C114

情報可視化技術を使った フォトリック結晶ナノ共振器の構造最適化

田中 哲平[○], 山崎 晃, 田中 良典, 小山田 耕二, 野田 進 (京都大学)

Structure Optimization of Photonic Crystal Nanocavities using Information Visualization

Teppei TANAKA, Akira YAMASAKI, Yoshinori TANAKA, Koji KOYAMADA and Susumu Noda

ABSTRACT

In this study, we optimized the structure of photonic crystal nanocavities using information visualization technique. Hierarchical Response Surface Methodology (hRSM) which is used in our optimization system can search optimized parameter with high accuracy. On the other hand, hRSM has a problem that it takes a lot of computational cost. To solve this problem, we reduce parameter space interactively using information visualization. We developed framework and applied to structure optimization problem, and got 14.85 times as high Q value as conventional photonic crystal nanocavities'.

Keywords: Information Visualization, optimization

1. 結 論

計算機やシミュレーション技術の発達に伴い、最適化技術で扱うべきパラメータ空間は複雑さを増しつつある。そのため、多数の局所解の中から大域的な最適解を効率よく探索することが求められるようになってきている。最適化技術の一つに、応答曲面法^[1] (RSM: Response Surface Methodology) がある。RSM は回帰分析の一種で、メタモデルを用いた最適化手法である。二次多項式を用いた RSM は計算コストが低いという利点があるが、複雑な解空間に対応できないという問題がある。この問題に対応するために、Koyamada ら^[2]は、応答曲面の決定係数を利用して再帰的にパラメータ空間を分割し、それぞれの分割空間で応答曲面を再構築する「階層型応答曲面法 (hRSM: hierarchical RSM)」を提案した。RSM に比べて、hRSM の場合は、計算結果として出力される目的関数への適合度 (決定係数) を利用し、分割の基準をうまく設定することができる点が優れている。また、適用するための設定すべきパラメータが決定係数の閾値のみであるため、解空間の形状によらず最適解を探索することが可能である。

しかし、Koyamada らの方法では、パラメータ空間の分割の基準が最適解の存在確率の高さではなく、目的関数への適合度に依存しており、最適解が存在しないパラメータ空間を探索してしまうため、計算コストが高くなるという問題があった。本研究では、この問題を解決するために、情報可視化技術を用いて対話的に探索領域の絞り込みを行うことで、計算コストを削減するシステムを提案する。また、フォトリック結晶ナノ共振器にお

ける高 Q 値化のための構造設計最適化のフレームワークを開発し、その有用性を検証した。

2. 情報可視化技術を用いた階層型応答曲面法

2.1 階層型応答曲面法

階層型応答曲面法はパラメータ空間を再帰的に分割し、分割された空間で応答曲面を再構築する最適化手法である。パラメータ空間の分割の判断には、応答曲面の近似精度を表す決定係数の値を用いる。全パラメータ空間で決定係数の値がユーザの指定する閾値を満たすまで、分割を繰り返す。分割する場合、各軸を 2 等分する。最小値探索を前提とした場合の階層型応答曲面法のアルゴリズムは以下ようになる。

Step1 最適化すべきパラメータとその値の範囲を決定する。

Step2 最適化を行うパラメータ空間において、実験計画法に基づいて設計点を決定する。応答曲面を構築するためには、パラメータの数を n 個とすると、 $p=n+n(n+1)/2$ 個以上の設計点が必要となる。

Step3 Step2 で設計した各点における目的関数の応答値を計算する。

Step4 Step3 で求めた応答値から応答曲面を構築する。このとき、同時に決定係数の値も計算する。得られた決定係数の値が、ユーザの指定した閾値を満たしていれば、このパラメータ空間における探索は終了とし、Step6 へ進む。決定係数の値が閾値を満たしていなければ、Step5 へ進む。

Step5 パラメータ空間を等分割し、Step2 へ戻る。 n 変数の場合、パラメータ空間は 2^n に分割される。

Step6 構築した応答曲面から最小値を求める。

Step7 全節点における最小値を比較し、大域的な最小値を決定する。

Fig.1 Algorithm of hierarchical RSM

2.2 情報可視化を用いた階層型応答曲面法

情報可視化技術を用いて対話的に最適化を行うことで、階層型応答曲面法の計算コストが削減させている。情報可視化技術を用いた階層型応答曲面法の最適化アルゴリズムは以下である。

