様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９　（共通）

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 ３０ 年　 ６ 月 １１ 日現在

機関番号：１４３０１

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2015～2017

課題番号：１５Ｈ０３６０４

研究課題名（和文）新しい周期多重極法の開発と光起電力問題への応用

研究課題名（英文）Development of new periodic FMM and its application to photo induced voltage problems

研究代表者

西村　直志（Nishimura, Naoshi）

京都大学・情報学研究科・教授

研究者番号：９０１２７１１８

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　4,100,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では，周期構造に対する積分方程式の新しい高速解法の開発と，メタマテリアルの問題への適用を行った．新しい高速解法としては，計算負荷の少ない固有値計算法を開発し，見掛けの固有値を識別する方法を考案した．また，周期Green関数を用いた高速解法を検討し，誘電体の散乱問題に適応可能な高速直接解法を開発した．具体的な応用として，ナノポーラスゴールド(NPG)の横起電力問題を取り上げ，シミュレーション結果は実験結果と定性的に一致することを確かめた．さらに金薄膜のメタマテリアルのトポロジー最適化を行い，製作上の制約を考慮した計算法を開発した．

研究成果の概要（英文）：We have investigated new fast methods of solution for integral equations for periodic structures and their applications to metamaterial problems. As new solution methods we have developed a fast eigensolver which can discriminate fictitious eigenvalues. Also, we have developed a fast direct solver for periodic problems using periodic Green's functions. As applications, we have shown that out simulation results in transverse photo-induced voltage problems for nano porous gold agree qualitatively with experiments. Finally, we have developed a topology optimization method for thin metallic metamaterials which takes fabrication constraints into consideration

研究分野：計算科学

キーワード：計算力学　周期多重極法　Maxwell方程式　メタマテリアル

１．研究開始当初の背景

境界積分法は与えられた境界値問題を領域境界上の積分方程式に帰着させて解く数値計算法である．特に波動散乱問題の数値計算法として優れており，電磁波問題や音響学でよく用いられている．従来の境界積分法は未知数の数が N である問題において $O(N^2)$ の算法であったために広く支持を得るには至らなかったが，高速多重極法と言うブレークスルーを経験し，以後 $O(N(\log N)^{\alpha})$（$\alpha\geq 0$）程度の計算量を有する高速算法が種々提案されるに至って完全に復活した．

我々は周期波動散乱問題における高速解法である周期多重極法を世界に先駆けて開発し，フォトニック結晶やメタマテリアル等への応用を行ってきた．特に，新学術領域研究「電磁メタマテリアル」の研究に関わる機会を得て，主に光起電力問題への適用を図ってきた．この研究を通して周期多重極法が有用な解法であることは確認できた一方で，いくつかの問題点も見えてきた．まず，周期問題の特徴的な挙動である解の急変(アノマリ)に伴って，線形方程式の反復解法の収束が悪くなること．実際，例えば周期構造の特徴の一つであるストップバンドでは，周波数が少し変わると突然波動が透過しなくなるが，バンド端ではしばしば収束性に問題が生ずる．この問題を解決するための基礎研究として，Calderon 前処理法や積分方程式の定式化(Müller の定式化等)の検討等を行い，いずれも一定の成果をあげることはできたが，多領域問題で確実に機能する解法を得るには至っていない．メタマテリアルの場合，金属，誘電体，空気の領域が混在する多領域問題になるのはごく普通のことであり，基礎研究が必ずしも役に立っているとは言えないのが現状である．また，従来の周期多重極法は，解の積分表示を求めるのに周期 Green 関数を使うのではなく，周期問題を周期単位が無限個並んだ問題ととらえ，周期単位のレプリカのうち遠方のものの及ぼす影響を多重極展開を用いて評価するものであった．このアイデア自体は時間のかかる Green 関数の評価を回避した巧妙なものであったと言えるが，一方，高次の格子和(無限領域の Green 関数の高階微分の無限和)の評価が必要になり，計算効率や精度低下の原因となっていた．この様に，従来の周期多重極法のメタマテリアル分野における一定の有用さは確認できたが，まだまだ改良の余地があると考えられる．

