研 究 報 告 書

「フォノニック結晶における多相形状最適化」

研究タイプ：通常型
研究期間： 平成27年10月～平成31年3月
研 究 者： Elliott Ginder

1． 研究のねらい

本研究では，フォノニック結晶（Phononic crystal, PnC）という分野における応用数学の発展を目指している．具体的には，表面弾性波（surface acoustic waves, SAW）の実験データから，鉱物を含む複合弾性体の内部構造を推定する逆問題の数理構造，並びにこの問題を解くための数理解析と計算手法に重点を置いて進めている．数学，計算，実験の三本の柱から，本課題の基盤となる実験の数理モデリングを行い，該当する数理モデルの近似解法の作成においては，複合弾性波現象のシミュレーションが可能となることにより，このモデル方程式を解くための数値ソルバー開発にも携わっている．これらの対象となる逆問題は，実験から複合弾性体の境界での表面速度が与えられた際に，複合弾性波方程式から得るシミュレーションデータの差を測定する評価汎関数から定義されている．また，逆問題を解くことは，同時にこの評価汎関数の値を最小化する物質位置を求めることでもあるため，我々はこの問題を形状最適化問題として取り扱っている．したがって，形状最適化問題に対する数値解を調べるための最適化手法における数理科学研究もおこなっている．

このような学際研究により，本研究は表面弾性波が弾性体の構造に影響されると仮定し，弾性体の構造を推定する技術の開発を目指している．そのため，複数の物質を含む弾性体の数理モデリングをおこなうに当たり，物質の配置を表現する多相 Level Set 法（multiphase level set method）も重視して取り組んでいる．

以上，数学，計算，実験における3つの視点の成果融合においては，主となる逆問題を形状最適化問題として表現して進めている．本研究の成果は，この問題の実用化として，サブミクロンスケール（sub-micron）の特徴計測，非侵襲性の医療イメージング，材料科学における欠損検出などに役立つと期待している．

2． 研究成果

（1）概要

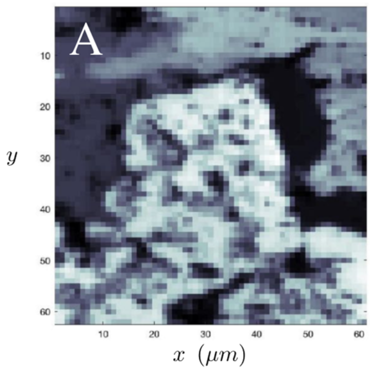
本研究では，表面弾性波の実験を通し，学際的に研究を進めることができた．応用成果として，2つ以上の異なる物質における複合弾性体の内部構造を推定する手法を作成することができたことは，本研究の大きな成果である．研究過程では課題として，目標とした内部構造における複合弾性体の境界に沿った外向き表面速度データが与えられたときに，そのデータのみを用いた上で逆問題としての内部構造を推定することがあった．これについても，逆問題を設計した際に，評価汎関数の形状最適化問題として表現することができ課題を克服することができた．また，この最適化問題を数値的に取り扱うための近似解法も作成することができた．ここでの近似解法は，評価汎関数の勾配流に基づいている．これについては，評価汎関数の勾配を求める際，変分法の一つである Lagrange 乗数法が有益であるこ

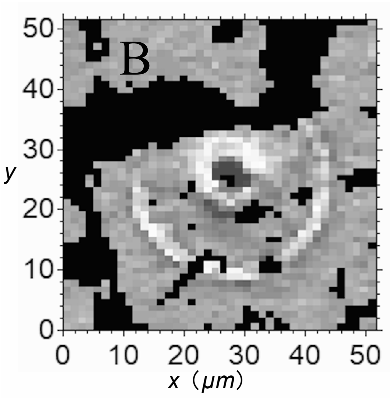
とが分かった. 結果として, この勾配は複合弾性体モデル方程式, 評価汎関数に関連する随伴問題, と実験データから構成されていると分かった. この勾配を数値的に表現するに当たって, モデル方程式と随伴問題の計算手法も必要となり, 実験データの取り入れ方も厳密に構成しなければいけないと判明した. そこで本研究では, 2次元および3次元のモデル方程式と随伴問題の数値ソルバーを開発し, シミュレーションと補間法により実験データを計算手法でも取り扱えるよう改良した. これに加え, Level Set 法を用いた物質間の界面を発展させる近似解法と, それに対応する数値計算法を構成することに成功した. この方法を用いることにより, モデル方程式における弾性体内部の物質位置を Level Set 関数として簡単に表現することが可能となった.