Step1 基本となる機構増データを構築する

Step2 木構造データをスクリーン上へ表示する

Step3 大域的最適解を判定する

Step4 探索すべき葉ノードを選択し、Step2へ戻る

Fig.2 Algorithm of hRSM using Information Visualization

2.3 情報可視化を用いた階層型応答曲面法

本提案システムで使用する情報可視化技術において、

Fig.3 Guidelined for user's selection

決定係数の値と局所解の有無を色で、閾値を満たしたかどうかを彩度で、目的関数の値を高さで表現した。局所解の有無はヘッセ行列の正定性判定で決定している。また、高さは相対的な値で、動的に変化する。表示されるノードを以下の8つのタイプに分類し、ユーザのためのガイドラインを設けた。

1. 赤一低ノード

決定係数の値が高く、高さの低い局所解を持つことから、域的最低解である可能性がある。そのため、明るくない（閾値を満たしていない）場合、最小値がほぼ変わらなくても、探索する価値がある。明るい赤色の場合、閾値を満たしているため、さらなる探索は必要ない。

2. 黄一低ノード

決定係数の値が十分に良いとは言えないが、応答曲面が局所解を持っていることを表している。さらに探索することで赤一低ノードになりうるため、さらに探索する価値は高い。

3. 緑一低ノード

決定係数の値が高いことから応答曲面の形状が変わる可能性は低く、局所解を持っていないため、高さが低いとはいえさらに探索する必要性は低い。しかし、そのノードよりも高さの低い、明るい赤一低ノードが存在しない場合、最も低い領域に大域的最低解が存在すると思われるため、決定係数の値が高いといえどもそのノードは探索した方がよい場合がある。

4. 青一低ノード

決定係数の値が十分に良いとは言えないため、さらに探索を行うことで応答曲面の形状が変化する可能性が高い。高さが低いことから、赤一低ノードとなる可能性があるため、さらなる探索を行う必要性は高い。

5. 赤一高ノード

決定係数の値が高いため、さらに探索を行っても最小値が変化する可能性は低い。高さが高いことから、大域解とはなり得ない局所解であることを示している。したがって、明るさに関わらず探索を行う必要性は低い。

6. 黄一高ノード

決定係数の値は十分に良くないため、さらに探索を続けることで赤一低ノードになる可能性はある。しかしな

がら、高さが高いため、局所解ではあっても大域解となる可能性は低い。したがって、全体を見ながら、探索をするかどうかを決定する必要がある。

7. 緑-高ノード

決定係数の値が高いことから、応答曲面の形状が変わる可能性は低く、局所解を持つ可能性は低い。高さも高いため、さらに探索を続けても大域解とはなり得ない。したがって、さらに探索を行う必要性は低い。

8. 青-高ノード

決定係数の値が十分に良くないため、さらに探索を続けければ、赤-低ノードになる可能性はある。しかしながら、高さが高いため、全体を見ながら探索を行えば良い。

4. 実験

4.1 フォトニック結晶光ナノ共振器

フォトニック結晶とは、光の波長と同程度の周期的な屈折率分布を持つ光ナノ構造のことである。周期が光の波長程度の場合には、特定波長域の光を遮断するフォトニックバンドギャップをもつことが最大の特長である。この光の絶縁体としての特長を利用することで、逆に周期を乱した極微小な部分にだけ光を通したり閉じ込めたりすることが可能となる。この特性を利用して、光ナノ共振器が作製されている。

ここで、共振器の光閉じ込めの強さを表す指標である Q 値は、以下の式(1)によって定義される。

$$Q = \omega_0 U / (-dU/dt) \quad (1)$$

ここで、 ω_0 は共振角周波数、 U は共振器内の内部エネルギーである。式(1)から分かるように、 Q 値は共振器からのエネルギー損失の少なさを示す指標である。 Q 値を上げるとは、超小型かつ高性能のフィルタや超高感度センサ、光メモリなど様々な応用の道が開けるといって非常に重要である。

波長程度の厚みの誘電体からなるスラブ（薄板）構造に2次元フォトニック結晶を形成する構造を利用すると、面内方向はフォトニックバンドギャップにより、面垂直方向は屈折率差による全反射により光が閉じ込められる。この2次元フォトニック結晶スラブを元に、図3に示す

Fig. 3 Diagram of double-heterostructure photonic nanocavity

マルチステップヘテロ構造を形成すると、実験的に 250 万という非常に高い Q 値を示すことがわかっている^[9]。しかしながら、フォトニック結晶設計においては、FDTD 法によるシミュレーション技術が使われるようになったが、計算コストが高いため詳細な最適化が行われていなかった。本研究では、空気孔間距離を最適化対象として、 Q 値を最大化することを目的とする。

Table 1 Common parameters of the experiments

cell size	0.1a×0.1a×0.1a
number of cells	150 ×150×100
time step	0.05 [c/a]
slab size	13.5a×13.5a×0.6a
radius of holes	0.29a
distance between holes	a
permittivity of slab	11.56
permittivity of vacuum	1.0