また，新学術領域研究「電磁メタマテリアル」において，東北大の石原等は金薄膜等で出来たナノスケールの周期構造に円偏光を入射する場合に光の進行方向のみならず，横方向にも起電力が生ずる事を実験的に見出した．新学術の期間中の我々との共同研究を通して金薄膜の周期構造の横起電力と金属の表面電場強度には明確な関連性がある事がわかった．さらに石原等は，ランダム系であるナノポーラスゴールド(NPG)を用いても同じように横起電力が観測される事を見出した．NPG は金と銀の合金の薄膜（厚さ 100-200nm 程度）を硝酸でエッチングして出来る金の薄膜にランダムな穴が貫通した構造である．新学術の研究では現象を簡単化したモデルを用いてこの現象を説明する事を試みたが，現象をとらえうるモデルの作成には至らなかった．その理由としては，計測によって実物に近いNPG の3次元モデルを作ることがはなはだ困難であることである事や，多領域問題における周期多重極法の収束性の問題が完全に解決していないことを挙げることが出来る．新学術の研究では，他に光メタマテリアルの形状最適化の研究にも取り組み，見掛け上負の屈折率を有する 2 重漁網構造で FOM (レンズとしての明るさ)を最大化する事に成功しているが，トポロジー変化を含むトポロジー最適化を行うには至っていない．

２．研究の目的

本研究は，メタマテリアル研究に有用な，周期構造に対する種々の新しい高速解法を開発することと，メタマテリアルに関わる具体的な問題への適用の 2 つを目的とする．

新しい高速解法の開発として，具体的には，次のようなことを考える．まず，周期多重極法の改良の方向として，従来用いられてきた Galerkin 法と PMCHWT 定式化の収束性に問題があることに注目し，基底関数の概念を用いない Nyström 法の使用を検討する．また，従来の多重極展開に代わるものとして，Green 関数を陽に利用した新しい周期多重極法を開発する．特に，収束性に問題の生じない高速解法を検討する．さらにメタマテリアルの特異な性質は固有値問題の立場から理解できることを想定し，積分方程式による固有値問題の解法の検討を行う．

次に新しいソフトウエアを用いて，新学術領域研究の過程で見出され，期間内には扱うことのできなかったメタマテリアルによる光起電力問題のシミュレーションを行い，実験結果と比べられるものについては比較することによって，光起電力現象の解明に資することを目指す．具体的には，NPG のような非常に複雑な境界形状を有する構造の波動散乱解析，及びメタマテリアルの特性を考慮したトポロジー形状最適化に使える解法を目指している．

３．研究の方法

(1)　新しい周期多重極法の開発
従来の周期多重極法が基本解を用いていたのに対して，新しい周期多重極法では周期

Green 関数を用いる．そのため，Ewald や Kummer の方法を用いる．これは，提案手法を Sakurai-Sugiura 法を使った固有値問題に適用することを意識して，各パラメータに関する解析接続の求めやすさを考慮しての選択である．さらに，開発した手法の高速直接解法への適用を検討する．

(2)　Nyström 法の適用と固有値問題への応用
Nyström 法は数値積分公式の積分点を選点とする選点法である．従来の周期多重極法は基底関数の使用を前提としていたため，計算負荷が大きく，特にメタマテリアルの特性の把握のために有望な固有値計算への適用には不利である．このため，本研究では周期構造の電磁波動問題の解析に Nyström 法を適用する．また，Sakurai Sugiura 法を用いて散乱問題における固有値問題の解法の研究を行う．

