

## [共同研究成果]

# 遺伝アルゴリズムを用いた光機能性人工構造体の探索

岩長 祐伸

東北大学 大学院理学研究科 物理学専攻

光機能性をもつ人工メゾ・ナノ周期構造体の設計は単位胞構造が鍵となる。構造探索には膨大な量の数値的な評価が不可欠であり、高速な計算機環境が必須である。本稿では、遺伝アルゴリズム (Genetic Algorithm, GA) による効率的な構造探索コードをスーパーコンピュータ上で運用した結果について述べる。具体的な応用例として、光学的に非対称性が大きい構造を明らかにし、その光学的な非対称性の起源について考察する。

## 1. はじめに

### 1.1. 研究の背景

これまでのスーパーコンピュータ SX-7 を利用して、フォトニック結晶の光学応答を定量的に算出し [1]、メタマテリアルの有効光学定数抽出 [2] を行ってきた。いずれもメゾスコピック、ナノスケールの人工周期構造体における光学応答を大規模並列数値計算によって明らかにした研究である。

これまでの光学応答算出コードを遺伝アルゴリズム (GA) と組み合わせて活用することで、顕著な光機能性をもつ人工構造を探索することを目的として今回の研究を行った。構造探索では多数の単位構造に対して光学応答を計算するために膨大な計算量を必要とする。単純にシラミつぶし的な場合の数は比較的単純な単位構造ですら、 $10^{10}$  通りをはるかに超える。したがって、スーパーコンピュータを利用して、かつ効果的な探索アルゴリズムを援用する探索が必要である。未知の構造探索には柔軟な探索アルゴリズムが適している。そこで、今回の研究では GA を用いた光機能性をもつ構造体の探索を試みることにした。

### 1.2. 光学的な非対称性の探索

1 年間の共同研究を通じて、3 次元フォトニック結晶のフォトニックバンドギャップの最大化する探索と 1 次元金属フォトニック結晶スラブにおける光学的な非対称性の探索を行った。前者では典型的な 3 次元フォトニック結晶である丸太交互積層型の構造より大きなバンドギャップをもつ単位構造を見出すなどの成果があった。ただ、計算時間が膨大となり、より多くの構造を広く探索するという本来の目的を完全には達することができなかった。本稿では、後者の結果について述べる。

光学的な非対称性という概念について説明する。まず、単純な 1 次元フォトニック結晶スラブである回折格子の光学応答を図 1 で模式的に示している。入射平面波に対する反射光 (反射率  $R_0$ )、透過光 (透過率  $T_0$ ) のほかに回折光 ( $T_1, T_{-1}, \dots$ ) が光学応答として現れる。反射方向にも同様に回折光 ( $R_1, R_{-1}, \dots$ ) が存在するが、簡単のために図示していない。なお、回折の次数は  $x$  軸に対して正負の符号が決まっている。

このような回折光も含めた線形光学応答には相反性と呼ばれる一般的な性質がある。図 2 は一つの相反的な配置を示している。入射光を (a) 角度  $\theta$  と (b)  $-\theta$  で入射す

る場合、反射光に相反性が成り立ち、 $R_0(\theta)=R_0(-\theta)$ が成り立つ [3]。周期構造の単位胞が  $\theta$  入射と  $-\theta$  入射の場合で非対称的であることから、反射率の相反性は直感に反するように感じるかもしれないが、数学的な証明可能な性質である。したがって、系の光学的な非対称性を反映する成分は透過光であることが分かる。この点を考慮すると、非対称性を表すパラメータ  $\sigma$  として次のような定義が考えられる。

$$\sigma = \frac{T_0(\theta) - T_0(-\theta)}{T_0(\theta) + T_0(-\theta)}$$

この表式はもっとも簡単な定義であるが、この場合  $T_0(\theta)=1$ 、 $T_0(-\theta)=0.01$  の単位胞と  $T_0(\theta)=0.001$ 、 $T_0(-\theta)=0.00001$  の単位胞を  $\sigma$  によって区別できない。なお、 $T_0=1$  は透過率 100%である。前者は透過率の大きい構造、後者は透過率が著しく小さい構造であるから、このような縮退は望ましくない。

