

レベルセット法に基づく誘電体メタマテリアルのトポロジー最適化*

Level set-based topology optimization method for the design of dielectric metamaterials

乙守正樹¹, 山田崇恭², 泉井一浩¹, 西脇眞二¹, Jacob ANDKJÆR³, Ole SIGMUND³

Masaki OTOMORI, Takayuki YAMADA, Kazuhiro IZUI, Shinji NISHIWAKI,
Jacob ANDKJÆR and Ole SIGMUND

¹ 京都大学大学院工学研究科 (〒606-8501 京都府京都市左京区吉田本町)

² 名古屋大学大学院工学研究科 (〒464-8603 愛知県名古屋市千種区不老町)

³ デンマーク工科大学機械工学科 (Nils Koppels Allé, DK-2800 Kgs. Lyngby, Denmark)

Electromagnetic metamaterials are artificial materials with extraordinary physical properties not available in nature, such as a negative refractive index, that is, negative permittivity and permeability. This paper proposes a level set-based topology optimization method for the structural design of negative permeability dielectric metamaterials. The purpose of the optimization problem is to find the optimal layout of dielectric metamaterials that achieves negative permeability. The presence of grayscale areas in the optimal configurations significantly affects the performance of metamaterials. However these grayscale areas are impractical to manufacture, so an optimization method in which the boundaries of optimal configurations are clearly expressed is desirable, such as those provided by topology optimization methods utilizing level set-based boundary expressions. In this paper, first, the level set-based topology optimization method is explained, and the optimization problem that addresses the design of negative permeability dielectric metamaterials is then formulated. Finally, several numerical examples are provided to confirm the utility and validity of the proposed method.

Key Words: Optimal Design, Topology Optimization, Level Set Method, Electromagnetic Metamaterials, Sensitivity Analysis, Adjoint Variable Method

1. 緒 言

メタマテリアルは自然界に存在する媒質が通常持たないような電磁的性質を示すように設計された人工媒質⁽¹⁾である。代表的なメタマテリアルには、負の屈折率, すなわち, 負の誘電率と負の透磁率を持つ媒質がある。この負の屈折率を持つメタマテリアルは, Veselago⁽²⁾により最初にその存在が示され, Pendry et al.⁽³⁾⁽⁴⁾とSmith et al.⁽⁵⁾により, ある特定の周波数に対して, 負の誘電率を示す分割リング共鳴器と負の透磁率を示す金属ワイヤで構成される周期構造が負の屈折率を示すことが実験により示された。その実証結果

を発端に, 短波長化⁽⁶⁾や実用化などに関する多くの研究が行われており, クローキング装置⁽⁷⁾, スーパーレンズ⁽⁸⁾, 広角ビームアンテナ⁽⁹⁾, 環境発電装置⁽¹⁰⁾等さまざまな装置への応用も検討されている。さらには近年では, 金属材料を用いず, 誘電体材料のみで負の特性を実現する誘電体メタマテリアルが提案されており⁽¹¹⁾⁽¹²⁾, 製造の容易性や等方性, 広帯域などの特長をもつことにより, その実現が期待されている。

通常, メタマテリアルは対象とする波長と比べて十分小さいユニットセルの周期構造から構成されている。その周期構造の集合体は, 大域的な観点からは, 電磁的な連続媒質とみなすことができ, 全体として負の特性を示す媒質として振る舞う。その均質的な特性を求める方法として, S行列の係数から求める方法^{(13)~(16)}やユニットセル内の場を平均化して求める方法⁽¹⁷⁾が提案されており, それらの方法に基づきメタマテリアルの形状設計が行われている。

メタマテリアルの性能は, ユニットセルの形状や大

* 原稿受付 2011 年 08 月 19 日, 改訂年月日 2011 年 12 月 13 日, 発行年月日 2012 年 1 月 6 日。©2011 年 日本計算工学会。 Manuscript received, August 19, 2011; final revision, December 13, 2011; published, January 6, 2012. Copyright ©2011 by the Japan Society for Computational Engineering and Science.

きさにより大きく左右される⁽⁶⁾。現在までに、より高性能なメタマテリアルとして、様々なユニットセルの形状のものが提案されているが、その形状設計は多くの場合、設計者の勘や経験に基づいた試行錯誤に基づいており、最適化手法など数学的および力学的な根拠に基づいた統一的な設計手法は確立されていないのが現状である。

これらの課題を解決する方法として構造最適化手法の適用が考えられる。Zhou et al.⁽¹⁸⁾⁽¹⁹⁾ は、レベルセット法に基づいた形状最適化手法⁽²⁰⁾⁽²¹⁾を用いて、メタマテリアルの最適設計手法を構築し、ユニットセルの金属材料の最適構造を得ている。これらの方法では、スカラー関数であるレベルセット関数のゼロ等位面により物体の外形形状を陰的に表現し、最適構造を求める。しかしながら、ハミルトンヤコビ方程式によるレベルセット関数の更新に基づいた方法のため、外形形状のみを変動させるようにレベルセット関数を更新し最適構造を得ることになり、設計領域内の穴の数が増えるような形態の変化を許容しないので、高性能なメタマテリアルの形状案を得るには問題をもつ。

他方、構造の外形形状だけでなく穴の数などの形態の変更も可能な設計自由度の高い方法として、トポロジー最適化⁽²²⁾⁽²³⁾が提案されている。トポロジー最適化には、均質化法に基づく手法⁽²²⁾やSIMP (Solid Isotropic Material with Penalization) 法⁽²³⁾などがあり、現在までに、剛性最大化問題⁽²⁴⁾や振動問題⁽²⁵⁾、電磁波伝搬問題⁽²⁶⁾など様々な設計問題に適用され、近年では、メタマテリアルの設計問題にも展開されている⁽²⁷⁾⁽²⁸⁾。トポロジー最適化の基本的な考え方は、構造最適化問題を指定した設計領域内における材料分布問題へ置き換えることにある。従来の方法では、基本的には0から1までの値をとる連続した密度を用いて最適な材料分布、すなわち最適構造を表現するため、その密度が中間値をとる、いわゆるグレースケールを許容することになる。しかし、グレースケールで構成される構造は、数学的および物理的な解釈は可能であるものの、実際には製造が困難であるため、工学的には意味を持たない構造と言える。そのためフィルタに基づく方法⁽²⁹⁾⁽³⁰⁾などでグレースケールを除去する方法が提案されているものの、メタマテリアル設計問題では、グレースケールが性能を大きく左右しており、これらの手法を用いて性能を確保しながらグレースケールを除去することは難しい⁽²⁷⁾。

このグレースケールの問題を抜本的に解決可能な方法として、近年、レベルセット法による形状表現に基づくトポロジー最適設計手法が提案されている。この方法では、レベルセット関数のゼロ等位面により物体の外形形状を陰的に表現するため、上述のグレースケールを本質的に除去できる特長をもつ。山田らは、区分的に一定値となるレベルセット関数を用いて、チコノフ正則化により最適化問題の正則化を行い、反応拡散方程式を解く問題へ置き換える方法を提案している

⁽³¹⁾⁽³²⁾。この方法では、穴の数が増加するような形態の変更が可能であり、さらには正則化の度合いを設定することにより、最適構造の複雑さを定性的に設定することが可能である。この方法は現在までに、剛性最大化問題や振動問題、熱拡散問題⁽³³⁾などに適用されているが、メタマテリアル設計問題に適用した事例は報告されていない。

そこで、本研究では、レベルセット法を用いて、明確な形状表現が可能な誘電体メタマテリアルの最適設計手法を構築する。すなわち、山田ら⁽³¹⁾⁽³²⁾の方法に基づき、負の透磁率を実現する誘電体メタマテリアルの最適設計手法を構築する。以下、2章ではレベルセット法による形状表現を用いたトポロジー最適化手法の概略を述べ、誘電体メタマテリアルの最適設計問題の定式化を行う。3章では、前章の定式化に基づき電磁場の解析とレベルセット関数の更新に有限要素法を用いた数値実装法を提案する。最後に、本報で提案する手法を、誘電体メタマテリアルの最適設計問題に適用し、その妥当性と有効性を検証する。