提案した方法の検証については, 求めた勾配を用いて内部構造を発展させ, 評価汎関数の値を減少させることができた. これは, 表面弾性波データに弾性体の内部物質位置の情報が含まれていることを意味していると結論づけることができた. 以上に加えて, 形状最適化の計算手法の計算量が大きいため, 計算量が比較的に少ない shadowing method による物質位置の推定範囲を絞る手法の可能性も見出すことができた. また, 形状最適化により収束した形状は目標物質の実際の位置を近似していることも確認でき, 本研究での大きな成果となった.

（2）詳細

複合弾性体の内部構造を表現する逆問題を定義した. また, 逆問題の定式化をおこなうためのデータ(δとおく)は, 複合弾性体の表面Γ上においての変位ベクトル場の一つの成分とした.





共同研究先である北海道大学大学院の Oliver Wright 氏と Paul Ohtsuka 氏と連携し, 図 A の試料における表面弾性波の実験データが取れた. この試料は, Padjadjaran University の Euis T. Yuningsih が作成した複合弾性体である鉱物を表している. この実験結果から, 図 B のように表面弾性波の伝播は, 各材料に依存していることが分かる. 黒く塗りつぶされた異なる材料領域には, 表面弾性波が伝播しにくいことが観察されている. この実験のモデルとしては, 複合弾性体波動方程式を用いた上で, シミュレーションと実験データの違いを測定するための評価汎関数を定義することができた.

$$E(\boldsymbol{u}) = \left|\left|u_i - \delta\right|\right|_{L^2(\Gamma)}$$

ここで, u_i はモデル方程式の解$\boldsymbol{u}$のi成分を意味し, 実験データと一致する場合, 評価汎関数の値は0となることが分かる. この設定において, 物質の配置を表現する Level Set 関数 $\theta(\boldsymbol{x})$ を用いることにより, 上記の評価汎関数の勾配を得ることができた. 特に, 材料を表す質量ρと弾性テンソルcにおいて以下の Lagrange 汎関数

$$L(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v},\theta) = E(\boldsymbol{u},\theta) + \int_0^T \int_\Omega (-\rho(\theta)\boldsymbol{u}_t \cdot \boldsymbol{v_t} + (c(\theta) \otimes \nabla\boldsymbol{u}) : \nabla\boldsymbol{v} + \boldsymbol{f} \cdot \boldsymbol{v})\ dxdt$$

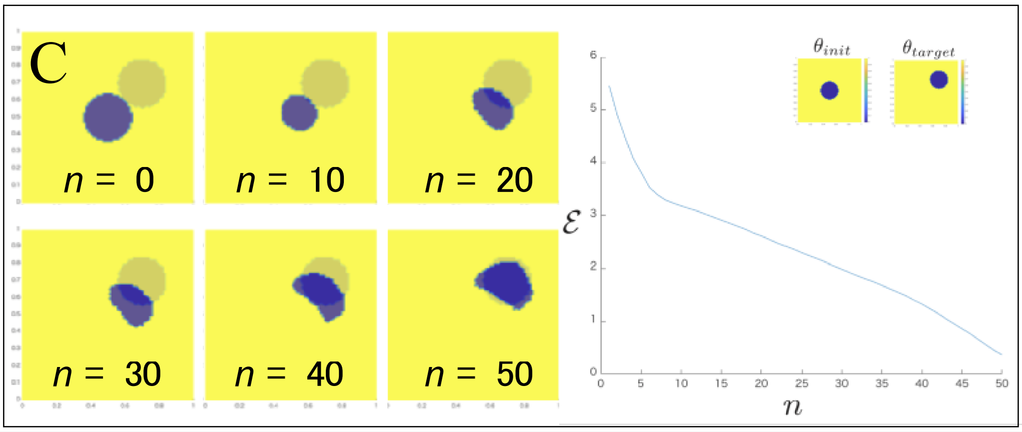
により，評価汎関数 E の勾配 $\boldsymbol{g}$ は，次のように書けると分かった．

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \int_0^T \ (-\rho'(\theta)\boldsymbol{u}_t \cdot \boldsymbol{v_t} + (c'(\theta) \otimes \nabla\boldsymbol{u}) : \nabla\boldsymbol{v})dt$$

