を用いる．また，勾配法としてはリスタート付 Nesterov の加速最急降下法 [18, 19] を用い，各最適化ステップにおけるステップサイズは Armijo の基準 [20] を用いて直線探索で決定する．

4. 数値計算例

具体的な問題設定として，Fig. 1 (a) の持つ固有値 $\omega=3.4677-j1.0967$ に注目し，これを目標値 $\omega_0=2.9956-j1.1876\times10^{-3}$ へ近づける問題 (14) を考える．Fig. 1 (a) の固有値分布 [1] と，目標値 ω_0 の複素平面上での関係を Fig. 1 (b) に示した．Fig. 1 (b) 中で，注目する固有値 ω と目標値 ω_0 はそれぞれ “focused eigenvalue” および “target value” として記してある．なお，本節でこのような問題設定を行った理由については付録 A を参照されたい．以下の計算では Fourier



(a) Initial shape

(b) Eigenvalues

Fig. 1　(a): Initial shape. (b): Eigenvalues of the initial shape and the target value ω_0.

級数 (11) の最大の次数は $N_F=5$，境界積分方程式の離散化積分点数 N(式 (9)-(10) の N) を $N=500$，また SSM の閉路は前ステップで得られた固有値 (初回は初期固有値) を中心とする半径 0.1 の円とした．このとき SSM で固有値を探すための閉曲線は小さいため，SSM の周回積分の積分点数は 8 点とする台形公式で計算した．また，最適化の終了条件は目的関数が一定値以下になる場合 (勾配法では目的関数値が 10^{-6} 以下，CMA-ES では個体数に関係なく $|\omega-\omega_0|$ が閾値 10^{-6} 以下になる設計変数の組が一つでも見つかる場合) または，目的関数の計算回数が一定回数 (勾配法は各ステップの直線探索が終了した時点で 2000 回，CMA-ES では個体数に関係なく 4000 回) を超えた場合とした．なお，付録 B に示すように上述の閾値 $=10^{-6}$ までの収束は上述の計算条件における Nyström 法の精度から必ずしも保証はされないが，初期形状から期待される精度を基準として，今回はこのように設定した．詳細は付録 B を参照されたい．また，目的関数の計算のために必要な固有値は SSM により計算され，そのため複素平面上の複数点個の積分点を波数とする境界積分方程式を解くことを要するため，目的関数の計算コストが高く占める．そこで，ここでは解の更新 (ステップ) 回数ではなく目的関数の評価回数に注目している．すなわち，直線探索でステップサイズを決定するまでや，CMA-ES の各世代の全ての個体の目的関数値を求めるのに必要な目的関数の評価回数を考える．以下では，最適化のステップと区別して，目的関

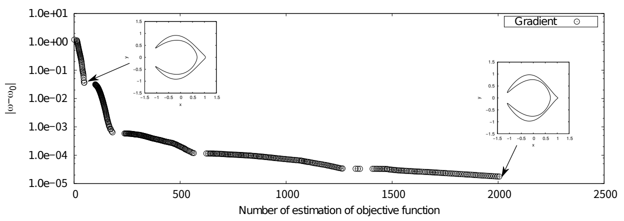
数の計算を行うことを「試行 (try)」と呼ぶことにする．

計算には京都大学大型計算機システムB(CPU: Intel Xeon Broadwell(2.1GHz)) を使用し，目的関数の計算を行うプログラムはFortran90 により作成し，SSM による固有値計算はMPI 並列化し 8 プロセス並列で実行した．また，CMA-ES の諸パラメータはステップサイズ以外は推奨値を利用した．以下の計算時間は最長で約 2 時間 20 分程度であった．ただし，今回の数値計算のために実装したコードは効率的なコードとは程遠く改良の余地は十分にある．