2. 定式化

2.1 レベルセット法による形状表現を用いたトポロジー最適化 ここでは、レベルセット法による形状表現を用いたトポロジー最適化⁽³¹⁾⁽³²⁾について、概略を述べる。物体領域 Ω と空洞領域で構成される固定設計領域 D における構造最適化を考える。レベルセット法による形状表現を用いたトポロジー最適化では、図1に示すように、固定設計領域 D 内の物体領域 Ω と境界 $\partial\Omega$ を、レベルセット関数 $\phi(\mathbf{x})$ を用いて陰的に表現する。すなわち、次式に示すように、物体領域 Ω と境界 $\partial\Omega$ を、レベルセット関数の等位面を用いて表現する。

$$\begin{cases} 0 < \phi(\mathbf{x}) \leq 1 & \text{if } \forall \mathbf{x} \in \Omega \setminus \partial\Omega \\ \phi(\mathbf{x}) = 0 & \text{if } \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega \\ -1 \leq \phi(\mathbf{x}) < 0 & \text{if } \forall \mathbf{x} \in D \setminus \Omega \end{cases} \quad (1)$$

次に、式(1)のレベルセット関数による形状表現を用いると、構造最適化問題は、以下のように記述される。

$$\begin{aligned} \inf_{\phi} \quad & F(\chi_{\Omega}(\phi)) = \int_D f(\mathbf{x})\chi_{\Omega}(\phi)d\Omega \\ \text{subject to} \quad & G(\chi_{\Omega}(\phi)) = \int_D \chi_{\Omega}(\phi)d\Omega - V_{\max} \leq 0 \end{aligned} \quad (2)$$

ここで、 F は目的汎関数、 G は体積制約に関する制約汎関数、 $V_{\max}$ は許容される体積の上限値、 $\chi_{\Omega}(\phi)$ は以下の式で定義される特性関数である。

$$\chi_{\Omega}(\phi) = \begin{cases} 1 & \text{if } \phi \geq 0 \\ 0 & \text{if } \phi < 0 \end{cases} \quad (3)$$

上述の最適化問題では、レベルセット関数 $\phi(\mathbf{x})$ が固定設計領域 D 内の至る所で不連続となることを許容している。そのため、最適化問題を何らかの方法で正則化

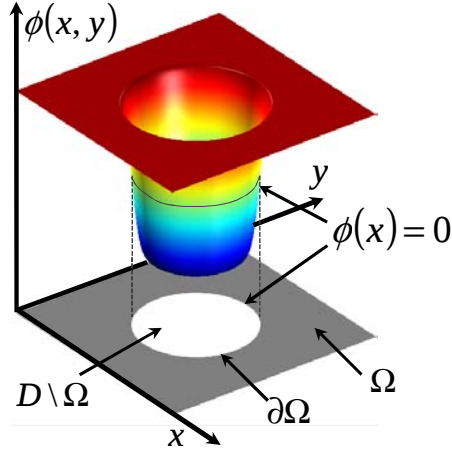


Fig.1 Fixed design domain D and level set function ϕ

する必要がある．本研究では，山田らの方法⁽³¹⁾⁽³²⁾に基づき，チコノフの正則化法を用いて最適化問題の正則化を行う．

$$\begin{aligned} \inf_{\phi} F_R(\chi_\Omega, \phi) &= \int_D f(\mathbf{x})\chi_\Omega d\Omega + \int_D \frac{1}{2}\tau|\nabla\phi(\mathbf{x})|^2 d\Omega \\ \text{subject to } G(\chi_\Omega) &= \int_D \chi_\Omega d\Omega - V_{\max} \leq 0, \end{aligned} \quad (4)$$

ここで， τ は正則化の度合いを示すパラメータである．次に，この最適化問題をラグランジェ未定乗数法を用いて無制約問題に置き換える．すなわち，最適化問題は以下の式で表される．

$$\begin{aligned} \inf_{\phi} \bar{F}_R(\chi_\Omega, \phi) &= \int_D f(\mathbf{x})\chi_\Omega d\Omega + \lambda G \\ &+ \int_D \frac{1}{2}\tau|\nabla\phi|^2 d\Omega, \end{aligned} \quad (5)$$

ここで， $\bar{F}_R$ はラグランジェアン， λ はラグランジェ未定乗数を表す．

さらに上式の定式化を用いて仮想的な時間 t を導入し，最適化問題を時間発展方程式を解く問題に置き換える．すなわち，次式に示すように，レベルセット関数の変動がラグランジェアンの変分 $\bar{F}'_R$ に比例するものと仮定し，時間発展方程式を導出する．

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = -K(\phi)\bar{F}'_R, \quad (6)$$

ここで， $K(\phi) > 0$ は比例定数を表す．式(5)を式(6)に代入し，境界条件として，物体領域に予め指定されている境界にはディリクレ境界条件を与え，それ以外の境界には，固定設計領域外部からの干渉がないことを表現するため，ノイマン境界条件を与える．以上より，次式の反応拡散方程式が得られる．

$$\begin{cases} \frac{\partial\phi}{\partial t} = -K(\phi)\left(-\frac{d\bar{F}}{d\chi_\Omega} - \tau\nabla^2\phi\right) \\ \frac{\partial\phi}{\partial n} = 0 \\ \phi = 1 \end{cases} \quad \begin{matrix} \text{on } \partial D \setminus \partial D_N \\ \text{on } \partial D_N, \end{matrix} \quad (7)$$

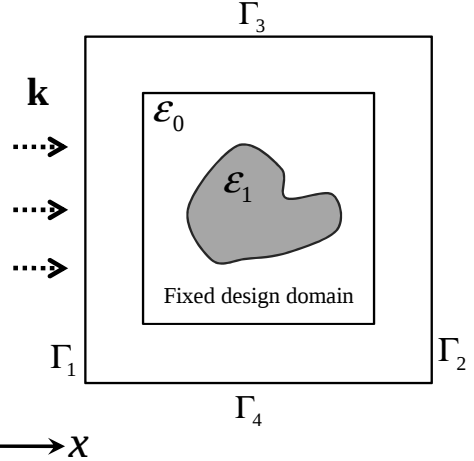


Fig.2 Fixed design domain and boundary conditions

ここで， $\bar{F} = F + \lambda G$ とした．上式の反応拡散方程式を解くことにより，最適構造を表すレベルセット関数を求める．ここでは，上式において $\bar{F}$ の感度をトポロジカルデリバティブとして考えると仮定している．すなわち， $\bar{F}$ の感度は，特性関数 χ_Ω に関して求めた感度 $d\bar{F}/d\chi_\Omega$ となる⁽³¹⁾⁽³⁴⁾⁽³⁵⁾．また，式(7)を解いた後の ϕ は必ずしも $-1 \leq \phi \leq 1$ の制約を満たさないため，最適計算の各ステップにおいて，式(7)を解いた後に $-1 \leq \phi \leq 1$ となるよう ϕ の修正を行っている．詳細は文献⁽³¹⁾を参照されたい．

2.2 誘電体メタマテリアル設計問題 ここでは，負の有効透磁率を実現する誘電体メタマテリアルの二つの設計問題について考える．まず，メタマテリアルの有効透磁率をできるだけ小さな負の値にする場合を考える．この場合，有効透磁率を最小化させるユニットセルを求める最適設計問題として定式化される．これに対して，クロージング装置などの設計においては，有効透磁率をある所望の値に設計することが必要となる．この場合，所望の有効透磁率を示すユニットセルを求める設計問題として定式化される．