4.2 実験手法

本研究では、図4のようなスラブのモデルを作成した。スラブのサイズは 13.5a×13.5a×0.6a である。図5に示したシミュレーションモデルを用いて3次元FDTD法によるシミュレーションを行い、その結果をもとに Q 値を最大にするための最適化を行った。本実験で用いたパラメータを表1に示す。表1において、 a は格子定数 (420nm)、 c は光速 (3.0×10^8 m/s) を表している。最適化対象としたのは、ヘテロ構造を実現する空気孔間距離 x_1 、 x_2 である (図3)。このとき、探索領域を $0.9a < x_{1,2} < 1.0a$ とした。このような解析領域に対して、縦横方向に中心部からそれぞれ 0.1a ずらした点の H_z を以下の式(2)を用いて励振させた。

$$p(\tau) = \begin{cases} e^{-\alpha(\tau-\tau_0)^2} \cos(\omega_c(\tau-\tau_0)) & (0 \leq \tau \leq 2\tau_0) \\ 0 & (\text{その他}) \end{cases} \quad (2)$$

ここで、

$$\alpha = \frac{(-\Delta f_{width} \times \pi)^2}{\ln(1/2)}, \quad \tau_0 = \sqrt{\frac{-\ln(0.0001)}{\alpha}} \quad (3)$$

$$\omega_c = 2\pi f_0$$

である。式(3)中における Δf_{width} (周波数) はガウス関数の半値半幅(スペクトル強度が半になる周波数幅の半分)であり、式(5)中の f_0 は中心周波数である。スラブに対して中心周波数を $f_0=0.264$ とした。導電率は全域において 0 とし、時間ステップ 0.05[c/a] として 20000 ステップまで計算を行った。図5に本実験における計算モデルを示す。本実験では、 H_z 方向に励振させたため、計算モデルの中心部における H_z 方向の大きさを測定した。

設計点 (x_1, x_2) における応答値として、図 6 に示す包絡線における 10000~20000 ステップでの傾きの逆数の絶対値を取った。図 6 は共振器内における磁界の変化を表しており、タイムステップごとの Hz の常用対数を示している。式 (2) よりこの傾きは Q 値に半比例するため、 Q 値を最大化するためには傾きの逆数の絶対値を最小化すればよい。そこで、この応答値の最小化問題として、最適化を行った。なお、サンプリング点は格子状に 5×5 点ずつ取った。また、閾値は 0.95 とした。

Fig. 4 Diagram of slab

Fig. 5 Simulation model. The center of the slab is coincident with the center of the analytic area. The analytic area is surrounded with Mur's second-order absorbing boundary.

Fig. 6 Time variation of Hz in nanocavity

5. 結果と考察

提案システムを用いて計算を行った結果、図 7 のようになった。このときの最小値を表 2 に示す。 $(a, b) = (0.9719, 0.9563)$ のとき、傾きの最小値 -140142 を得た。これは従来達成した Q 値の最大値の 14.85 倍である。図 7 において、最小値を持つノードの決定係数は閾値を

満たしておらず、また局所解を持っていないことを示しているため、さらに掘り下げて探索する必要があるように思われる。しかし、実際のフォトニック結晶の作製精度においては十分であると考えられるため、この段階で探索を打ち切った。今後、実際にフォトニック結晶ナノ共振器を作製し評価することで、この結果が適切であることを検証する必要がある。

Table 2 Result of the experiments

	(a,b)	(x_1, x_2)	Response
Conventional parameter	(0.9875, 0.9750)	(415, 410)	-9434
Optimized Parameter	(0.9719, 0.9563)	(408.2, 401.6)	-140142

Fig. 7 Result of proposed technique using information visualization. The node in white circle has the global minimum.

6. 結論

本論文では、情報可視化を用いたフォトニック結晶ナノ共振器の高 Q 値化のための構造設計最適化フレームワークを開発した。空気孔間距離を対象とした高 Q 値化の最適化問題において、従来の 14.85 倍の結果を得た。今後、スラブの厚みなど最適化対象とするパラメータの数を増やすことを検討中である。この結果、ノードの数が指数関数的に増大することが予測されるため、ユーザーへの提示方法を工夫する予定である。

参考文献

- 1) Raymond H Myers and Douglas C. Montgomery : Response Surface Methodology, John Wiley & Sons. Inc (1995)
- 2) K. Koyamada, K. Skai, T. Itoh : Parameter Optimization Technique Using The Response Surface Methodology, 26th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society pp. 2909-2912 (2004).
- 3) Y. Takahashi, H. Hagino, Y. Tanaka, B. S. Song, T. Asano, and S. Noda : "High- Q nanocavity with a 2-ns photon lifetime", Optics Express, Vol. 15, No. 25, pp. 17206-17213 (2007).