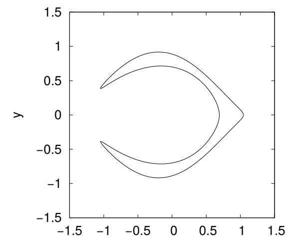
4.1. 勾配法による形状最適化

勾配法 (リスタート付 Nesterov 加速最急降下法) により無制約問題 (14) を解いたときの収束履歴を Fig. 2 (a) に示す．Fig. 2 (a) より，目的関数値は最終的に $\mathrm{O}(10^{-5})$ まで減少しており，勾配法による最適化が成功していることがわかる．また，収束履歴ははじめの数十回の試行で急激に目的関数値が減少しその後は緩やかな減少となっているが，目的関数の急減少が終了する点 (試行 48 回の点) の形状 (Fig.2 (b)) と，最終形状 (試行 2005 回の点) の形状 (Fig.2 (c)) は似ており，早い段階で局所最適解に近い解が得られていると考えられる．Fig.2 (c) の固有値分布を Fig.3に示す[2](丸印)．Fig.3より，確かに目標値 (target) 近くに固有値が得られていることがわかる．

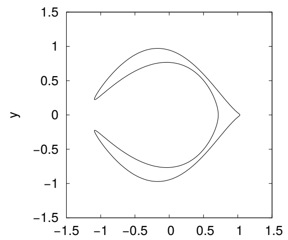
ただし，得られた形状には式 (13) で与えられる最大曲率が 200 を超えるような曲率が大きい部分 ($x = \pm 1$ 付近) が認められる．そこで，このような部分を避けるための幾何的制約を加えた CMA-ES による最適化を考える．



(a) Convergence history



(b) 48 tries



(c) Final

Fig. 2　Optimization result obtained by the gradient method (no-constraint problem). (a): Convergence history (b): Shape at 48 tries. (c)Final shape.

[1,2] Fig. 1 (b) および Fig. 3の計算も SSM で求めたが，これらは円周ではなく複数の長方形経路を用いて実行し，また長方形経路の各辺上の数値積分は Gauss の数値積分公式を用いた．

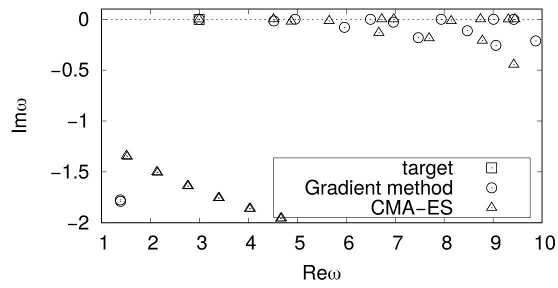


Fig. 3　Eigenvalues for Fig.2 (c) and Fig.4 (d).

4.2. CMA-ES による形状最適化

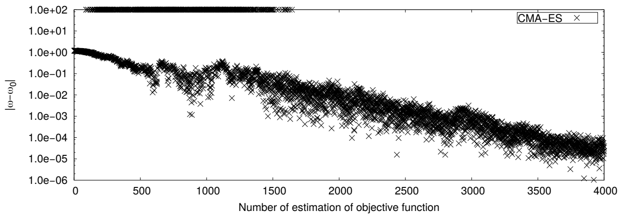
前小節と同様の最適化問題を CMA-ES により解く．ただし，ここでは Fig. 2 (b),(c) に見られた曲率が大きい部分が出現することを抑制するために，最大曲率をペナルティ項として加え，目的関数を以下のように設定した．

$$f(\boldsymbol{p}) = |\omega - \omega_0| + \beta \mathrm{Mcur}(\boldsymbol{p})$$