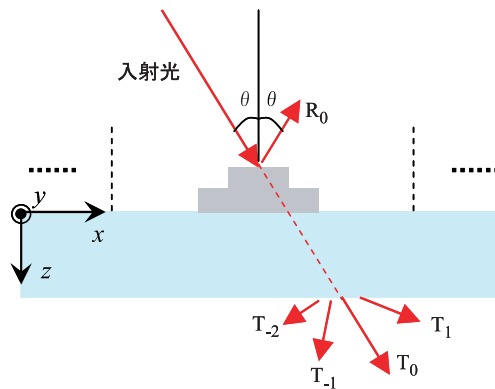


図 1 回折格子状の周期構造の光学応答。単位胞は垂直な点線で挟まれた領域である。単位胞内の構造（灰色部）は  $y$  方向に無限に長いとする。入射光に対して、反射光（反射率  $R_0$ ）、透過光（透過率  $T_0$ ）のほかに回折光（効率  $T_1$ 、 $T_{-1}$ 、 $T_2$ 、 $\dots$ ）がある。回折の次数は  $x$  軸に対しての正負で定義される。反射方向にも同様の回折光があるが、見やすさのために図示していない。

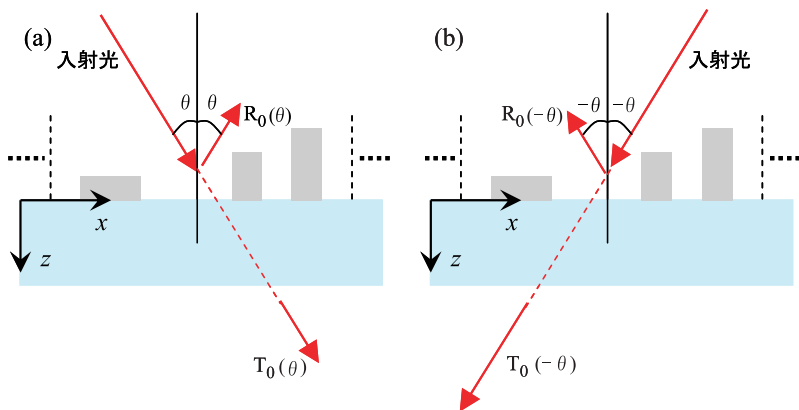


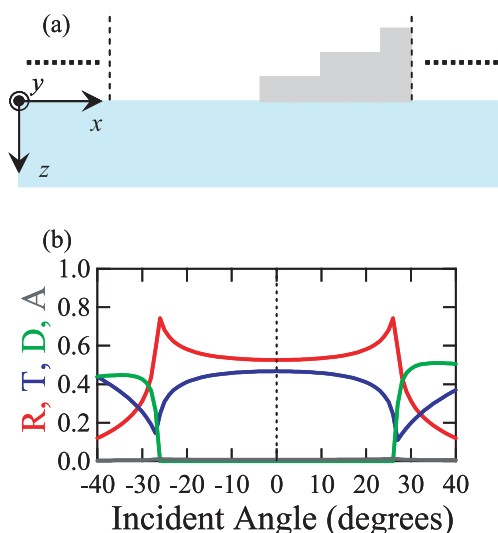
図 2 光学的な相反配置。(a)入射角  $\theta$  の配置。(b)  $-\theta$  の配置。反射光に関して相反性  $R_0(\theta)=R_0(-\theta)$  が成り立つ。この性質は単位胞の構造や入射角に依らない。

