1903 Maxwell方程式の周期散乱問題における 形状感度解析について

Shape sensitivity analysis of periodic structures in scattering problems for Maxwell's equations

非 倉見洋輔 (京大・情報) 非 新納和樹 (京大・情報)

正 西村直志 (京大・情報)

Yosuke KURAMI, Kyoto University, Yoshida Honmachi, Sakyo-ku, Kyoto

Kazuki NIINO, Kyoto University

Naoshi NISHIMURA, Kyoto University

Key Words: Shape determination, Maxwell's equation, Periodic structure

1. 緒言

近年、フォトニック結晶や、メタマテリアなど、特異な光学的性質を示す周期構造が盛んに研究されており、我々も、Maxwell 方程式の周期問題に対する高速多重極法を開発してきた⁽¹⁾。一方、所望の性能を有する周期構造の形状を決定する逆解析の研究はまだ多くはない。そこで本報では、電磁波散乱 2 周期問題における形状最適化を考える。遠方場係数の関数であるコスト関数を導入し、随伴変数法と周期多重極法によって感度を求める。簡単な例題の解析により、提案手法の有用性を検証する。

2. 定式化

2.1. 順問題の支配方程式

領域 Ω を $(-\infty, \infty) \times [-L_2/2, L_2/2] \times [-L_3/2, L_3/2]$ とし、 Ω をさらに有界領域 Ω_- と補集合 $\Omega_+ = \Omega \setminus \Omega_-$ に分割する (Fig. 1)。また、 Ω_+ と Ω_- の境界を Γ とし、 Γ の単位法線ベクトル $\mathbf{n}$ は Ω_- から見て外向きが正とする。

解くべき問題は、各部分領域において Maxwell 方程式

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{x}) = i\omega\mu_{\pm}\mathbf{H}(\mathbf{x}),$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{x}) = -i\omega\epsilon_{\pm}\mathbf{E}(\mathbf{x}) \quad (\mathbf{x} \in \Omega_{\pm})$$

を満たす $\mathbf{E}$, $\mathbf{H}$ で、 Γ 上の境界条件:

$$\lim_{\mathbf{x}_+ \in \Omega_+ \rightarrow \mathbf{x}_0} \mathbf{E}(\mathbf{x}_+) \cdot \mathbf{t}(\mathbf{x}_0) = \lim_{\mathbf{x}_- \in \Omega_- \rightarrow \mathbf{x}_0} \mathbf{E}(\mathbf{x}_-) \cdot \mathbf{t}(\mathbf{x}_0),$$

$$\lim_{\mathbf{x}_+ \in \Omega_+ \rightarrow \mathbf{x}_0} \mathbf{H}(\mathbf{x}_+) \cdot \mathbf{t}(\mathbf{x}_0) = \lim_{\mathbf{x}_- \in \Omega_- \rightarrow \mathbf{x}_0} \mathbf{H}(\mathbf{x}_-) \cdot \mathbf{t}(\mathbf{x}_0)$$

($\mathbf{t}$: Γ 上の任意の接ベクトル場), $S_P = \{\mathbf{x} \in \mathbf{R}^3; |\mathbf{x}_2| = L_2/2 \text{ or } |\mathbf{x}_3| = L_3/2\}$ における周期境界条件:

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

$$\mathbf{E}(x_1, x_2, L_3/2) = e^{i\beta_3} \mathbf{E}(x_1, x_2, -L_3/2),$$

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

$$\mathbf{H}(x_1, x_2, L_3/2) = e^{i\beta_3} \mathbf{H}(x_1, x_2, -L_3/2)$$

及び散乱波 $\mathbf{E}^{\text{sca}} = \mathbf{E} - \mathbf{E}^{\text{inc}}$, $\mathbf{H}^{\text{sca}} = \mathbf{H} - \mathbf{H}^{\text{inc}}$ に対する放射条件を満たすものを求めるものである。ここに、入射波

Fig. 1 Domains.

