

令和 3 年 5 月 24 日現在

機関番号：13901
研究種目：基盤研究(C)（一般）
研究期間：2018～2020
課題番号：18K11335
研究課題名（和文）アイソジオメトリック境界要素法によるプラズモニクス用3次元形状最適化システム

研究課題名（英文）A 3D shape optimisation system for plasmonics using isogeometric BEM

研究代表者
高橋 徹（Takahashi, Toru）

名古屋大学・工学研究科・准教授

研究者番号：90360578
交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：表面プラズモンに立脚した科学技術であるプラズモニクスに関するデバイス機器の開発・設計に資する数値シミュレーション手法として、事実上の標準は時間領域差分法であるが、（周波数領域の）境界要素法とりわけアイソジオメトリック境界要素法（IGBEM）はより適切かつ有望な手法と考えられる。そこで本研究は、3次元2周期多層構造系における電磁波動問題用のIGBEMの開発を行い、それに基づく形状最適化システムの構築を行った。当該IGBEMは、既存する非周期問題に対する先行研究を基として、それに周期性を導入することに成功した。また、3次元音響問題における研究を経て、当該の電磁問題用の形状最適化システムを構築した。

研究成果の学術的意義や社会的意義
開発した3次元2周期多層構造系における電磁波動問題用のアイソジオメトリック境界要素法（IGBEM）は、3次元非周期電磁波動問題用のIGBEMと、3次元周期境界値問題用のRao-Wilton-Grisson基底に基づく従来の境界要素法とを基にして構成した新しい解法であり、とりわけ昨今研究が活発に行われているIGBEMの研究分野における学術的な価値は高いと思われる。したがって、構成したIGBEMを基にして開発した形状最適化システムも現状唯一のものであると考えられ、近年注目されているプラズモニクスに関連した機器の開発および設計に資する道具として、産業的・社会的意義は大きいと考えられる。

研究成果の概要（英文）：As a numerical simulation method to develop and design devices regarding plasmonics, which is based on the surface plasmons, the (frequency-domain) boundary element method, in particular, isogeometric boundary element method (IGBEM) is more appropriate and promising than the time-domain finite-difference method, which is the de facto standard method nowadays. Therefore, we aimed at developing a 3D IGBEM for doubly-periodic layer systems and, then, constructing a shape optimisation system. We successfully developed the IGBEM by considering the periodicity into the existing researches for non-periodic problems. Also, we could establish the shape optimisation system via the investigation for 3D acoustics.

研究分野：計算科学

キーワード：アイソジオメトリック解析 境界要素法 周期境界値問題 Maxwell方程式 形状最適化

1. 研究開始当初の背景

プラズモニクスは、金属表面に発生する“さざ波”である表面プラズモンに立脚した新しい科学技術であり、生物化学用センサの高感度化、光電変換の高効率化、各種光回路の小型化等への応用が期待されている。これらプラズモニック・デバイスを創生するためには、金属表面の設計が最大のポイントであり、シミュレーション技術が果たす役割は大きい。特に、時間領域差分法 (FDTD 法) は“手軽” (汎用コードが整備、高速動作、直感的等) な手法として広く用いられている。

しかし、事実上の標準である FDTD 法がプラズモニクス用の数値解法として最善とは言い切れない。なぜならば、(i) プラズモニック・デバイスは定常状態における動作を意図したものが多く、時間領域 (=非定常に) 解析する必然性はない。特に、周波数の関数として測定されている誘電率 (誘電関数) をわざわざ時間領域に変換するのは煩雑かつ精度を低下し得る；(ii) 表面プラズモンは金属表面に局在する (内部に向かって指数関数的に減衰する) ため、その挙動を正確に捉えるためには表面付近に多くのグリッドを必要とする。特に 3次元問題では膨大である；(iii) 人工的な放射条件が必要であり、誤差の混入を免れない；(iv) 直交グリッドを用いるため、デバイスの形状は必然的に“角張った形状”に限定され、設計の自由度を制限してしまう。

したがって、FDTD 法に代わるより適切な数値解法が必要である。例えば、有限要素法 (FEM) は一候補であるが、計算精度に関わる (ii) と (iii) が問題点として残る。そこで、本研究は境界要素法 (BEM) を利用する。BEM では (i)~(iv) を全て解決できる。つまり、BEM は (i) 特定の周波数における定常状態を直接的に解析可能、(ii) 境界のみを離散化の対象とするため、表面プラズモンの有無によらず表面付近にメッシュは元より不要、(iii) 放射条件は自動的に満たす、(iv) 曲面を含む任意形状を解析できる。