そこで、先の定義を少し改良することで、望ましくない縮退を区別できるようにした。式 (1.1) がその表式である。

$$\sigma = |T_0(\theta) - T_0(-\theta)|(1 - R_0). \quad (1.1)$$

この表式は透過率の大きさを区別でき、なおかつ反射率が大きい構造では $\sigma$ が小さくなる。これから先、この $\sigma$ を系の非対称性を特徴づけるパラメータとして用いる。

さて、非対称構造の一例についての結果を述べる。非対称な構造は容易に思いつくことができる。その一例を図 3(a) に示している。明らかに非対称な単位胞構造であり、回折格子型の分光器に使われているエシュレット型回折格子を単純化した構造である。灰色部分が金属（銀）として文献値の誘電率を使用して光学スペクトルを計算する。詳細は [1] に詳しい。図 3(b) は 1.3 eV（波長では 953.5 nm に相当）における光学スペクトルである。入射光の電場が  $xz$  平面内にある偏光 ( $p$  偏光) を考える。実際、この構造における  $\sigma$  は  $\theta=20^\circ$  で  $\sigma=0.0005$ 、 $\theta=30^\circ$  で  $\sigma=0.0393$  と光学的な非対称性は非常に小さい。この単位胞構造は金属の充填率（単位胞の体積あたりの金属の割合）が  $9/30=0.333$  と 30%を超える。にもかかわらず、吸収（灰色線）は高々1%程度と小さいことが一つの特徴である。



**図 3** (a) 非対称構造と (b) その光学スペクトル。(a) 単位胞は垂直な点線の間の領域であり、周期長 500 nm、単位胞内の高さ 120 nm としている。灰色部は金属（銀）で石英基板（水色部）の上に構造がある。(b) 入射光エネルギー 1.3 eV（波長 953.5 nm）での光学スペクトルを入射角度に対してプロットしている。赤線は反射スペクトル、青線は透過スペクトル、緑線は回折スペクトル、灰色線は吸収スペクトルを表している。

この例から分かるように、単純に思いつく非対称構造では大きな光学的な非対称性を見つけることは難しい。まして、最適化されるような構造にたどりつくことは至難であると言わざるをえない。系を特徴づけるパラメータ、つまり特定の機能を最適化するような構造探索は手で行うことができるようなものではなく、適切なコンピュータアルゴリズムを活用して行うべきものなのである。

### 1.3. GA の概要

この節では GA の基本的な概念と今回の研究での実装について述べる。遺伝アルゴリズムはすでに確立したものであるので [4]、概要を簡単にまとめる。

本稿の目的に合わせて、「遺伝子」を単位胞構造にとる。図 4 の  $3 \times 5$  のメッシュが一つの遺伝子に対応する。白いメッシュが空気、灰色のメッシュが銀を表している。単位胞が横方向に周期的に並ぶことによって、1次元金属フォトニック結晶スラブを構成する。各遺伝子の優劣は適応度で数値化し、値が大きいものほど優性遺伝子とする。前節で定義した式 (1.1) の非対称パラメータ  $\sigma$  がいまの場合の適応度である。単純な GA (Simple GA, SGA) は図 4 のように図式化できる。