図2に設計領域と境界条件を示す．図に示したように，設計領域はメタマテリアルのユニットセルとし，有効透磁率の最小化・適正化を考えるため，設計領域の左側よりTM波が入射するものとし，上下境界は，周期構造となるように，周期境界条件を用いた．このとき支配方程式は，マクスウェル方程式を，電場および磁場が時間因子 $e^{j\omega t}$ を持つとして，周波数領域に展開した次式の二次元のヘルムホルツ方程式となる．ここで， j は虚数単位， ω は角周波数， t は時間である．

$$\nabla \cdot (\epsilon_r^{-1} \nabla H_z) + k_0^2 H_z = 0 \quad (8)$$

上式において， ϵ_r は比誘電率， H_z は z 方向の磁場を表す．また， k_0 は自由空間での波数を表し，空気中の誘電率 ϵ_0 と透磁率 μ_0 を用いて， $k_0 = \omega\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$ で表され

る．さらに，物体領域，空洞領域の比透磁率を1とした．境界条件は以下の式で与えられる．

$$\mathbf{n} \cdot \nabla H_z + jk_0 H_z = 2jk_0 H^i \quad \text{on } \Gamma_1 \quad (9)$$

$$\mathbf{n} \cdot \nabla H_z + jk_0 H_z = 0 \quad \text{on } \Gamma_2 \quad (10)$$

$$H_z|_{\Gamma_3} = H_z|_{\Gamma_4}, \quad (11)$$

ここで， $\mathbf{n}$ は法線ベクトル， H^i は入射磁場を表す．なお，式(9)(10)の境界条件は，Murの1次吸収境界条件である．一般的には，PML吸収境界条件が精度が良いことが知られているが，実装の容易性と計算コストの面からここでは上式の境界条件を用いた．

2.3 有効透磁率の算出方法 ここでは，平均化された材料特性を求めるための有効パラメータ算出手法について述べる．現在までに，いくつかの方法論が提案されており，大別すると，S行列の係数から求める方法^{(13)~(16)}やユニットセル内の場を平均化して求める方法⁽¹⁷⁾に分けられる．S行列の係数から求める方法では，S行列の係数である複素反射率と複素透過率より有効誘電率と有効透磁率を求める方法で，Smith et al.⁽¹³⁾により提案され，その後，不均一なユニットセルを取り扱えるように拡張されている⁽¹⁴⁾．Chen et al.⁽¹⁵⁾は，Smith et al.⁽¹³⁾の方法に基づき屈折率の実部の符号が一意に定まる方法を提案している．また，Lubkowski et al.⁽¹⁶⁾は，誘電率と透磁率の波形をドルーデモデルとローレンツモデルと仮定し，その係数を調整することで，有効誘電率と有効透磁率を求める方法を提案している．これに対して，ユニットセル内の場を平均化して求める方法⁽¹⁷⁾では，ユニットセル内で積分形のマクスウェル方程式を用いて，電束密度と電場，磁束密度と磁場の関係より，有効誘電率と有効透磁率を求めている．本研究では，実装の容易性と，対称な最適構造を得ることを目的としてSmith et al.⁽¹⁴⁾の定式化に基づき有効透磁率を算出する．すなわち，有効透磁率 μ_{eff} は以下の式で求められる．

$$\mu_{\text{eff}} = Zn \quad (12)$$

ここで， Z はインピーダンス， n は屈折率を表し以下の式で与えられる．

$$Z = \sqrt{\frac{(1+S_{11})(1+S_{22})-S_{21}^2}{(1-S_{11})(1-S_{22})-S_{21}^2}} \quad (13)$$

$$n = \cos^{-1} \left(\frac{\beta}{2S_{21}} \right) \frac{\lambda}{2\pi d} \quad (14)$$

さらに， β は以下の式で与えられる．

$$\beta = 1 + S_{11}S_{22} - S_{21}^2. \quad (15)$$

ここで， S_{11} ， S_{21} ， S_{22} は以下の式で与えられる．

$$S_{11} = \frac{\int_{\Gamma_1} (\mathbf{E}_1 - \mathbf{E}_1^i) \cdot \mathbf{E}_1^i d\Gamma}{\int_{\Gamma_1} \mathbf{E}_1^i \cdot \mathbf{E}_1^i d\Gamma} \quad (16)$$

$$S_{21} = \frac{\int_{\Gamma_2} \mathbf{E}_1 \cdot \mathbf{E}_1^i d\Gamma}{\int_{\Gamma_2} \mathbf{E}_1^i \cdot \mathbf{E}_1^i d\Gamma} \quad (17)$$

$$S_{22} = \frac{\int_{\Gamma_2} (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_2^i) \cdot \mathbf{E}_2^i d\Gamma}{\int_{\Gamma_2} \mathbf{E}_2^i \cdot \mathbf{E}_2^i d\Gamma} \quad (18)$$

ここで， $\mathbf{E}_1$ は境界 Γ_1 に電場 $\mathbf{E}_1^i$ を入射したときに得られる電場ベクトルで， $\mathbf{E}_2$ は境界 Γ_2 に電場 $\mathbf{E}_2^i$ を入射したときに得られる電場ベクトルである．また， S_{11} は境界 Γ_1 に電場 $\mathbf{E}_1^i$ を入射したときの境界 Γ_1 における反射係数であり， S_{21} は境界 Γ_1 に電場 $\mathbf{E}_1^i$ を入射したときの境界 Γ_1 から境界 Γ_2 への透過係数， S_{22} は境界 Γ_2 に電場 $\mathbf{E}_2^i$ を入射したときの境界 Γ_2 における反射係数である．

TM波伝搬問題の場合， $E_z = H_x = H_y = 0$ であり，さらにマクスウェル方程式のアンペアの法則 $\nabla \times \mathbf{H} = -\partial(\epsilon \mathbf{E})/\partial t$ において，電場 $\mathbf{E}$ が時間因子 $e^{j\omega t}$ を持つとして，周波数領域に展開した式より得られる，以下の $\mathbf{E}$ と $\mathbf{H}$ の関係式，

$$E_x = \frac{-1}{j\omega\epsilon} \frac{\partial H_z}{\partial y} \quad (19)$$

$$E_y = \frac{1}{j\omega\epsilon} \frac{\partial H_z}{\partial x} \quad (20)$$

を用いて，式(8)の支配方程式を解いて得られた H_z より $\mathbf{E}$ を求め，式(16)-(18)を用いてSパラメータを算出する．したがって， S_{ij} は H_z の汎関数 $S_{ij}(H_z)$ となる．

なお，式(12)-(15)の有効透磁率の定式化では， S_{11} ， S_{21} に加え S_{22} を用いて， S_{11} と S_{22} に対して，対称となるように定式化を行うことで，対称な最適構造が得られるよう拡張をしている⁽¹⁴⁾ことを注記する．

2.4 有効透磁率最小化問題 ここでは，有効透磁率を最小化する問題を考える．この場合，所望の周波数において有効透磁率の実部を最小化する必要がある．図3(a)に，一般的な有効透磁率の周波数特性を示す．ここで，図中の μ' と μ'' はそれぞれ有効透磁率の実部と虚部を表す．図に示すように，有効透磁率の実部には共振ピークが存在し，その反共振ピークで有効透磁率が最小となり負の有効透磁率が実現可能となる．しかしながら，初期構造における共振周波数が，その反共振周波数と目標周波数の間にある場合，すなわち図3(a)の例においては，目標周波数が共振周波数より低い場合，有効透磁率の実部を直接目的関数に設定すると，目的関数が増加する方向にはレベルセット関数が更新されないため，反共振周波数が目標周波数と一致する方向に最適化計算が進まず，最適構造を求めることが困難となる．例えば，図3(b)に示すように，目標周波数を図の点線で示す周波数と設定し，有効透磁率の実部を直接最小化させる事を考える．この場合，図に示すように，正のピークが左側に移動すれば有効透磁率の実部が減少するため，正のピークが左に移動す