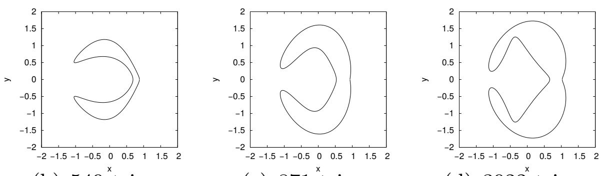
ただし，Mcur, β はそれぞれ式 (13) で与えられるその形状の最大曲率，および最大曲率にかかる係数であり，$\beta = 10^{-4}$ とした．また，自己交差をする形状が生成されることを防ぐために以下のような処理を追加した．形状の周長を l とし，ある積分点 i, j 間の周に沿った距離を $l_{i,j}$ としたとき，$0.1l < l_{i,j}$ となるような積分点における最小距離 $d_{i,j}$ が一定値以下 (本論文では $d_{i,j} \leq 0.05$ とした) となったとき，自己交差が起こっているか，形状の幅が小さすぎると判定し，その形状における目的関数値は固有値の値に関わらず $f(\boldsymbol{p}) = 100$ および $|\omega - \omega_0| = 100$ とした．さらに，最大曲率 $\mathrm{Mcur} > 100$ の場合と SSM の経路を含む一辺 0.2 の正方形内に固有値が得られなかった場合も同様に固有値の値に関わらず $f(\boldsymbol{p}) = 100$ および $|\omega - \omega_0| = 100$ とした．なお，以上に示したパラメータは経験的に定めた．以上の目的関数の設定により，数値計算が破綻，もしくは精度が著しく悪化する自己交差や曲率が非常に大きな点を持つ形状の出現を抑制できることが期待される．上記の問題を CMA-ES により解いたときの $|\omega - \omega_0|$ の収束履歴を Fig.4 (a)，$|\omega - \omega_0|$ の値が初めて 10^{-1} を切った形状，初めて 10^{-2} を切った形状および最も小さくなったときの形状 (それぞれ 549， 871 および 3922 試行) を Fig.4 (b),(c),(d) にそれぞれ示した．なお，Fig.4 (a) において値が 100 となっているのは固有値が出現しなかった場合や上記の幾何制約を満たさなかった場合である．Fig.4 (a) より $|\omega - \omega_0|$ は 10^{-6} 程度まで減少しており最適化に成功していることがわかる．また，得られた形状は勾配法の場合と比べ，曲率が大きい部分が少なく，加えた幾何的制約が有効に働いていることがわかる．Fig.4 (d) の固有値分布を Fig.3に示した (三角印)．Fig.3より，確かに目標値 (target) 近くに固有値が得られていることがわかる．

なお勾配法 (Fig. 2) および CMA-ES(Fig. 4) の実行に要した計算時間は，勾配法は約 1 時間 17 分，CMA-ES は約 2 時間 17 分であった．単純な比較は難しいが，試行回数は勾配

法が約 2005 回，CMA-ES は 4000 回であるので，勾配法の方が感度計算 (15) の実行のために多少時間を要していると考えられる．そのため，次数 N_F や積分点数 N が増えると，感度計算への高速解法の導入が重要になると考えられる．



(a) Convergence history



(b) 549 tries (c) 871 tries (d) 3922 tries

Fig. 4 Optimization result obtained by the CMA-ES (with penalty for large curvature and narrow width). (a): Convergence history, (b),(c),(d): Shape at 549, 871 and 3922 tries, respectively.

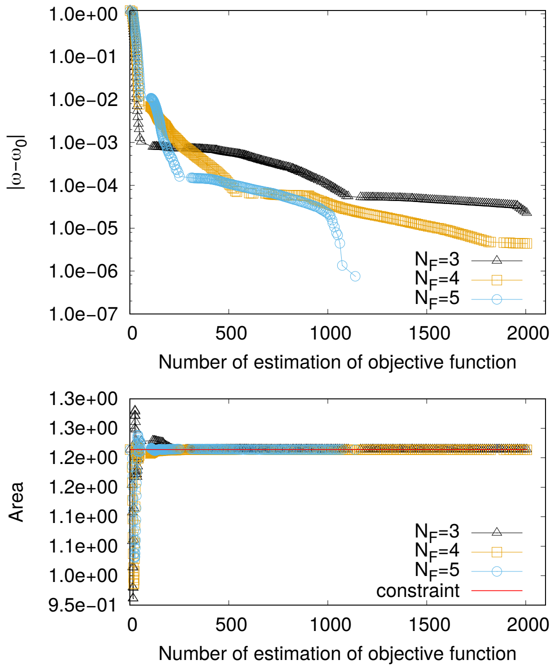
4.3. 面積制約付問題

次に，面積制約を加えた問題を解いた結果を示す．ここでは初期形状 (Fig. 1 (a)) の面積 $A_0 = 1.2138$ を保つような制約条件を考え，Lagrange の未定定数法により以下の目的関数の最小化問題を解く．

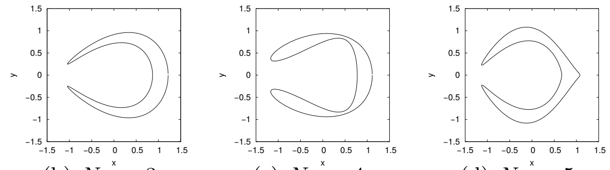
$$f(\boldsymbol{p}) = |\omega - \omega_0| + \lambda(A - A_0)^2$$