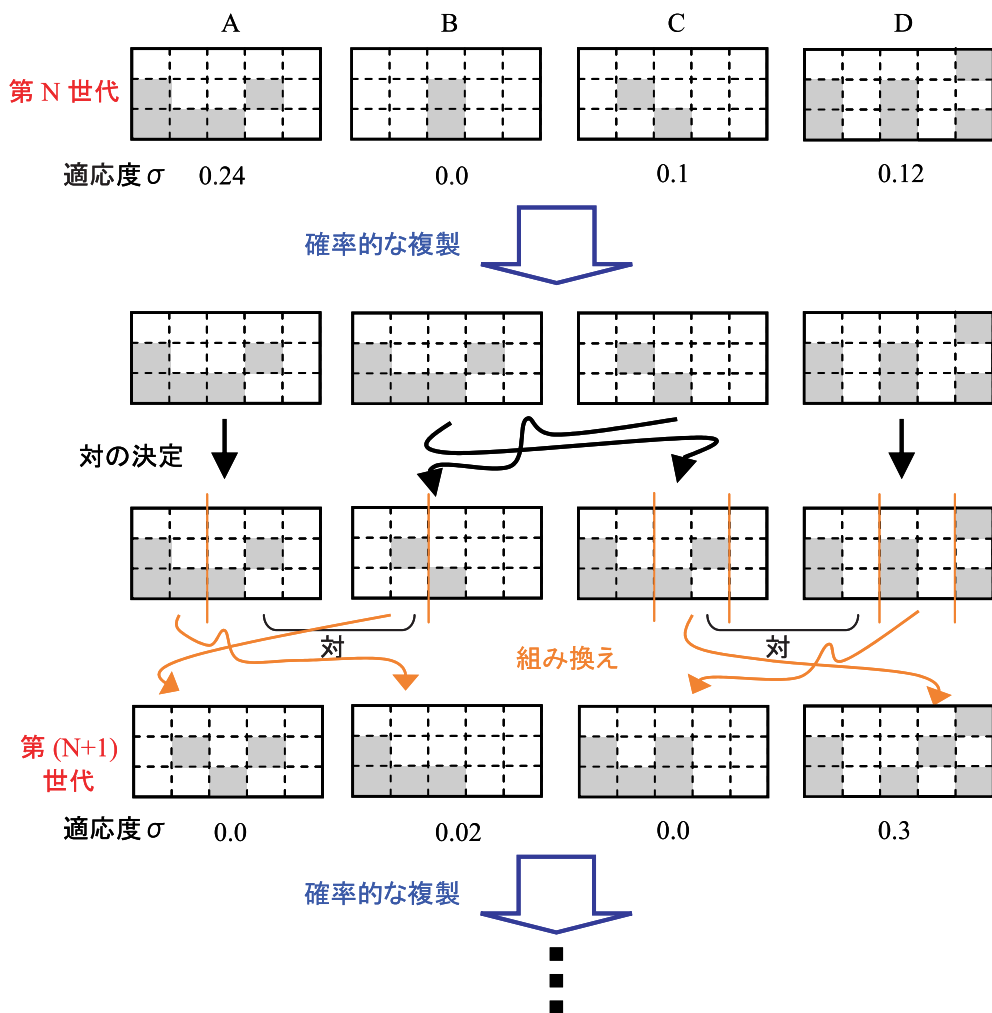


図 4 SGA の概念図。  $3 \times 5$  のメッシュが単位胞構造を表し、一つの遺伝子に対応する。メッシュの灰色部が銀、白色部が空気に対応する。適応度  $\sigma$  の高い遺伝子を選択的につぎの世代に向けて複製され、対形成のあと遺伝子組み換えが行われ、つぎの世代が生成される。

**第一段階（複製）：**

ある世代  $N$  において、遺伝子が与えられたとき、各遺伝子の適応度を評価して求める。適応度をもとに確率的に複製する。図 4 では遺伝子  $B$  は対称的な構造をしているから  $\sigma=0$ 、つまり適応度が  $0$  である。このとき遺伝子  $B$  が複製される確率（遺伝子  $B$  の適応度 ÷ 同世代の各遺伝子の適応度の総和）も  $0$  になり、遺伝子  $B$  は淘汰される。

**第二段階（組み換え）：**

複製された遺伝子はランダムに対を作り、対同士で遺伝子の一部を組み換える。図 4 に示すように、オレンジ色の切れ目によって切り出された遺伝子の一部を塊のまま保持して互いに交配するように設定した。遺伝子内のある塊に優位性の起源がある場合が多く、**Building Block Hypothesis** として知られている。今回もその性質をコードに取り込んで実装した。