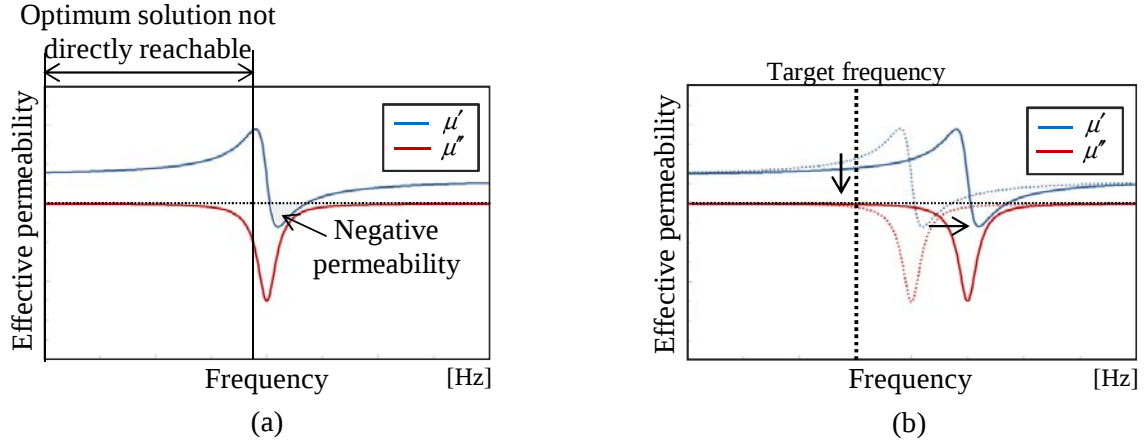


Fig.3 (a) A typical effective permeability curve; (b) effective permeability curve when real part of effective permeability is minimized directly

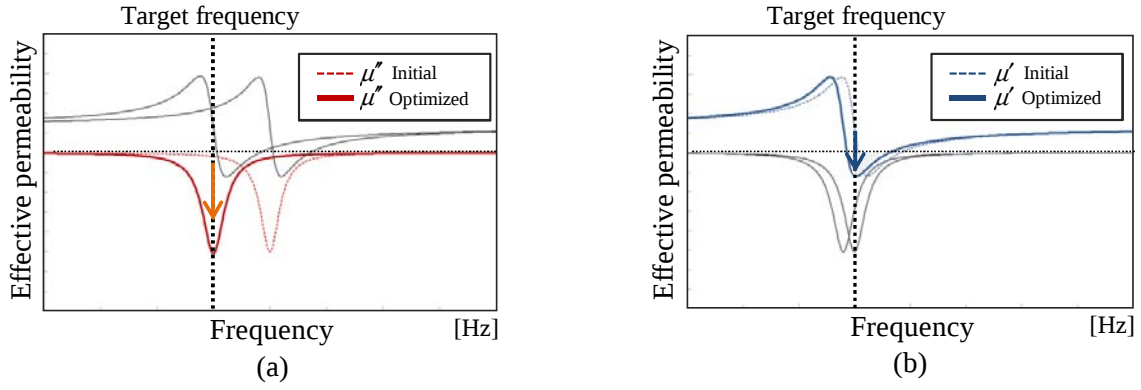


Fig.4 (a) imaginary part of effective permeability is minimized during first step; (b) real part of permeability is then minimized during second step of two-step optimization process

る方向に最適化計算が進む。その結果、反共振周波数が目標周波数から離れてしまうため、負の値を実現することができない。そこで、本研究では、Sigmund⁽²⁸⁾の方法と同様に、二段階の最適化計算を行い最適構造を求める。すなわち、有効透磁率の虚部 μ'' には正のピークがないことに着目し、図 4(a) に示すように、まずステップ 1 では、 μ'' の最小化を行う。その後、図 4(b) に示すように、ステップ 2 では、ステップ 1 で得られた最適構造を初期構造として、有効透磁率の実部 μ' の最小化を行う。

ステップ 1 の最適化問題は以下のように記述できる。

$$\inf_{\phi} \quad F = \mu'' \quad (21)$$

$$\text{subject to} \quad G \leq 0 \quad (22)$$

$$a(H_z, \tilde{H}_z) = l(\tilde{H}_z) \quad (23)$$

$$\text{for } H_z \in U, \forall \tilde{H}_z \in U$$

ここで、上式の各表記は以下で与えられる。

$$\begin{aligned} a(H_z, \tilde{H}_z) &= \int_D \epsilon_r^{-1}(\chi_\Omega) \nabla H_z \cdot \nabla \tilde{H}_z d\Omega \\ &\quad - k_0^2 \int_D H_z \tilde{H}_z d\Omega + j k_0 \int_\Gamma \epsilon_r^{-1}(\chi_\Omega) H_z \tilde{H}_z d\Gamma \end{aligned} \quad (24)$$

$$l(\tilde{H}_z) = 2j k_0 \int_\Gamma H_z^i \tilde{H}_z d\Gamma \quad (25)$$

$$U = \{\tilde{H}_z \in H^1(D)\} \quad (26)$$

さらに、ステップ 2 の最適化問題は以下のように記述できる。

$$\inf_{\phi} \quad F = \mu' \quad (27)$$

$$\text{subject to} \quad G \leq 0 \quad (28)$$

$$a(H_z, \tilde{H}_z) = l(\tilde{H}_z) \quad (29)$$

$$\text{for } H_z \in U, \forall \tilde{H}_z \in U$$

なおここでは、後述の随伴変数法を用いた感度解析を弱形式で議論するため支配方程式を弱形式により記述

している。

2.5 有効透磁率設定問題 ここでは、有効透磁率を所望の値に設計する問題を考える。最適化問題の目的は、所望の周波数において有効透磁率の実部 μ' と所望の値 μ'_{tar} の差を最小化することである。ここでも、初期構造の有効透磁率の共振周波数とその反共振周波数と所望の周波数の間にある場合、最適構造を求めることが困難となるため二段階の最適化計算を行い最適構造を求める。まず、2.4 節と同様に、ステップ 1 として μ'' の最小化を行う。ステップ 1 の最適化問題は式 (21)–(23) で記述される。その後、ステップ 2 では、ステップ 1 で得られた最適構造を初期構造として、有効透磁率と目標の透磁率の差の二乗値の最小化を行う。ステップ 2 の最適化問題は、以下のように記述できる。

$$\inf_{\phi} \quad F = (\mu' - \mu'_{\text{tar}})^2 \quad (30)$$

$$\text{subject to} \quad G \leq 0 \quad (31)$$

$$a(H_z, \tilde{H}_z) = l(\tilde{H}_z) \quad (32)$$

for $H_z \in U, \forall \tilde{H}_z \in U$

2.6 感度解析 ここでは、随伴変数法を用いた感度解析について述べる。最適化問題のラグランジェアン $\bar{F}$ を以下のように定式化する。

$$\bar{F} = F - \sum_{ij=11,21,22} \alpha_{ij} \left(a(H_z, \tilde{H}_{z,ij}) - l(\tilde{H}_{z,ij}) \right) + \lambda G \quad (33)$$

ここで、 $\tilde{H}_{z,ij}$ は S_{ij} に対応する随伴変数を表す。また、 α_{ij} は定数である。上式のラグランジェアンの変分に基づき、2.1 節で述べた反応拡散方程式を用いてレベルセット関数を更新することで、最適構造を示すレベルセット関数を求める。ラグランジェアンの変分は、随伴変数法を用いて以下のように求めることができる。