$\mathbf{E}^{\text{inc}}$, $\mathbf{H}^{\text{inc}}$ は平面波のみを扱い、複素振幅を $\mathbf{a}^{\text{inc}}$ とすると、 $\mathbf{E}^{\text{inc}}$ は次式で表される。

$$\mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{x}) = \mathbf{a}^{\text{inc}} \exp \left\{ i \left(\mathbf{k}^{\text{inc}} \cdot \mathbf{x} \right) \right\},$$

$$k_i^{\text{inc}} = \beta_i / L_i \quad (i = 2, 3)$$

また、 $\mu_{\pm}, \epsilon_{\pm}$ は $\Omega_{\pm}$ における透磁率と誘電率である。さらに、 $k_{\pm}$ は $\Omega_{\pm}$ での波数 $k_{\pm} = \omega \sqrt{\epsilon_{\pm} \mu_{\pm}}$ である。

2.2. 遠方場

遠方において、考える問題の解 (透過波) は、

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}) = \sum_{q \in Q} \mathbf{a}_q e^{i\mathbf{k}_q \cdot \mathbf{x}} \quad (\mathbf{x}_1 \rightarrow +\infty)$$

に近づく。ここに、 $\mathbf{k}_q$ は回折電場の波数ベクトル:

$$\mathbf{k}_q = \left(\sqrt{k_+^2 - k_{q2}^2 - k_{q3}^2}, k_{q2}, k_{q3} \right), \quad k_{qi} = \frac{2\pi q_i + \beta_i}{L_i},$$

$$q_i \in \mathbb{Z} \quad (i = 2, 3)$$

である。この $\mathbf{k}_q$ が実となる q_i の集合を Q と書く。

$\mathbf{a}_q$ は、任意の定数ベクトル $\mathbf{u}$ と

$$\mathbf{u}' = \mathbf{u} - (\mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{k}}_q) \hat{\mathbf{k}}_q, \quad \hat{\mathbf{k}}_q = \frac{\mathbf{k}_q}{|\mathbf{k}_q|}$$

によって、次式のように計算される。

$$\begin{aligned} a_q \cdot u &= \delta_q^{(0,0)} a^{\text{inc}} \cdot u \\ &+ \frac{1}{2iL_2L_3k_{q1}} \int_{\Gamma} \left\{ (\nabla \times E(x))^+ \cdot (n \times u' e^{-ik_q \cdot x}) \right. \\ &\left. - (n \times E(x))^+ \cdot (\nabla \times u' e^{-ik_q \cdot x}) \right\} ds_x \end{aligned}$$

ここに、 $E(x)^+$ は、領域 Ω_+ から境界 Γ への極限である。

2.3. コスト関数と感度

次の実数値コスト関数 $\mathcal{J}$ を考え、これを最小化する散乱体 Ω_- の形状を決定したい。

$$\mathcal{J} = \frac{1}{2} \mathcal{F}(a_q, \bar{a}_q), \quad q \in Q \quad (1)$$

この問題を勾配法で解くために、式 (1) の形状微分 $d/d\tau$ を計算すると次のようになる：

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{J}}{d\tau} &= \text{Re} \left[\mu_+ \int_{\Gamma} \left\{ \left[\frac{k^2}{\varepsilon} \right] j \cdot \varphi - \left[\frac{1}{\varepsilon} \right] (\nabla_s \cdot j)(\nabla_s \cdot \varphi) \right. \right. \\ &\left. \left. - \left[\frac{k^2}{\mu} \right] m \cdot \psi + \left[\frac{1}{\mu} \right] (\nabla_s \cdot m)(\nabla_s \cdot \psi) \right\} (v \cdot n) ds \right] \end{aligned}$$

ここに

$$\begin{aligned} [[f]] &= f^+ - f^- \quad \text{on } \Gamma \quad j = n \times H, \quad m = E \times n \\ v &= x_{,\tau} \quad \nabla_s = \Gamma \text{ 上の接線微分} \\ \varphi &= P^- \times n, \quad \psi = n \times Q^- \end{aligned}$$

である。さらに、随伴変数 P, Q は、Maxwell 方程式：

$$\begin{aligned} \nabla \times P(x) &= i\omega\mu_{\pm} Q(x), \\ \nabla \times Q(x) &= -i\omega\varepsilon_{\pm} P(x) \quad (x \in \Omega_{\pm}) \end{aligned}$$

の $-\beta_i$ に対する 周期境界条件 (随伴周期境界条件) + 放射条件、及び Γ 上の境界条件：

$$\begin{aligned} [[P \times n]] &= F \times n \\ [[n \times Q]] &= \frac{1}{i\omega\mu^+} n \times (\nabla \times F) \end{aligned}$$

を満たす解である。ここに F は次式で与えられる。

$$F = \sum_{q \in Q} \frac{\exp(-ik_q \cdot x)}{2iL_2L_3k_{q1}} \left(\frac{\partial F}{\partial a_q} - \left(\frac{\partial F}{\partial a_q} \cdot \hat{k}_q \right) \hat{k}_q \right)$$