(3)　光起電力問題への適用
NPG のモデル化については，相分離を記述する Cahn-Hilliard 方程式を周期境界条件の下に数値的に解いて，そのレベルセットから NPG のモデルを作成する．Cahn-Hilliard 方程式の数値計算には近年発達している構造保存数値解法を用いる．開発した新しい周期多重極法のコードと NPG のモデルを用いて，各種の偏光を入射したときの横起電力のシミュレーションを行う．横起電力の算定には表面電場強度モデルを用いる．また，得られた結果を定性的に実測結果と比較する．実測データは連携研究者から提供を受ける．

(4)　光メタマテリアルのトポロジー最適化
石原等とともに行った光メタマテリアルの研究では，周期的に光の波長程度の間隔で穴を開けた金の薄膜を取り扱った．本研究では，何らかの物理的性質が特に顕著に現れる構造はどのようなものかを考察する．最適化においては，穴の形のみならず，個数も未知とするトポロジー最適化を行う．そこで使われる標準的な道具はトポロジー導関数であり，これは考える領域に微小な球孔が発生したときの目的関数の変化率を表す．しかしメタマテリアルの問題ではナノスケールの加工には技術的な限界があり，薄膜に開ける穴の 3 次元的な形状を決定する事に意味はない．そこで，本研究では薄膜に 2 次元的な貫通孔が生じたときのトポロジー導関数を求め，これを使って横起電力を最大とするメタマテリアルの設計を行う．具体的には，まず着目する物理量の 2 次元的トポロジー導関数を計算し，レベルセット関数の擬似時間発展問題に帰着させて最適化問題を解く．解析には開発した新しい周期高速解法のコードを用いる．また，計算結果の評価には連携研究者に実験物理学者の立場からの助言を求める．

４．研究成果
(1)光メタマテリアルの横起電力問題への周期多重極法の適用[4]
NPG（図１）は金銀合金から銀だけを溶出することによって作成される．この際，多孔質の金が生成するプロセスは複雑であり，金属と電解質(溶液)の界面における合金の溶解と残った金原子の拡散，結合によって NPG が形成されるものと考えられている．このプロセスを忠実にモデル化する研究は既に行われているが，手法が複雑であるので，電磁波解析に使用するモデル作成のために同様なシミュレータを開発することは現実的ではない．そこで本研究では，3 次元 Cahn-Hilliard 方程式を数値的に解くことで，NPG のメッシュを計算機上で作成し，これを用いて数値計算により NPG の光起電力を解析することを試みる．元来 Cahn-Hilliard 方程式は水と油のような相分離を記述する現象論的方程式であるので，これを用いて NPG のモデルを作成することには一定の合理性がある．

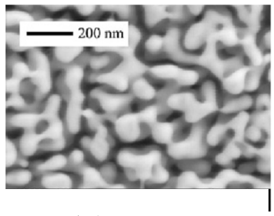

図 1　NPG

NPG のメッシュ作成においては，非線形項を含む Cahn-Hilliard 方程式の解析に通常の差分スキームを用いると大きな誤差が含まれることが知られているため，構造保存型差分スキーを用いる．得られた Cahn-Hilliard 方程式の金銀濃度相半ばするところで level set を作成し，この上に張られた NPG のメッシュと周期多重極法を用いて横起電力の計算を行った．横起電力の算定には，電子の受ける Lorentz 力を基に電場の非一様性と電子の軌道を考慮して導出した表式を用いた．