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{d\bar{F}}{d\chi_\Omega}, \tilde{\chi}_\Omega \right\rangle &= \sum_{ij=11,21,22} \left\langle \frac{\partial F}{\partial S_{ij}}, \tilde{S}_{ij} \right\rangle \left\langle \frac{\partial S_{ij}}{\partial H_z}, \tilde{H}_z \right\rangle \left\langle \frac{\partial H_z}{\partial \chi_\Omega}, \tilde{\chi}_\Omega \right\rangle \\ &\quad - \sum_{ij=11,21,22} \alpha_{ij} \left(\left\langle \frac{\partial a}{\partial H_z}, \tilde{H}_z \right\rangle \left\langle \frac{\partial H_z}{\partial \chi_\Omega}, \tilde{\chi}_\Omega \right\rangle + \left\langle \frac{\partial a}{\partial \chi_\Omega}, \tilde{\chi}_\Omega \right\rangle \right) \\ &\quad + \lambda \left\langle \frac{\partial G}{\partial \chi_\Omega}, \tilde{\chi}_\Omega \right\rangle \end{aligned} \quad (34)$$

ここで、 $\langle d\bar{F}/d\chi_\Omega, \tilde{\chi}_\Omega \rangle$ は、 $\bar{F}$ の χ_Ω に対するフレッシュエ微分を表す。

上式において、 $\langle \partial H_z / \partial \chi_\Omega, \tilde{\chi}_\Omega \rangle$ の項を消去することを考え、 $\alpha_{ij} = \langle \partial F / \partial S_{ij}, \tilde{S}_{ij} \rangle$ とし、さらに、上式を以下のように変形する。

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{d\bar{F}}{d\chi_\Omega}, \tilde{\chi}_\Omega \right\rangle &= \sum_{ij=11,21,22} \left\langle \frac{\partial F}{\partial S_{ij}}, \tilde{S}_{ij} \right\rangle \\ &\quad \left(\left\langle \frac{\partial S_{ij}}{\partial H_z}, \tilde{H}_z \right\rangle - \left\langle \frac{\partial a}{\partial H_z}, \tilde{H}_z \right\rangle \right) \left\langle \frac{\partial H_z}{\partial \chi_\Omega}, \tilde{\chi}_\Omega \right\rangle \\ &\quad - \sum_{ij=11,21,22} \left\langle \frac{\partial F}{\partial S_{ij}}, \tilde{S}_{ij} \right\rangle \left\langle \frac{\partial a}{\partial \chi_\Omega}, \tilde{\chi}_\Omega \right\rangle + \lambda \left\langle \frac{\partial G}{\partial \chi_\Omega}, \tilde{\chi}_\Omega \right\rangle \end{aligned} \quad (35)$$

ここで、以下の方程式を満たす随伴変数 $\tilde{H}_{z,ij}$ を求める。

$$a(\tilde{H}_{z,ij}, H_z) = S_{ij}(H_z) \quad (36)$$

for $\tilde{H}_{z,ij} \in U, \forall H_z \in U$

結局、ラグランジェアンの変分は以下の式で求めることができる。

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{d\bar{F}}{d\chi_\Omega}, \tilde{\chi}_\Omega \right\rangle &= - \sum_{ij=11,21,22} \left\langle \frac{\partial F}{\partial S_{ij}}, \tilde{S}_{ij} \right\rangle \left\langle \frac{\partial a(H_z, \tilde{H}_{z,ij})}{\partial \chi_\Omega}, \tilde{\chi}_\Omega \right\rangle \\ &\quad + \lambda \left\langle \frac{\partial G}{\partial \chi_\Omega}, \tilde{\chi}_\Omega \right\rangle \end{aligned} \quad (37)$$

3. 数値実装法

3.1 設計変数 レベルセット法による形状表現を用いたトポロジー最適化では、レベルセット関数を用いて設計領域内の物体領域と空洞領域を示す。本研究では、設計領域内の比誘電率 ϵ_r を次式に示すようにレベルセット関数を用いて表現する。

$$\epsilon_r^{-1} = (\epsilon_1^{-1} - \epsilon_0^{-1}) \chi_\Omega(\phi) + \epsilon_0^{-1} \quad (38)$$

ここで、 ϵ_1 は物体領域の比誘電率、 ϵ_0 は空洞領域の比誘電率を表す。また、上式の特関数 χ_Ω は、数値計算上は次式に示す近似したヘビサイド関数 $H(\phi)$ を用いる。

$$H(\phi) = \begin{cases} 0 & (\phi < -w) \\ \frac{1}{2} + \frac{\phi}{w} \left\{ \frac{15}{16} - \frac{\phi^2}{w^2} \left(\frac{5}{8} - \frac{3}{16} \frac{\phi^2}{w^2} \right) \right\} & (-w \leq \phi < w) \\ 1 & (w \leq \phi) \end{cases} \quad (39)$$

上式において、 w はヘビサイド関数の遷移幅で十分小さい値を与えるものとする。

ここで、式 (38) では、比誘電率の逆数を用いて定式化しているが、その理由は、感度分布の連続性を確保することで、最適化計算の収束性を安定化させるためである。すなわち、次式のように、設計領域内の比誘電率を線形で表現する場合、

$$\epsilon_r = (\epsilon_1 - \epsilon_0) \chi_\Omega(\phi) + \epsilon_0 \quad (40)$$

式 (37) の感度解析に必要な、 $\left\langle \frac{\partial a}{\partial \chi_\Omega}, \tilde{\chi}_\Omega \right\rangle$ の項は以下の式で与えられるので、

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial a}{\partial \chi_\Omega}, \tilde{\chi}_\Omega \right\rangle &= \int_D \frac{-1}{\epsilon_r^2} (\epsilon_1 - \epsilon_0) \nabla H_z \cdot \nabla \tilde{H}_z \tilde{\chi}_\Omega d\Omega \\ &\quad + jk_0 \int_D \frac{-1}{\epsilon_r^2} (\epsilon_1 - \epsilon_0) H_z \tilde{H}_z \tilde{\chi}_\Omega d\Gamma \end{aligned} \quad (41)$$

式 (41) より、 $-1/\epsilon_r^2$ の項が含まれることになる。レベルセット法の形状表現を用いて構造の境界を明確に表現する場合、すなわちここでは、式 (40) により設計領

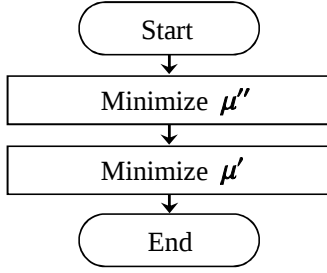


Fig.5 Two-step approach

域内の透磁率 ϵ_r を表現する場合、図2に示すように、 ϵ_r は構造の境界で ϵ_1 から ϵ_0 もしくは ϵ_0 から ϵ_1 にステップ状に変化する。それにより、式(41)に含まれる $-1/\epsilon_r^2$ の項も境界近傍でステップ状に変化するため、感度の分布が不連続となる。これに対して、式(38)を用いた場合、式(37)の感度解析に必要な $\left\langle \frac{\partial a}{\partial \chi_\Omega}, \tilde{\chi}_\Omega \right\rangle$ の項は以下の式で与えられる。

$$\left\langle \frac{\partial a}{\partial \chi_\Omega}, \tilde{\chi}_\Omega \right\rangle = \int_D (\epsilon_1^{-1} - \epsilon_0^{-1}) \nabla H_z \cdot \nabla \tilde{H}_z \tilde{\chi}_\Omega d\Omega + jk_0 \int_D (\epsilon_1^{-1} - \epsilon_0^{-1}) H_z \tilde{H}_z \tilde{\chi}_\Omega d\Gamma \quad (42)$$

この場合には、 ϵ_r が含まれていないため、感度分布の連続性が保たれ最適化計算の収束性が安定化される。

なお、逆数を用いた表現と線形の表現は、二種類の複合材料の均質な物性値が取り得る下限値もしくは上限値を示しており⁽³⁶⁾、逆数を用いた表現は物理的にも妥当な定式化であることを注記しておく。