3. 数値計算法

3.1. 最適化手法

本報では、最急降下法を用いて、境界形状の最適化を行う。目的関数は次式で定義する $\mathcal{H}$ である。

$$\mathcal{H}(\Gamma) = \mathcal{J}(\Gamma) + c\mathcal{K}(\Gamma)$$

ここに、 c は Tikhonov の正則化パラメータであり、 $\mathcal{K}$ として次式 (の近似値) を用いる。

$$\mathcal{K} = \frac{1}{2} \int_{\Gamma} \left(\frac{\nabla_s \cdot n}{2} \right)^2 ds$$

第 n 回目の反復における、節点 i の座標を $x_i^{(n)}$ とすると、 x_i は以下の式で更新される。

$$x_i^{(n+1)} = x_i^{(n)} - \frac{\alpha^{(n)}}{|\nabla_{\tau} \mathcal{H}|} \frac{\partial \mathcal{H}^{(n)}}{\partial \tau_i} v_i^{(n)}$$

ここに、 τ_i は節点 i の移動量 (法線方向と仮定する)、 $\alpha^{(n)}$ は更新における学習率を表す。この反復を $\mathcal{H}$ の勾配が十分小さくなるまで繰り返し実行する。

4. 数値計算例

以下では、 $L_2 = L_3 = 1, \mu_{\pm} = 1$ とする。また、入射波 E^{inc} は、 x_1 - x_2 平面に対して p 偏光 (すなわち $\beta_3 = 0$) とする。

4.1. 感度計算の検証

ここでは、形状パラメータに対する評価関数の感度を提案手法で計算し、その結果が差分による結果と一致するか確かめた。

計算対象は次の通りである。初期形状として、中心 $(0, 0, 0)$ 、半径 0.2 の球を与え、この半径を 10 ステップにわたって $\Delta r = 2.0 \times 10^{-2}$ ずつ増加させた。さらに、 $k_+ = 4.3, \varepsilon_-/\varepsilon_+ = 0.09$ とし、位相差は $\beta_2 = 2.15$ とした。これは E^{inc} が入射角 30deg で x_1, x_2 の正の方向に入射することに相当する。また、この条件下では、 $Q = \{(-1, 0), (0, 0)\}$ である。コスト $\mathcal{J}$ は以下の通りである。

$$\mathcal{J} = \sum_{q \in Q(\omega_i)} \{k(\omega_i)\}_1 |a_q(\omega_i)|^2$$

形状パラメータを球の半径としたとき、随伴変数の方法と中心差分を用いて計算した $\mathcal{J}$ の感度を Fig. 2 において比較した。これらはよく一致している。

Fig. 2 Comparison of sensitivities (solid line: adjoint variable, broken line: finite difference)

4.2. 形状最適化

所望の位置にストップバンドを有する構造を得る為に

$$\mathcal{J} = \sum_{i=1}^{N_f} \sum_{q \in Q(\omega_k)} \{k(\omega_i)\}_1 |a_q(\omega_i)|^2 W_i$$

の形のコストを考える。ここに、 N_f は考える周波数の個数であり、 W_i は、周波数 ω_i における重みを表す。

ここでは入射角を 30deg に固定し, 5 個の周波数 ω_i と重み W_i をそれぞれ $\omega_1 = 6.1$, $W_1 = -1.0$, $\omega_2 = 6.2$, $W_2 = 1.0$, $\omega_3 = 6.3$, $W_3 = 1.0$, $\omega_4 = 6.4$, $W_4 = 1.0$, $\omega_5 = 6.5$, $W_5 = -1.0$ とした. なお Ω_+ は真空とし, Ω_- の誘電率 ϵ_- には Drude model で計算される金属 (Au) の誘電率を与えた. 正規化パラメータは $c = 5 \times 10^{-4}$ とし, 散乱体の初期形状は半径 0.2 の球とした.

最適化計算の反復回数が 50 回となったときの散乱体形状を Fig. 3 に, また, この形状と初期形状に対して, 対象の帯域 $6.1 \leq \omega \leq 6.5$ について順解析を行い, 得られた周波数と透過エネルギーの関係を図 4 に示す.

その他の結果は当日発表する。

Fig. 3 Optimal shape (after 50 iterations)

Fig. 4 Energy transmittances for the initial shape and the optimal shape (broken line: initial shape, solid line: optimal shape)

参考文献

- (1) Y. Otani and N. Nishimura: A periodic FMM for Maxwell's equations in 3D and its applications to problems related to photonic crystals, J. Comp. Phys., 227, pp.4630-4652, 2008.