ところが、従来の BEM (=区分多項式ベースの基底を用いた BEM) は形状最適化との相性が必ずしも良くない。この問題を本研究はアイソジオメトリック境界要素法 (IGBEM) の開発によって解決する。第一に、従来の BEM では要素と要素の間では“接線微分”は一般に不連続であるため、形状最適化において必要な形状微分 (=形状感度=形状の変化に対する所定の目的関数の変化量) を直接計算することは困難であり、平均化等の処理が必要となってしまう。他方、IGBEM では境界全体を NURBS 曲面として扱うため、その接線微分は境界全体 (ただし、エッジや角を除く) に渡って連続である。そのため、形状微分の計算が簡単かつ正確である。第二に、形状の変化に伴う境界メッシュの“歪み”が発生し得る。この問題に対して、従来の BEM では新たな境界要素を追加して対応するが、その処理は多くの時間を要する上、追加以前の境界形状が崩れてしまうという問題がある。他方、IGBEM では“ノット”を挿入するだけで要素の追加が可能であり、境界の形状は厳密に保持できる。これら二つの観点より、IGBEM と形状最適化手法の組み合わせは有望と考えられる。

設計対象とする物理系は、金属や誘電体が積層した層構造であり、各層と平行な方向に周期的な系 (3次元 2周期系) とする (図 1)。このような多層周期構造系は、プラズモニック・デバイスのみならず、メタマテリアルの分野で期待されるメタサーフェイス (プラズモニック結晶を含む) も模擬し得るのであって、応用上重要な構造系である。

2. 研究の目的

本研究課題の申請時における研究目的は、3次元 Maxwell 方程式に対する高速・高精度なアイソジオメトリック境界要素法 (IGBEM) を開発し、プラズモニック・デバイスの開発を支援するための 3次元形状最適設計システムを構築することである。具体的には、3次元 2周期多層構造における定常電磁場を解析可能な IGBEM を確立する。この際、その高速化と高精度化にも留意する。開発した IGBEM をソルバーとして、表面プラズモンの励起を原理とする薄型シリコン太陽電池における光電変換の高効率化を念頭として、対象構造の形状最適化問題を随伴変数法により定式化し、数値シミュレーションを実施することにより、薄型シリコン太陽電池の設計指針を提案する。

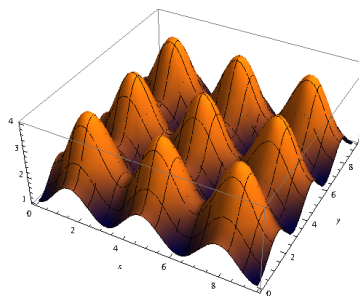


図 1: 3次元 2周期系の金属表面のイメージ。下側に金属本体および別の層、上側には空気等の層を想定し、平面電磁波を入射する。

3. 研究の方法

本研究は以下の3段階に分けて実施するものである。

(1) アイソジオメトリック境界要素法 (IGBEM) の開発

3次元2周期多層構造における定常電磁場を解析可能なIGBEMを確立する。後続する研究の道具として必要であるばかりでなく、学術的にも重要な進展と言える。完全導体における定式化を基として、本研究に必要な定式化および数値実装を行う。また、実用性を勘案して、要素再分割に基づく高精度化および周期高速多重極法に基づく高速化についても検討する。

(2) 3次元形状最適化システムの構築

本研究では随伴変数法を用いる。設計変数は境界の制御点 (=境界をNURBS曲面として表すために与える点の集合) の座標値である。この場合、開発した高速IGBEMにより順問題と随伴問題を解き、それらの解から計算される形状微分によって目的関数の勾配を求めるようにすれば、汎用の非線形計画問題用ソルバによって本形状最適化問題が解ける。解析解の存在する形状最適化問題を解くことにより、本システムの検証を行う。同時に、形状の変化や電磁場の様子を可視化するための周辺ソフトウェアについても整備する。

(3) 具体的応用、発展、研究の総括

開発した3次元形状最適化システムを用いて、シリコンと金属(銅、銀など)からなる二層構造の境界を最適化する。この際、金属表面付近における電磁場のエネルギーを目的関数として、それを最大化するような最適化問題を考える。これは周期構造によって誘起される表面プラズモンを利用した薄型シリコン太陽電池における光電変換の高効率化に相当する。次に、多層構造にも適応できるように解析プログラムを拡張し、空気/反射材/シリコン/金属/空気のような実モデルの最適設計を行うこの場合、シリコン層におけるエネルギー吸収率を最大化するような目的関数を選び、その形状微分(形状感度)を導出する。最後、多層構造の最適化シミュレーション結果をもって、本研究を総括する。