3.2 最適化フローチャート 本提案手法では、二段階の最適化を行う。図5にそのフローチャートを示す。ステップ1では、まず有効透磁率の虚部の最小化を行う。その後ステップ2では、ステップ1で得られた最適構造を初期構造として、有効透磁率の実部の最小化、または適正化を行う。各ステップにおける最適化計算のフローチャートを図6に示す。各ステップでは、まずレベルセット関数の初期化を行う。次に、有限要素法を用いて平衡方程式を解き、目的汎関数、制約汎関数を求める。収束判定を行い、目的汎関数が収束した場合は、最適化計算を終了し、収束しない場合は、随伴変数法を用いて感度解析を行う。その後、感度に基づき反応拡散方程式を用いてレベルセット関数を更新させ、初めのステップに戻る。

4. 数値例

ここでは、提案手法の有効性を示すため数値例を示す。まず、初期構造における有効透磁率の実部の正のピークの位置に依らず、有効透磁率が最小となる最適構造を求められることを検証するため、有効透磁率を最小化させる目標周波数が初期構造における有効透磁率の反共振周波数より高い場合と低い場合の数値例を

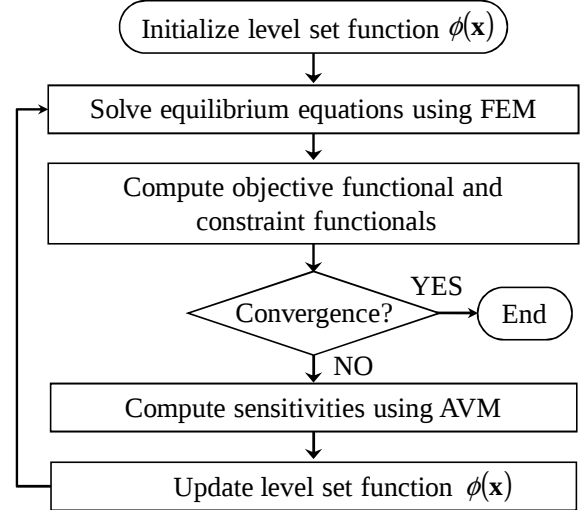


Fig.6 Flowchart of optimization algorithm

示す。次に、所望の周波数において所望の有効透磁率の値を実現する最適構造を求める問題の数値例を示し、提案手法の有効性を検証する。図2に示した解析領域を $120\mu\text{m} \times 120\mu\text{m}$ 、固定設計領域を $80\mu\text{m} \times 80\mu\text{m}$ とし、解析領域を 120×120 の構造メッシュを用いて要素分割を行った。物体領域の比誘電率 ϵ_1 を $100 - 1i$ 、空洞領域に対応する比誘電率 ϵ_0 を1とした。また式(39)に示すヘビサイド関数の遷移幅 w を0.001とした。

4.1 数値例1 ここでは、有効透磁率を最小化させる目標周波数が初期構造における有効透磁率の反共振周波数より低い場合として、目標周波数を0.3THzとし、初期構造として、体積が固定設計領域の40%の体積を持つ円形状の構造を与え、最適構造を求めた。また許容する体積の上限値を70%とした。

図7に初期構造と、ステップ1、すなわち有効透磁率の虚部の最小化を行ったときの最適構造を示す。また、図8に有効透磁率の周波数特性を示す。図よりわかるように、最適化計算により、有効透磁率の虚部のピーク周波数が目標周波数と一致し、有効透磁率の虚部が最小化されていることがわかる。初期構造のピーク周

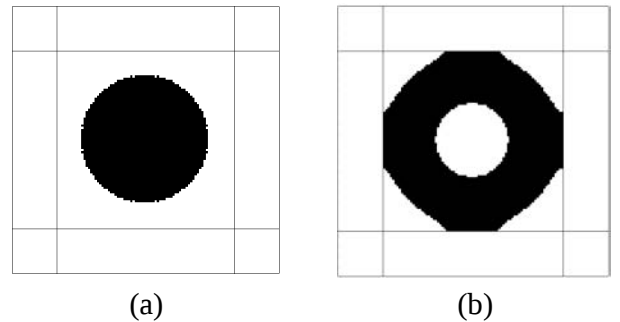


Fig.7 Comparison of configurations (a) initial ; (b) optimal

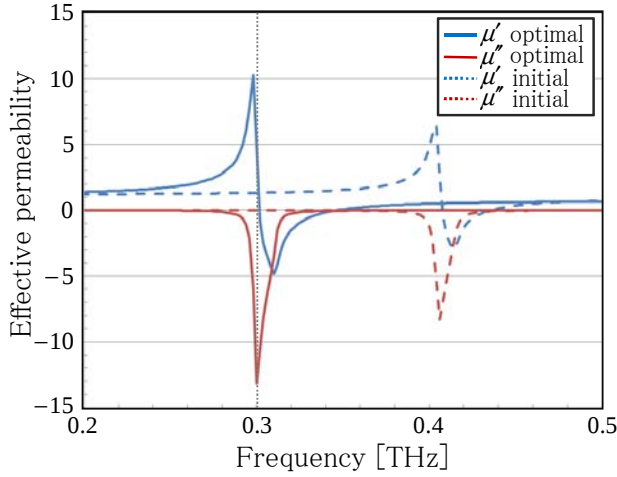


Fig.8 Effective permeability curve of step 1

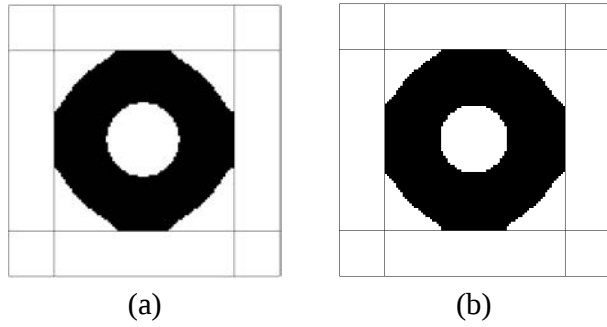


Fig.9 Comparison of configurations (a) initial ; (b) optimal

波数は、約 0.41THz で、最適化計算の過程が進むにつれ、ピーク周波数が目標周波数に遷移していき、最終的に目標周波数に到達することが確認できた．図 9 に、ステップ 1 で得られた構造を初期構造として、ステップ 2、すなわち有効透磁率の実部の最小化を行った場合の最適構造を示す．また、図 10 に有効透磁率の周波数特性を示す．図より、最適化計算により、有効透磁率の実部の反共振周波数が目標周波数と一致し、有効透磁率の値が最小化されていることがわかる．ステップ 1 の初期構造とステップ 2 の最適構造の有効透磁率はそれぞれ、1.33, -5.07 となり、最適化により、負の有効透磁率が得られることが確認できた．最適構造の体積は、69.9% であった．

また、図 11 にステップ 1 の初期構造、ステップ 2 の最適構造とその電場分布を矢印で示す．図より、最適構造の電場分布では、固定設計領域の中心に、円環上の電場が発生し、それにより、入射磁場に反抗する磁場が誘導されている．一方、初期構造の電場分布ではそのような電場が発生していないことがわかる．