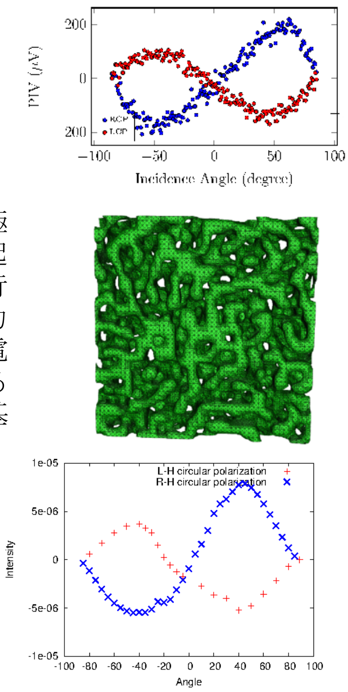

図 2 横起電力
上：実験，中：モデル，下：計算結果

図 2 には使用した NPG のモデルと横起電力の計算結果を示した．入射波は波長 λ ＝ 550[nm]である円偏光の平面波である．図中

の赤い点は時間定義(即ち，時間の経過に伴って，ある点における電場が光の進行方向に向かって(反)時計回りに回転するものを右(左)円偏光とする)における左円偏光入射時の横起電力を，青い点は右円偏光入射時の横起電力を表す．横軸は入射角，縦軸は横起電力の強度である．図の実験結果と同様に右円偏光と左円偏光で符号が逆転する結果となり，「無限大」の字を描くような概形となっている．数値計算による横起電力の値と実験値に大きな違いが見られるが，これは使用した横起電力の表式が比例関係式であるためである．なお，別の光メタマテリアルの実験において，比例係数を合理的に見積もると，数値計算結果と実験結果がある程度一致するとする報告がある．NPG で同様な比較を行うことは，試料と計算モデルを合わせることが困難であるので，必ずしも容易ではない．

(2)光メタマテリアルのトポロジー最適化[1]
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ター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の構造の最適化を行うことができると期待される．本研究では円筒孔トポロジー導関数の表式を導出し，得られたトポロジー導関数をレベルセット法に適用することで，電磁メタマテリアルのトポロジー最適化行った．

トポロジー最適化の数値計算結果を図３に示す．本研究では，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．特に，入射波の波長を 1088[nm]とした場合の計算結果を示す．穴の面積は最大 0.25 とした．入射波は，垂直入射の，電場が振幅 1

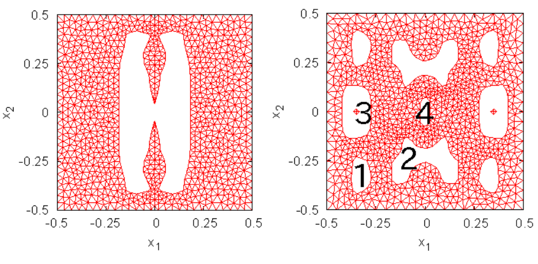

図 3 トポロジー最適化　左：1088nm，右：548nm

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．次に波長を 548[nm]としたときの結果を示す．図より，波長によって著しく異なる最適形状が得られていることが分かる．

なお，これらの計算には周期多重極法を用いている．周期多重極法は当初想定していたより性能がよく，特に，懸念された低周波問題に伴う効率の悪化はほとんど問題にならなかった．

(3) 周期波動問題における Green 関数を用いた高速直接解法について[3]
当初の研究計画では KIFMM(kernel independent FMM) に想を得た周期波動問題の高速解法を開発する予定であったが，周期多重極法が低周波問題において想定外に高性能であったことと，周期 Green 関数の評価法を開発するのであれば，同じ方法を使って最近進展が著しい高速直接解法への適用を検討することがより有意義であると判断されたことから，研究方針を若干変更して Kummer 変換や，Ewald の方法を用いた周期問題の高速直接解法に研究の中心を置いた．ただし，metamaterial は薄膜状の構造が多いことと，研究が基礎的段階であることを考慮して，まず 2 次元問題を取り上げた．metamaterial の解析においてはトランスミッション問題を解くことが重要である．そこで，PMCHWT 定式化と Kummer 変換を取り上げ，周期トランスミッション問題を検討したところ，多階層型定式化を使おうとすると不可逆行列の逆を求める必要が出てくることが分かった．検討の結果，いわゆる multi trace 型の定式化を行うと不可逆性の問題をクリアできることが分かり，この定式化を実装の上，数値計算を行って良好な結果を得た．また，論文としては未発表であるが，Ewald 型の定式化もできており，特に超特異積分の正則化を Fourier 変換を用いて行う方法を考案できたことは重要な成果であると考えている．ただし，これらの手法の3次元化とメタマテリアル問題への展開は今後の課題となった．