4. 研究成果

(1) アイソジオメトリック境界要素法 (IGBEM) の開発

主たる研究目的である電磁気学用3次元2周期境界値問題に対するアイソジオメトリック境界要素法(IGBEM)の開発を行った。定式化および解析プログラムの作成・検証を行い、関連学会(「第23回計算工学講演会」および「International Association for Boundary Element Methods (IABEM) 2018」)において研究発表も行った。当該の内容をもって国外英文雑誌へ投稿した。プレプリントは[arXiv](https://arxiv.org/)に公開中である。

当該問題に対するIGBEMの構成においてポイントとなるのは、(i)2周期開曲面のB-spline関数による表現、および(ii)擬周期性を考慮したベクトル基底関数の構成の二点である。(i)に関しては研究代表者のグループがこれまでに研究してきた2次元Helmholtz方程式に関するIGBEMの構成に関して培って来た技術を発展することで解決した。一方、(ii)の解決は、Buffaら(2010年)の先行研究において提案されたB-spline関数に基づく基底関数を参考としたが、解くべき変分方程式を正則化するために必要となる擬周期境界条件を勘案する点は本問題に特化しており、提案したベクトル基底関数はオリジナルなものであると言える。これら(i)および(ii)によって本問題のIGBEMの構成が可能となり、数値解析例を通じて、本IGBEMの妥当性を確認した。また、本研究課題が注目する表面プラズモンに注目した薄型太陽電池の最適設計を念頭に置いて、表面プラズモンの励起に関するシミュレーションも成功裏に実施した。

(2) 形状最適化システムの構築

① 準備 本研究が構築しようとする「3次元電磁波動問題に関する形状最適化システム」の基礎として、「3次元音響問題」に関するアイソジオメトリック境界要素法 (IGBEM) を用いた形状感度解析手法の研究を行った。この成果は国内雑誌 (査読あり) に掲載済みである。また、2件の学会発表を行った。

次に、上記の感度解析を基に、3次元音響問題に対する形状最適化システムの構築を行った。具体的には、定点における音圧を最大化もしくは最小化することを目的として、与えた物体 (散乱体) の形状を自動更新可能とするシステムである。定式化自体は従来から知られているが、IGBEM と関連付けた研究は本研究が初めてである (2次元問題に関しては研究代表者のグループによって研究がなされている)。本最適化問題が非線形計画問題に帰着できることを示し、そのソルバーとしてはオープンソフトウェア Ipopt (主双対内点法に属する手法) における目的関数およびその勾配を計算するルーチンを具体的に作成した。続いて、厳密解が存在するような問題を設定し、本形状最適化手法によって得られた数値解が厳密解によく一致することを示し、本手法の妥当性を示した。

そこで、より現実的な最適化問題 (複数あるいは複雑形状の散乱体など) を設定・解析したところ、主双対内点法は膨大な反復を必要とする傾向があることがわかった。これを解決するために、(勾配を利用した) 非線形最適化手法として MMA (method of moving asymptotes) や SLSQP (sequential quadratic programming) (これらはオープンソフトウェア NLopt として実装されているものを利用した) を試したところ、SLSQP は主双対内点法よりも速く収束する傾向が見られ、SLSQP が有望であるとの結論に至った。この成果は国外英文雑誌に投稿した。プレプリントは [arXiv](https://arxiv.org/abs/2008.08111) に公開中である。

② 構築 上記①の3次元音響問題用形状最適化システムをベースとして、3次元2周期多層構造系における外部電磁波動問題に関する形状最適化システムの開発を行った。研究当初は随伴変数法を用いることを予定していた。しかし、文献を精査したところ、その定式化の要となる形状感度 (形状導関数) の導出自体は国外のグループによって行われている事が判明した (S. Sargheini, “Shape sensitivity analysis of electromagnetic scattering problems”, Doctoral Thesis (2016) および S. Sargheini 他, “Shape sensitivity analysis of metallic nano particles”, Int. J. Numer. Model., Vol.30 (2017))。その対象とする問題は非周期問題ではあるが、本研究が目的とする周期問題への転用はさほど学術的に新規性がないとの判断に至った。そこで、本システムの構築を急いで、勾配を用いない最適化アルゴリズムの使用へ切り替えた。具体的には、不等式制約条件が取扱い可能な非線形計画問題用アルゴリズムである COBYLA 法を採用した。

構築した形状最適化システムを検証するために、過去に解析した2次元問題と等価な3次元2層構造系 (積層方向は z 方向) における形状最適化問題を解いた。具体的には、層間の境界形状は平面として、それが z 方向にのみ可変できるものとする。この場合、ユニットセル内の平面境界を張る制御点に共通する z 座標、つまり xy 平面からの高さ H が唯一の設計変数となる。入射電磁場として、電場が $-x$ 方向、磁場 $-y$ 方向に向くものを選べば、本問題は2次元1周期2層構造系とみなすことができ、その解析解と比較可能である。解析の結果、COBYLA 法は13回の反復で収束した (停止条件は目的関数の相対変化率が2ノルムにおいて0.1%とした)。得られた目的関数値は、参照とした2次元問題の場合の値と6桁まで一致した (解析解とは2桁一致した)。また、形状変化 H も参照値と5桁の範囲で一致した (解析解とは4桁一致した)。以上より、構築した本形状最適化システムは計算精度の観点から妥当であるとの結論を得た。