4.2 数値例 2 ここでは、有効透磁率を最小化させる目標周波数が初期構造における有効透磁率の反共

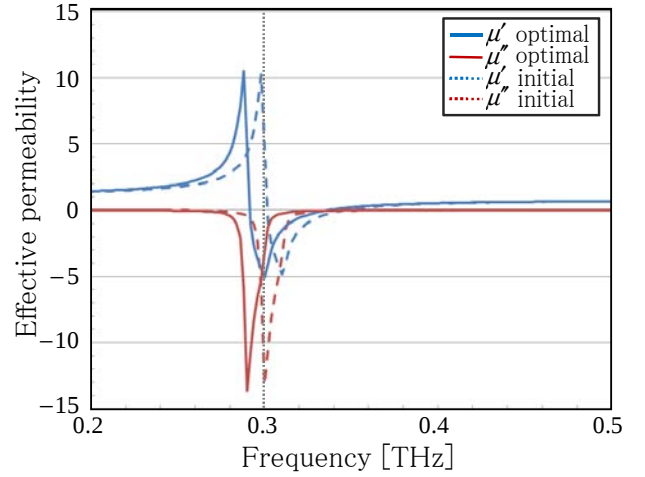


Fig.10 Effective permeability curve of step 2: optimization result

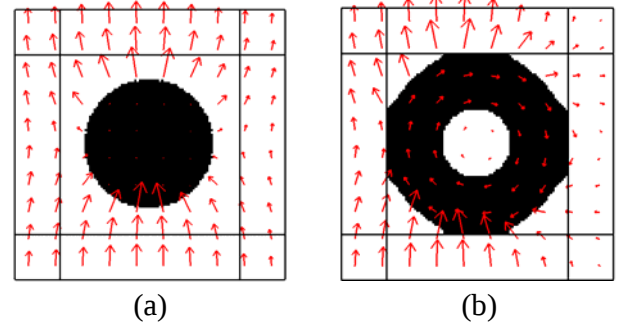


Fig.11 Configurations and electric field distribution of example 1: (a) initial; (b) optimal

振周波数より高い場合として、目標周波数を 0.45THz とし、初期構造として、体積が固定設計領域の 50% の体積を持つ円形状の構造を与え、最適構造を求めた．図 12 に、有効透磁率の周波数特性、図 13 に、初期構造と最適構造とその電場分布を示す．数値例 1 と同じく、二段階の最適化を行うことで、反共振周波数が目標周波数に到達し、その結果、目標周波数での有効透磁率が最小化されていることがわかる．初期構造と最適構造の有効透磁率はそれぞれ、0.64, -2.44 となり、最適化により、負の有効透磁率が得られていることがわかる．また図より、数値例 1 と同様、最適構造では円環状の電場が発生し、それにより、入射磁場に反抗する磁場が誘導されていることが確認できる．

4.3 数値例 3 ここでは、目標周波数を 0.3THz、有効透磁率の目標値を -3.0 として最適構造を求めた．初期構造としては、体積が固定設計領域の 40% の体積を持つ円状の初期構造を与えた．ステップ 1 では数値例 1 と同じく、有効透磁率の虚部の最小化を行い、ステップ 2 では、有効透磁率と目標値との差の二乗和を目的関数としてその差を最小化させる最適化計算を行っ

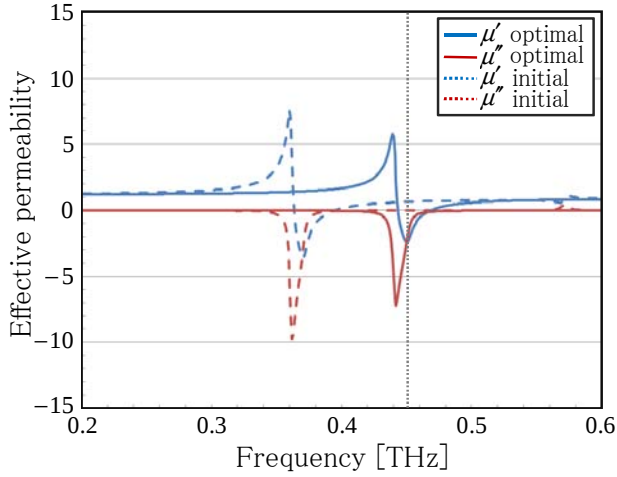


Fig.12 Effective permeability curve of optimal configuration: example 2

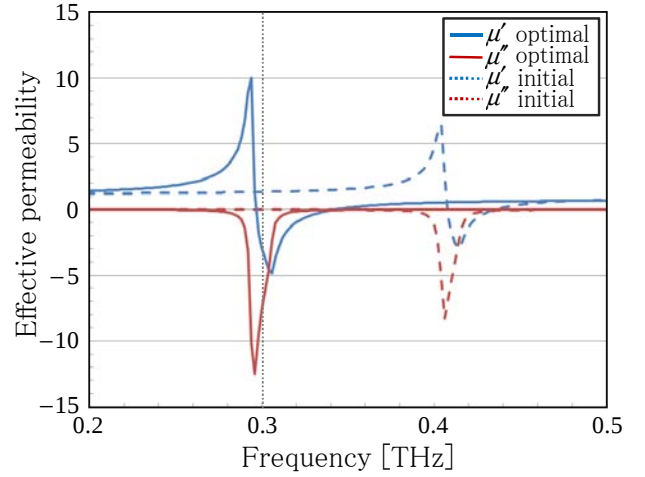


Fig.14 Effective permeability curve of optimal configuration: example 3

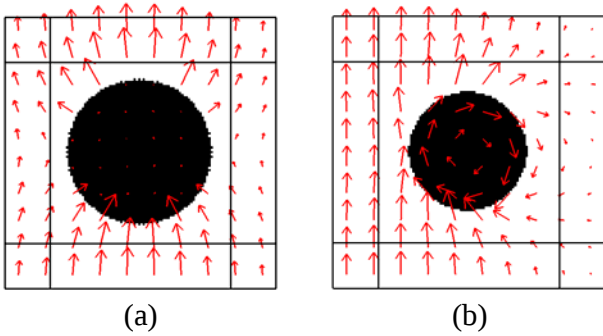


Fig.13 Configurations and electric field distribution of example 2: (a) initial; (b) optimal

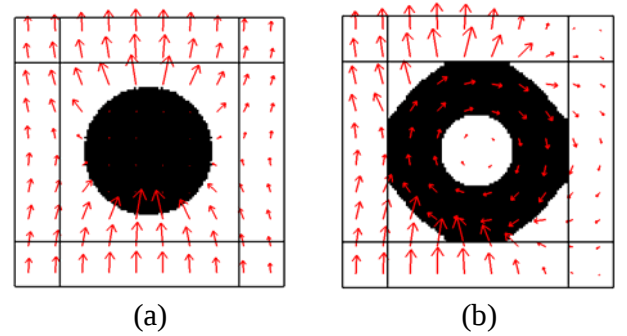


Fig.15 Configurations and electric field distribution of example 3: (a) initial; (b) optimal

た．図 14 に有効透磁率の周波数特性，図 15 に初期構造と最適構造とその電場分布を示す．得られた最適構造の有効透磁率は -3.00 となり，最適化計算により，所望の有効透磁率を持つ誘電体メタマテリアル構造を求められることが確認できた．

5. 結 言

本研究では，レベルセット法の形状表現に基づく誘電体メタマテリアルのトポロジー最適設計手法を提案した．本研究で得られた結果を以下に示す．

- (1) レベルセット法による形状表現と，S 行列の係数に基づく有効透磁率の算出方法を用いて，有効透磁率最小化問題，また有効透磁率を所望の値に設計する最適設計問題の定式化を行った．
- (2) 最適化問題の定式化に基づき，有効透磁率の虚部の最小化を行った後に実部の最適化を行う二段階の最適化手法を用いて，有限要素法により電磁場の解析とレベルセット関数の更新を行う誘電体メタマテリアル

最適設計問題の最適化アルゴリズムを提案した．

(3) 数値解析例により，本提案手法の有効性を検証した．その結果，二段階の最適化を行うことで，有効透磁率の反共振周波数が所望の周波数に一致し，有効透磁率を最小化できることが確認できた．さらに，所望の有効透磁率を持つ最適構造を求められることを確認した．いずれの最適構造もグレースケールを含まない形状が得られており，本提案手法により，工学的に有効で，明確な最適構造が得られることを示した．