ここに，A は式 (12) で与えられる面積，また λ は Lagrange 乗数である．本論文では，各ステップにおける λ は Otomori らの論文 [21] の式 (32) と同様に指数関数を用いて与えた．以上の面積制約付問題を勾配法で解いた結果を Fig. 5に示す．Fig. 5 (a) に Fourier 級数 (11) の最大次数を $N_F = 3, 4, 5$ とした場合の $|\omega - \omega_0|$ の収束履歴 (上) と，面積 A の履歴 (下) を示している．Fig. 5 (a) より，どの次数においても最初の数十回の試行で目的関数値は急減少できており，また制約条件はいずれの場合も概ね満たされていることがわかる．各次数を比較すると，最適化初期の目的関数値の減少は N_F が小さいほうがやや速いが，全体の収束速度は N_F が大きい方が速い傾向にある．また，面積制約値からのオーバーシュートは $N_F = 5$ の場合が小さい．それぞれの次数の最終形状を Fig. 5 (b),(c),(d) に示した．

同様に，CMA-ES を用いて面積制約付問題を解いた結果を Fig.6に示した ((a) 上図 : $|\omega - \omega_0|$, (a) 下図 : 面積,(b),(c),(d): それぞれ $N_F = 3, 4, 5$ の最も $|\omega - \omega_0|$ が小さくなったときの形状)．なお，前小節と同様に面積制約に加え，幾何的制約も加えている．Fig.6 (a) より，いずれの次数も目的関数を減少させ，制約条件も概ね満たされていることがわかる．また，



(a) Convergence history



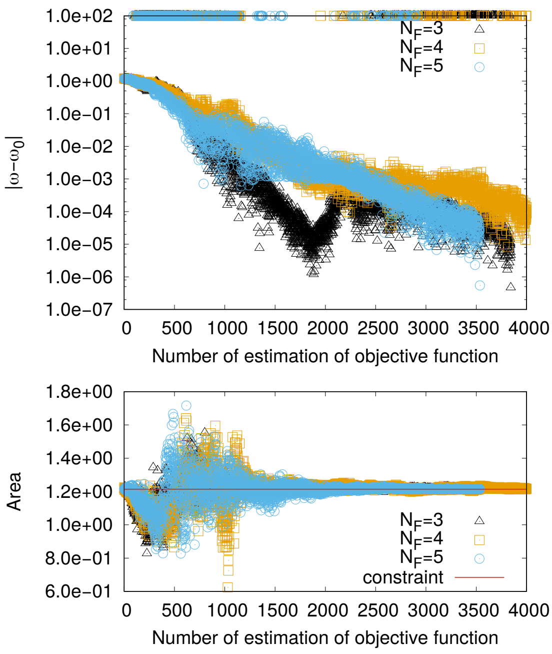
(b) $N_F = 3$ (c) $N_F = 4$ (d) $N_F = 5$

Fig. 5 Optimization result obtained by the gradient method (area constraint) (a): Convergence history (upper:$|\omega - \omega_0|$, lower:area), (b), (c), (d): Final shape for $N_F = 3, 4, 5$, respectively.

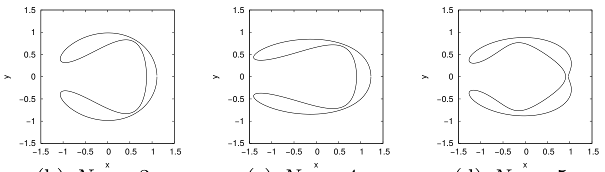
最適形状は勾配法の結果よりも丸みをおびており，最大曲率に対するペナルティが効果的に働いたと考えられる．最適化初期の収束の速さは $N_F = 3$ が最も速く，$N_F = 4, 5$ は同程度の速度である．