ここでの$\boldsymbol{u}$は，モデル方程式の解を意味し，$\boldsymbol{v}$はEに対する随伴問題の解であり，ρ'およびc'は物質内の界面Γ上での重み付きデルタ関数となる．

さらに，時間離散化法と有限要素法の組み合わせにより，モデル方程式と随伴問題の計算手法ができ，評価汎関数の勾配を計算機上で表現することに成功した．

この方法を使用した計算結果は，図 C で見ることができる．紺色の領域は，逆問題の近似解を表しており，薄水色は目標の物質配置を示している．これは，評価汎関数の勾配流に対応し，近似解が目標の物質配置へ収束していることを提示している．この時，Eの値が減少することも確認ができた．これにより，本研究で行なった数理解析と数値解析が，忠実に逆問題の近似解を求めることに成功し，複合弾性体の内部構造を正しく推定していることが示されている[1]．



3.　今後の展開

本研究の評価汎関数の勾配流により，複合弾性体の内部構造を推定することができるようになった．しかし，この成果は，2次元の現象に対して確認したものである．実際の実験は，3次元の現象であるため，3次元の設定にも本研究の逆問題における近似解法の有効性を確立することが望ましい．ここで主となる課題は，3次元モデル方程式と随伴問題の数値ソルバーの高速化である．また，新しいテスト問題と表面弾性波の実験の展望として，3つ以上の等方材料(isotropic material)の実験を行うことが重要と考えている．さらに，今まで実験で使用した試料は，非等方材料（anisotropic material）を含むため，本研究の成果をこのような材料でも得られるか，見極めたいと考えている．また上記に重ね，本研究で開発した手法下で，実験データから実際に使用した試料の内部構造を計算的に推定することについて，新たな研究として展開する必要がある．

4. 自己評価

研究に着手した時点で，共同研究先の課題については全くの素人であり，他分野との共同研究の経験もさほどなかったことを自覚した．また，実験の複雑さや物理的現象のシミュレーションにおいても十分な知識がなく，応用の壁を感じずにはいられなかった．そのため，研究課題の入門的な知識から理解を深めていき，この課題を取り扱えるまでの道のりは，予想以上に時間を要したが，数学と他分野の「会話」が始まるときに計算がその土台であるという信念は，揺らぎなかった．特に，異分野の結果を理解するために，その課題の数理的な表現や計算を自らの手を動かして，数理的な視点から迫ることにより，より早かに進めることができた．また，異分野にも数理を活用する場合は，自分の専門に限らず，様々な有益な手法を研究に用いることも大切だと気づいた．これは自分の研究スタイルを確立する上で重要なことであった．研究を行なうことで，新しいアプローチを見出しながら，自らの専門分野が拡大して行く形態を肌で感じられたことは，研究者としての大きな糧となった．また，実験が容易にできたら良いと思う一方で，このプロジェクトを学際的におこなった点においては視野が広がった．異分野での現象が興味深いことは言うまでもないが，このさきがけを通して，数理の言葉が基盤となり，進展していく研究や仕事が現代社会の至る所にあると改めて感じた．本研究課題の成果と共に，このような社会的側面に触れる意味でも，自分の研究方法を生み出したこのさきがけ研究を評価したい．

5. 主な研究成果リスト

（1）論文（原著論文）発表

1. E. Ginder, R. Kanai. A variational approach to the inverse imaging of composite elastic materials. arXiv:1903:05835.
2. E. Ginder, K. Kayahara, M. Kuze, M. Nagayama, S. Nakata, H. Nishimori. Synchronization of self-propelled soft pendulums. Soft Matter. 2018, 14, pp. 3791-3798.
3. E. Ginder, T. Minomo, M. Nagayama, S. Nakata, H. Yamamoto. Traveling pulse solutions in a point mass model of diffusing particles. Computer Methods in Materials Science. 2017, 17 No.2, pp. 111-121.
4. E. Ginder, K. Svadlenka. Wave-type threshold dynamics and the hyperbolic mean curvature flow. J. Journal of Industrial and Applied Mathematics. 2016, 33 No. 2, pp. 501-523.

（2）特許出願

研究期間累積件数：0件

（3）その他の成果（主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等）

1. E. Ginder, A. Katayama, K. Svadlenka. On an approximation method for hyperbolic mean curvature flow. RIMS Kokyuroku (2016).
2. Equadiff 2017. Multiphase optimization in phononic crystal design. 7/27/2017.