6. 謝 辞

本研究は科学研究費補助金の基盤研究 (B)22360041「電磁波デバイスを対象としたマルチスケルトポロジー最適化」，また「組織的な若手研究者等海外派遣プログラム」の助成を受けたものである．本論文の第一筆者は，アイシン・エイ・ダブリュ株式会社の支援のもとに研究を実施した．これらの支援に深く謝意を表す．

参考文献

- (1) Caloz, C. and Itoh, T., *Electromagnetic Metamaterials : Transmission Line Theory and Microwave Applications*, Wiley-IEEE Press, 2005.
- (2) Veselago, V. G., The electrodynamics of substances with simultaneously negative values of ϵ and μ , *Soviet Physics Uspekhi*, **10**-4, 1968, pp. 509–514.
- (3) Pendry, J. B., Holden, A. J., Stewart, W. J. and Youngs, I., Extremely low frequency plasmons in metallic mesostructures, *Physical Review Letters*, **76**-25, 1996, pp. 4773–4776.
- (4) Pendry, J. B., Holden, A. J., Robbins, D. J. and Stewart, W. J., Magnetism from conductors and enhanced nonlinear phenomena, *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, **47**-11, 1999, pp. 2075–2084.
- (5) Smith, D. R., Padilla, W. J., Vier, D. C., Nemat-Nasser, S. C. and Schultz, S., Composite medium with simultaneously negative permeability and permittivity, *Physical Review Letters*, **84**-18, 2000, pp. 4184–4187.
- (6) Soukoulis, C. M., Linden, S. and Wegener, M., Negative refractive index at optical wavelengths, *Science*, **315**-5808, 2007, pp. 47–49.
- (7) Schurig, D., Mock, J. J., Justice, B. J., Cummer, S. A., Pendry, J. B., Starr, A. F. and Smith, D. R., Metamaterial electromagnetic cloak at microwave frequencies, *Science*, **314**-5801, 2006, pp. 977–980.
- (8) Cai, W., Genov, D. A. and Shalaev, V. M., Superlens based on metal-dielectric composites, *Physical Review B*, **72**-19, 2005, 193101.
- (9) Caloz, C., Itoh, T. and Rennings, A., CRLH metamaterial leaky-wave and resonant antennas, *IEEE Antennas and Propagation Magazine*, **50**-5, 2008, pp. 25–39.
- (10) Cheng, Q., Cui, T. J., Jiang, W. X. and Cai, B. G., An omnidirectional electromagnetic absorber made of metamaterials, *New Journal of Physics*, **12**, 2010, 063006.
- (11) Ahmadi, A. and Mosallaei, H., Physical configuration and performance modeling of all-dielectric metamaterials, *Physical Review B*, **77**-4, 2008, 045104.
- (12) Zhao, Q., Zhou, J., Zhang, F. and Lippens, D., Mie resonance-based dielectric metamaterials, *Materials Today*, **12**-12, 2009, pp. 60–69.
- (13) Smith, D. R., Schultz, S., Markoš, P. and Soukoulis, C. M., Determination of effective permittivity and permeability of metamaterials from reflection and transmission coefficients, *Physical Review B*, **65**-19, 2002, 195104.
- (14) Smith, D. R., Vier, D. C., Koschny, T. and Soukoulis, C. M., Electromagnetic parameter retrieval from inhomogeneous metamaterials, *Physical Review E*, **71**-3, 2005, 036617.
- (15) Chen, X., Grzegorzczuk, T. M., Wu, B. I., Pacheco, J., Jr. and Kong, J. A., Robust method to retrieve the constitutive effective parameters of metamaterials, *Physical Review E*, **70**-1, 2004, 016608.
- (16) Lubkowski, G., Schuhmann, R. and Weiland, T., Extraction of effective metamaterial parameters by parameter fitting of dispersive models, *Microwave and Optical Technology Letters*, **49**-2, 2007, pp. 285–288.
- (17) Smith, D. R. and Pendry J. B., Homogenization of metamaterials by field averaging (invited paper), *Journal of the Optical Society of America B-Optical Physics*, **23**-3, 2006, pp. 391–403.
- (18) Zhou, S., Li, W., Sun, G. and Li, Q., A level-set procedure for the design of electromagnetic metamaterials, *Optics Express*, **18**-7, 2010, pp. 6693–6702.
- (19) Zhou, S., Li, W., Chen, Y., Sun, G. and Li, Q., Topology optimization for negative permeability metamaterials using level-set algorithm, *Acta Materialia*, **59**-7, 2011, pp. 2624–2636.
- (20) Wang, M. Y., Wang, X. and Guo, D., A level set method for structural topology optimization, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **192**-1-2, 2003, pp. 227–246.
- (21) Allaire, G., Jouve, F. and Toader, A. M., Structural optimization using sensitivity analysis and a level-set method, *Journal of Computational Physics*, **194**-1, 2004, pp. 363–393.
- (22) Bendsoe, M. P. and Kikuchi, N., Generating optimal topologies in structural design using a homogenization method, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **71**-2, 1988, pp. 197–224.
- (23) Bendsoe, M. P., Optimal shape design as a material distribution problem, *Structural Optimization*, **1**-4, 1989, pp. 193–202.
- (24) Suzuki, K. and Kikuchi, N., A homogenization method for shape and topology optimization, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **93**-3, 1991, pp. 291–318.
- (25) Diaz, A. R. and Kikuchi, N., Solutions to shape and topology eigenvalue optimization problems using a homogenization method, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **35**-7, 1992, pp. 1487–1502.
- (26) Yoo, J., Kikuchi, N. and Volakis, J. L., Structural optimization in magnetic devices by the homogenization design method, *IEEE Transactions on Magnetics*, **36**-3, 2000, pp. 574–580.

- (27) Diaz, A. R. and Sigmund, O., A topology optimization method for design of negative permeability metamaterials, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **41**-2, 2010, pp. 163–177.
- (28) Sigmund, O., Systematic design of metamaterials by topology optimization, *IUTAM Symposium on Modelling Nanomaterials and Nanosystems*, R. Pyrz and J. C. Rauhe (eds.), Springer, Netherlands, **13**, 2009, pp. 151–159.
- (29) Sigmund, O., Morphology-based black and white filters for topology optimization, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **33**-4-5, 2007, pp. 401–424.
- (30) Guest, J. K., Topology optimization with multiple phase projection, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **199**-1-4, 2009, pp. 123–135.
- (31) Yamada, T., Izui, K., Nishiwaki, S. and Takezawa, A., A topology optimization method based on the level set method incorporating a fictitious interface energy, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **199**-45-48, 2010, pp. 2876–2891.
- (32) 山田崇恭, 西脇眞二, 泉井一浩, 吉村允孝, 竹澤晃弘, レベルセット法による形状表現を用いたフェーズフィールド法の考え方に基づくトポロジー最適化, 日本機械学会論文集, A 編, **75**-753, pp. 550–558, 2009
- (33) Yamada, T., Izui, K. and Nishiwaki, S., A level set-based topology optimization method for maximizing thermal diffusivity in problems including design-dependent effects, *Journal of Mechanical Design*, **133**-3, 2011, 031011.
- (34) Burger, M., Hackl, B. and Ring, W., Incorporating topological derivatives into level set methods, *Journal of Computational Physics*, **194**-1, 2004, pp. 344–362.
- (35) He, L., Kao, C.-Y. and Osher, S., Incorporating topological derivatives into shape derivatives based level set methods, *Journal of Computational Physics*, **255**-1, 2007, pp. 891–909
- (36) Bergman, D. J., The dielectric constant of a composite material - a problem in classical physics, *Physics Reports*, **43**-9, 1978, pp. 377–407.