4.4. 勾配法と CMA-ES を組み合わせた形状最適化

前小節までの結果より，勾配法と CMA-ES を併用する場合は，幾何的制約を加えた少ない N_F での最適化を CMA-ES で実行したうえで，N_F を大きくした勾配法を実行すると効率的に最適化を行えると考えられる．そこで，本小節では勾配法と CMA-ES を併用した結果を示す．ここでは，Fig. 6に示した $N_F = 3$ の場合の 640，721 および 921 試行の形状 (それぞれ，$|\omega - \omega_0|$ の値が初めて $10^{-1}, 10^{-2}$ および 10^{-3} を下回る点である) よりリスタートし，$N_F = 5$ とした勾配法による最適化を行った．収束履歴 Fig.7 (a)(上 : $|\omega - \omega_0|$, 下 : 面積) より，いずれからリスタートしても，勾配法による最適化初期での目的関数値は CMA-ES の傾きに比すると急激に減少している．また，面積が制約値に近づくまでの試行回数は CMA-ES よりも速いことがわかる．Fig.7 (b),(c),(d) にそれぞれリスタート=640, 721, 921 の場合の，リスタート開始時の形状 (左)，$|\omega - \omega_0|$ の急激な減少直後の形状 (真中),



(a) Convergence history



(b) $N_F = 3$ (c) $N_F = 4$ (d) $N_F = 5$

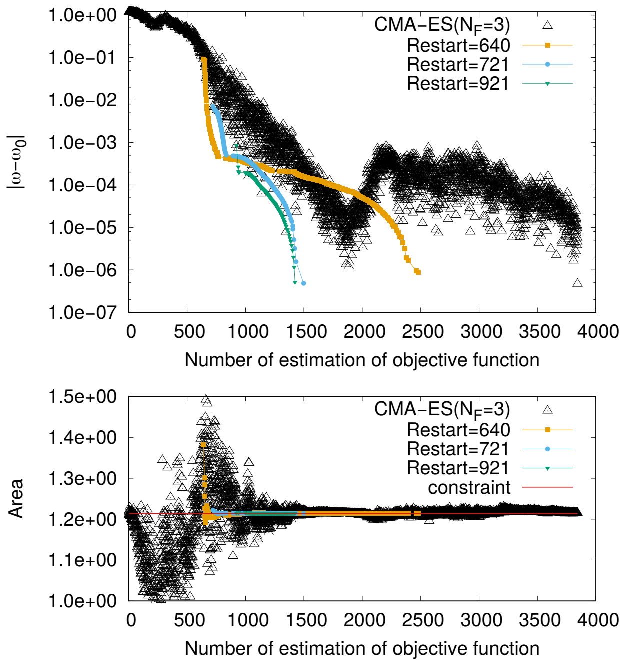
Fig. 6 Optimization result obtained by the CMA-ES (area and the geometric constraints) (a): Convergence history (upper:$|\omega - \omega_0|$, lower:area), (b), (c), (d): Shape where $|\omega - \omega_0|$ gets the smallest value during the optimization for $N_F = 3, 4, 5$, respectively.

および最終形状 (右) を示した．いずれの場合も，Fig.5 (b) や Fig.5 (d) ほど曲率は大きくなく，CMA-ES における曲率の制約が効果的に働いたと考えられる．以上から，勾配法と CMA-ES を併用した場合は，CMA-ES 単体で最適化を行うよりも収束までの試行回数を減少でき，また勾配法単体で行うよりも幾何的制約がある程度入った状態で最適化を行えると考えられ，勾配法と CMA-ES の併用の有効性が確かめられた．

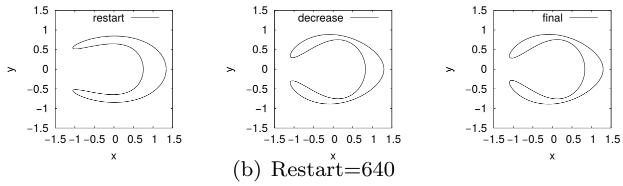
5. 結言

本論文では，二次元 Helmholtz 方程式の外部 Dirichlet 境界値問題の複素固有値を対象とした形状最適化問題を，Nyström 法により離散化された境界積分方程式法を用いて，形状の Fourier 級数表現の係数に関するパラメトリックな最適化問題へ帰着させ， CMA-ES と勾配法を用いて解く方法を提案し，数値実験によりその有効性や特性を確かめた．