(4) Nyström 法を用いた積分方程式の固有値問題への適用について[2]
周期問題の特異な性質は，積分作用素のスペクトルを調べることによって理解が深まると考えられる．しかし，積分方程式の固有値問題は非線形固有値問題に帰着し，これまで良い数値手法がなかったためあまり研究は行われてこなかった．ところが，Sakurai Sugiura 法が開発され，一挙に可能性が広がった．特に，波動散乱問題では，他の手法では難しい開領域の固有値問題の解析などへの適用が期待される．本研究では非周期問題を含む，波動散乱問題における積分方程式の

固有値問題の基礎的研究を行った．この結果，開領域の固有値を求める際に，見かけの固有値現象が問題になることが分かった．例えば実数の振動数を扱う場合，複素数の見かけの固有振動数を持つ定式化でもこれまでは問題にならなかったが，複素数の真の固有値を求めたい場合には見かけの固有値との区別が困難になる．本研究では，トランスミッション問題において，内部領域の積分方程式の核関数を通常の外向き波の基本解から内向き解に変更することによってこの問題を容易に解決できることを見出した．この研究で，代表者の指導する博士課程学生（当時）が日本応用数理学会研究部会連合発表会優秀講演賞(2016 年)を受賞した．さらに，積分方程式を用いた固有値解析を周期問題に適用する試みも行い，一定の成果を得ることができた．しかし 3 次元問題では Rayleigh のアノマリーが 2 次元の場合とは比較にならないほど高密度で現れ，これを避けることがかなり困難であることも結論された．3 次元メタマテリアルへの本格的な適用は今後の課題となった．

５．主な発表論文等
（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計　５　件）
[1]福田哲史，西村直志，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，計算数理工学論文集，vol.17，pp.95--100，2017.12，査読あり

[2]R. Misawa, K. Niino and N. Nishimura, Boundary integral equations for calculating complex eigenvalues of transmission problems, SIAM J. Appl. Math., vol.77, pp. 770-788, 2017.4 http://dx.doi.org/10.1137/16M1087436, 査読あり

[3]松本安弘，西村直志，2 次元 Helmholtz 方程式の transmission 境界値問題の高速直接解法について，計算数理工学論文集，vol.16，pp.97--102，2016.12，査読あり

[4]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ーラスゴールドの光起電力解析，計算数理工学論文集，vol.15，pp.85--90，2015.12，査読あり

〔学会発表〕（計　１３　件）
Naoshi Nishimura, Boundary integral equations for calculating complex eigenvalues for open domains, SIAM PP18, 2018

Naoshi Nishimura, Performances of the boundary integral equations for transmission problems and the distributions of the complex fictitious eigenfrequencies, Waves 2017, 2017

三澤亮太，2 次元 Helmholtz 方程式の waveguide 問題における複素固有振動数の計算法について，応用数理学会研究部会連合発表会，2016

Naoshi Nishimura, Applications of FMBEM to optical problems related to metamaterials, ICOME2015, 2015

〔図書〕（計　０　件）

〔産業財産権〕

○出願状況（計　０　件）
○取得状況（計　０　件）

〔その他〕
ホームページ等
該当なし

６．研究組織
(1)研究代表者
西村直志（Naoshi Nishimura）
京都大学　情報学研究科　教授
研究者番号：90127118

(2)研究分担者
吉川　仁　（Hitoshi Yoshikawa）
京都大学　情報学研究科　准教授
研究者番号：90359836

新納　和樹（Kazuki Niino）
京都大学　情報学研究科　助教
研究者番号：10728182

(3)連携研究者
石原　照也（Teruya Ishihara）
東北大学　理学研究科　教授
研究者番号：60168250

(4)研究協力者
なし