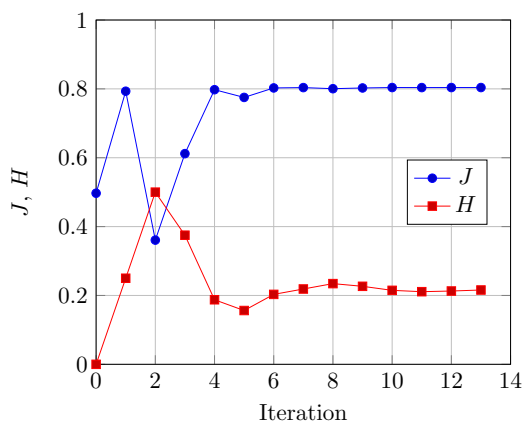


図 2: 目的関数 J および高さ H の履歴

(3) 課題と展望

上記(2)で開発した形状最適化システムによる多層構造における数値解析の実践、および電場波動散乱問題用ソルバとして開発したアイソジオメトリック境界要素法の高速度化に課題を残したが、開発した本形状最適化システムは3次元プラズモニクス研究・設計のツールとして有用であると考えられる。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計3件（うち査読付論文 1件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 高橋徹、平井哲郎、佐藤大輔、飯盛浩司、松本敏郎	4. 巻 18
2. 論文標題 3次元音響問題に関する isogeometric BEMに基づく形状感度解析	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 計算数理工学論文集	6. 最初と最後の頁 69-74
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Toru Takahashi, Daisuke Sato, Hiroshi Isakari, Toshiro Matsumoto	4. 巻 2105.04456
2. 論文標題 A shape optimisation with the isogeometric boundary element method and adjoint variable method for the three-dimensional Helmholtz equation	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 arXiv	6. 最初と最後の頁 1-24
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Toru Takahashi, Tetsuro Hirai, Hiroshi Isakari, Toshiro Matsumoto	4. 巻 2105.00853
2. 論文標題 An isogeometric boundary element method for three-dimensional doubly-periodic layered structures in electromagnetics	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 arXiv	6. 最初と最後の頁 1-36
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

〔学会発表〕 計8件（うち招待講演 0件/うち国際学会 0件）

1. 発表者名 高橋徹、河村僚太、小巻祐太、飯盛浩司、松本敏郎
2. 発表標題 弾性波ビーム形成現象に関するアイソジオメトリック境界要素解析
3. 学会等名 第24回計算工学講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 MIAO Peiwen, TAKAHASHI Toru, ISAKARI Hiroshi, MATSUMOTO Toshiro
2. 発表標題 Topology optimization based on isogeometric boundary element method (IGBEM)
3. 学会等名 第24回計算工学講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 佐藤 大輔, 高橋 徹, 飯盛 浩司, 松本 敏郎
2. 発表標題 3次元音響問題用アイソジオメトリック境界要素法の開発と形状感度解析への応用
3. 学会等名 第31回計算力学講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 平井哲郎、高橋徹、飯盛浩司、松本敏郎
2. 発表標題 三次元二周期電磁波動散乱問題に対するアイソジオメトリック境界要素法の開発
3. 学会等名 第23回計算工学講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Tetsuro Hirai, Toru Takahashi, Hiroshi Isakari, Toshiro Matsumoto
2. 発表標題 A development of 3-D IGBEM for electromagnetic scattering by doubly periodic PEC structure
3. 学会等名 International Association for Boundary Element Methods (IABEM) 2018
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 平井哲郎、高橋徹、飯盛浩司、松本敏郎
2. 発表標題 誘電体を散乱体とする三次元二周期電磁波動散乱問題に対するアイソジオメトリック境界要素法の開発
3. 学会等名 第 31 回計算力学講演会 (CMD2018)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 佐藤大輔、高橋徹、飯盛浩司、松本敏郎
2. 発表標題 3次元音響問題用アイソジオメトリック境界要素法の開発と形状感度解析への 応用
3. 学会等名 第 31 回計算力学講演会 (CMD2018)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 高橋徹、平井哲郎、佐藤大輔、飯盛浩司、松本敏郎
2. 発表標題 3次元音響問題に関する isogeometric BEMに基づく形状感度解析
3. 学会等名 計算数理工学シンポジウム2018 (JASCOME symposium 2018)
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------