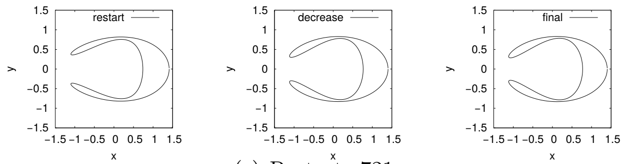
今後の課題として，高速多重極法や高速直接解法を用いた諸計算の高速化，より効果的な CMA-ES と勾配法の併用法および幾何制約の導入法の検討，より複雑な問題設定での検討などが挙げられる．また，本論文では全空間の外部 Dirichlet



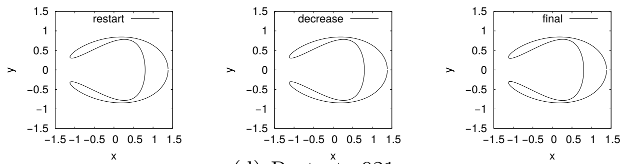
(a) Convergence history



(b) Restart=640



(c) Restart=721



(d) Restart=921

Fig. 7 Combined use of the CMA-ES ($N_F = 3$) and gradient method ($N_F = 5$). (a): Convergence history (upper:$|\omega - \omega_0|$, lower:area). Three figures in (b), (c), (d) show the restart, in-progress and the final shapes for Restart=640, 721, and 921, respectively: The left, middle and right figures show shapes at the restart tries (“restart”), shapes at the tries just after sudden decrease of $|\omega - \omega_0|$ becomes flat (“decrease”), and shapes at the final tries (“final”), respectively.

問題を取り扱ったが，他の境界条件の場合や，周期領域や導波路の問題に対する拡張を行うことも今後の課題である．

付録 A 4 節の問題設定について

4 節で考えた問題設定について説明する．4 節の目標値 $\omega_0 = 2.9956 - j1.1876 \times 10^{-3}$ は式 (11) で $N_F = 5$ 次まで利用する Fourier 級数で媒介変数表示される閉曲線 Fig. 8が持つ固有値の一つであり，また初期形状 Fig. 1 (a) は Fig. 8の形状表現の Fourier 級数を 2 次で打ち切って得られるものである．以下の理由でこのような問題設定を行った．最小化問題 (14) に対し目的関数値をゼロとする解の存在は明らかではなく，最適化計算が収束しなかったりやや大きい値で目的関数が停滞した場合に問題設定に無理があったのか，最適化計算の問題であるか判別ができないおそれがある．そこで，問題の可解性の不明瞭さを緩和して最適化が成功しているか否か可能な限り判断できるように，初期形状と大きさや形状が大きくかけ離れていない形状 (Fig. 8) が持つ固有値 $\omega_0 = 2.9956 - j1.1876 \times 10^{-3}$ を目標値とする問題設定を考えた (なお，CMA-ES による幾何制約として 4 節では最大曲率が 100 を超えない条件を与えたが，Fig.8の最大曲率は約 89.2 であることから，無理な幾何制約設定ではないと考えられる．)．ただし，最適化問題自体は式 (14) で定義される「ある固有値を目標値へ接近させる」ものであり「Fig. 8を同定する」ものではないため，最適化の結果は必ずしも Fig. 8と一致したり似た形になるとは限らないことに注意されたい．実際，4 節の数値計算結果に示すようにこの最適化問題の目的関数を小さくする解は複数得られ，また $N_F = 5$ に限らず，$N_F = 3, 4$ としても得られる．

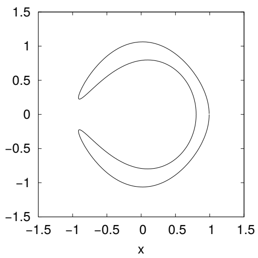


Fig. 8 A shape which has the target value $\omega_0 = 2.9956 - j1.1876 \times 10^{-3}$ as an eigenvalue.

付録 B Nyström 法の精度

本節では Nyström 法で離散化された境界積分方程式の精度を確かめる．ただし，一般形状に対する二次元 Helmholtz 方程式の外部 Dirichlet 問題 (1)-(3) の解と固有値の解析解を得ることは困難である．そこで，ここでは静的問題 (二次元 Laplace 方程式) の Dirichlet 問題の境界積分方程式を考え精度を評価する．本論文では低周波域の計算を行っており，複雑な境界形状ではその境界上の特異積分の誤差が計算全体の精度へ大きく影響すると考えられ，静的問題に対する計算精度をある程度の精度評価指標として用いることができると考えられる．未知関数を q とする以下の境界積分方程式を考える．

$$(S_0 q)(\boldsymbol{X}) = \left(\left(\frac{I}{2} + D_0\right) u_0\right)(\boldsymbol{X}) \tag{17}$$

ここに，S_0，D_0 はそれぞれ二次元 Laplace 方程式の基本解 $G_0(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{X}') = -\log|\boldsymbol{X} - \boldsymbol{X}'|/(2\pi)$ を用いて以下のように定義される一重層ポテンシャル，二重層ポテンシャルである．

$$(S_0 q)(\boldsymbol{X}) := \int_{\partial\Omega} G_0(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{X}') q(\boldsymbol{X}')\, ds_{X'} \tag{18}$$

$$(D_0 u)(\boldsymbol{X}) := \int_{\partial\Omega} \frac{\partial G_0(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{X}')}{\partial n_{X'}} u(\boldsymbol{X}')\, ds_{X'} \tag{19}$$

また，u_0 は二次元 Laplace 方程式の解であり，ここでは

$$u_0(\boldsymbol{X}) = x^2 - y^2$$

とする ($\boldsymbol{X} = (x, y)$)．式 (17) は $u(\boldsymbol{X}) = x^2 - y^2$ を解とする二次元 Laplace 方程式の内部 Dirichlet 問題 (境界値 u_0) の境界積分方程式であるから，式 (17) の未知関数 q の解析解は $q = \partial u_0/\partial n_X$ で与えられ，以下で定義される，解析解を基準とした数値解の相対誤差を求めることができる．

$$\text{error} := \sqrt{\frac{\int_{\partial\Omega} |q^{\text{nume}}(\boldsymbol{X}) - q^{\text{ana}}(\boldsymbol{X})|^2\, ds_X}{\int_{\partial\Omega} |q^{\text{ana}}(\boldsymbol{X})|^2\, ds_X}} \tag{20}$$

ここに q^{nume}，q^{ana} はそれぞれ数値解および解析解である．式 (20) をある形状における Nyström 境界積分方程式法の精度評価の指標とする．Table 1に 4 節で示した各形状に対して積分点数 $N = 500$ とした Nyström 法で式 (17) を解いたときの式 (20) で与えられる誤差を示した (ただし，Fig.7については それぞれ final のものを示した)．Table.1より，最悪で $O(10^{-3})$ の誤差であり，したがって特異積分はいずれの形状でも $O(10^{-3})$ までの精度で実行できていると考えられる．4 節に示した最適化計算では，収束の閾値を 10^{-6} と設定したが，Table 1に示したように初期形状は $O(10^{-9})$ 程度の誤差と考えられるものの，得られた最適形状によっては $O(10^{-3})$ 程度の場合もあり，また数値的に求めた固有値の値には SSM の計算誤差も加わるため，4 節の閾値 10^{-6} までの収束は今回の境界積分方程式の精度の観点から必ずしも保証されると言えない．しかしながら最適化後の誤差指標を事前に予測す

Table 1 Error defined in eq.(20) for each shape. For Figs 7, we show error for the “final” shapes in (b), (c), (d).

shape	error	shape	error
Fig.1(a)	0.148E-08	Fig.6(b)	0.131E-03
Fig.2(c)	0.406E-04	Fig.6(c)	0.329E-04
Fig.4(d)	0.545E-08	Fig.6(d)	0.134E-05
Fig.5(b)	0.199E-04	Fig.7(b)	0.120E-07
Fig.5(c)	0.293E-06	Fig.7(c)	0.468E-02
Fig.5(d)	0.205E-04	Fig.7(d)	0.297E-03

ることは容易ではなく，初期形状の誤差指標を基準として今回は上述のように閾値を 10^{-6} として設定した．最適化の各ステップにおける形状に対して精度を一定に保つためには，今回は実装に至らなかったが最適化の各ステップで精度指標を基づき積分点数 N の変更することや，あるいは精度指標 (20) そのものを CMA-ES における制約条件やペナルティ項として導入すればよいと考えられる．今回は $N_F = 5$ までを取り扱ったが，より高次の N_F ではより複雑な形状が出現しやすいと考えられるため，形状に応じた積分点数 N の調整が高次の N_F ではより重要になると考えられる．

謝辞

本研究は JSPS 科研費 19K20285 の助成を受けました．また，二名の校閲者より有益なご意見を頂きました．ここに記して謝意を表します．

参考文献

(1) J. Asakura, T. Sakurai, H. Tadano, T. Ikegami, and K. Kimura, A numerical method for nonlinear eigenvalue problems using contour integrals, JSIAM Letters, **1** (2009), pp. 52–55.

(2) N. Hansen and A. Ostermeier, Adapting arbitrary normal mutation distributions in evolution strategies: The covariance matrix adaptation, in Proceedings of IEEE international conference on evolutionary computation, IEEE, 1996, pp. 312–317.

(3) N. Hansen, The CMA evolution strategy: A tutorial, arXiv preprint arXiv:1604.00772, (2016).

(4) 松島慶, 飯盛浩司, 高橋徹, 松本敏郎, 境界要素法と櫻井・杉浦法を用いた開放型共振器のトポロジー最適化, 計算数理工学論文集, **19** (2019), pp. 49–54.

(5) 松島慶, 飯盛浩司, 高橋徹, 松本敏郎, 散乱行列と境界要素法に基づく周期散乱問題におけるトポロジー最適化, in 日本応用数理学会年会予稿集, 2020, pp. 421–422.

(6) A. Kleefeld, Shape optimization for interior Neumann and transmission eigenvalues, in Integral Methods in Science and Engineering, Birkhäuser, Cham, 2019, pp. 185–196.

(7) D. Abele and A. Kleefeld, New Numerical Results for the Optimization of Neumann Eigenvalues, in Computational and Analytic Methods in Science and Engineering, Birkhäuser, Cham, 2020, pp. 1–20.

(8) A. J. Burton and G. F. Miller, The application of integral equation methods to the numerical solution of some exterior boundary-value problems, Proceedings of the Royal Society of London. A., **323** (1971), pp. 201–210.

(9) 小林昭一 (編), 波動解析と境界要素法, 京都大学学術出版会, 2000.

(10) C.-J. Zheng, H.-F. Gao, L. Du, H.-B. Chen, and C. Zhang, An accurate and efficient acoustic eigensolver based on a fast multipole BEM and a contour integral method, Journal of Computational Physics, **305** (2016), pp. 677–699.

(11) 三澤亮太，西村直志, 見かけの複素固有値の分布に基づいた 2 次元 Helmholtz 方程式の transmission 問題における単一積分方程式法の考察, 計算数理工学論文集, **16** (2016), pp. 73–78.

(12) S. Hao, A. H. Barnett, P.-G. Martinsson, and P. Young, High-order accurate methods for Nyström discretization of integral equations on smooth curves in the plane, Advances in Computational Mathematics, **40** (2014), pp. 245–272.

(13) B. K. Alpert, Hybrid Gauss-trapezoidal quadrature rules, SIAM Journal on Scientific Computing, **20** (1999), pp. 1551–1584.

(14) 飯盛浩司, 松島慶, 鶴田健二, 高橋徹, 松本敏郎, 共分散行列適応進化戦略と S 行列を用いたフォノニック構造のパラメータ最適化, 計算数理工学論文集, **20** (2020), pp. 65–73.

(15) C.-Y. Kao and F. Santosa, Maximization of the quality factor of an optical resonator, Wave motion, **45** (2008), pp. 412–427.

(16) M. Bonnet, Differentiability of strongly singular and hypersingular boundary integral formulations with respect to boundary perturbations, Computational mechanics, **19** (1997), pp. 240–246.

(17) `https://github.com/beniz/libcmaes`.

(18) Y. Nesterov, A method of solving a convex programming problem with convergence rate $O(1/k^2)$, Soviet Mathematics Doklady, **27** (1983), pp. 372–376.

(19) B. O'Donoghue and E. Candes, Adaptive restart for accelerated gradient schemes, Foundations of computational mathematics, **15** (2015), pp. 715–732.

(20) L. Armijo, Minimization of functions having Lipschitz continuous first partial derivatives, Pacific Journal of mathematics, **16** (1966), pp. 1–3.

(21) M. Otomori, T. Yamada, K. Izui, and S. Nishiwaki, Matlab code for a level set-based topology optimization method using a reaction diffusion equation, Structural and Multidisciplinary Optimization, **51** (2015), pp. 1159–1172.