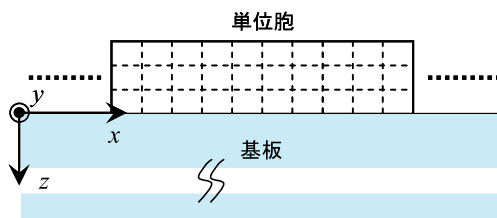
**第三段階（次世代の生成）：**

組み換えによって、つぎの  $(N+1)$  世代が得られ、第一段階に戻って遺伝子の評価、複製を繰り返す。

## 2. GA 探索による光学的な非対称構造

### 2.1. 単位胞構造の定義と GA 探索条件

図 5 は単位胞構造を示す。縦横  $120 \times 500 \text{ nm}^2$  の単位胞を  $3 \times 10$  メッシュに等分割する。各メッシュには銀または空気のいずれかが入るとする。このとき、 $2^{30}$  ( $\approx 10^9$ ) 通りの単位胞構造を表現できる。基板は石英として、十分に厚いものとする。



**図 5** GA 探索用の単位胞構造。  $3 \times 10$  メッシュで単位胞を形成する。各メッシュは縦  $40 \text{ nm}$ 、横  $50 \text{ nm}$  であり、 $x$  軸方向の周期長は  $500 \text{ nm}$ 、スラブの厚さは  $120 \text{ nm}$  である。各メッシュには銀または空気のいずれかが割り当てられる。基板は十分に厚く、材質は石英として光学応答を評価する。

今回の GA 探索では、各世代での遺伝子数を数百から千程度に設定して、10 世代程度までループさせた。初期値である第 1 世代ではランダムに与えて、GA 探索を開始した。遺伝子数、総世代数、初期値のランダムさなどの条件を変えて、試行を繰り返した。

光のエネルギーは  $1.3 \text{ eV}$  で固定して、角度  $\theta = \pm 20^\circ$  に対して式 (1.1) から  $\sigma$  を算出した。入射光の偏光は  $p$  偏光である。この条件下では回折光が出ない。したがって、光学応答として許容なチャンネルは反射光、透過光のみであるから、式 (1.1) の  $\sigma$  で有効なチャンネルをすべて取り込んで表現していることになる。

以上の条件下での結果は確率的なばらつきはあるものの、定性的には同じ傾向を示

した。世代が進むにつれて、 $\sigma$  の値が大きい遺伝子が生成され、 $\sigma=0.4$  を超える大きな非対称構造も得られた。

## 2.2. GA 探索の結果

この節では、各世代の遺伝子数 200、総世代 12 で GA 探索した結果を例に示す。図 6 は左軸に各世代の  $\sigma$  の平均値 (赤丸)、右軸に各世代で最大の  $\sigma$  (青丸) を示す。

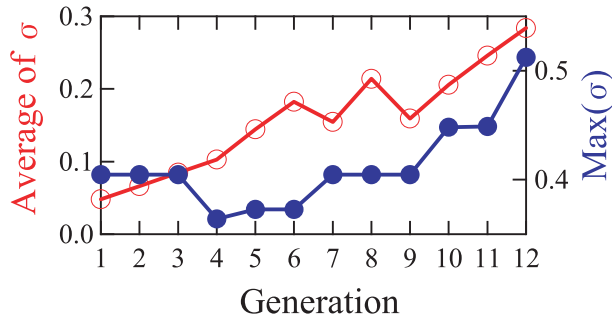


図 6  $\sigma$  の平均 (○印付き赤線、左軸) と各世代の最大値 (●印付き青線、右軸)。

ランダムに生成された第 1 世代は平均値が 0.05 未満と小さく、 $\sigma$  がほぼ 0 の遺伝子が大多数を占める。世代が進むにつれて、平均値は上昇傾向を保ち、最終第 12 世代では平均  $\sigma=0.28$  に達し、第 1 世代の約 6 倍に達する。この結果は SGA が  $\sigma$  を大きくする方向に効果的に働いていることを示している。

一方、各世代における  $\sigma$  の最大値は第 1 世代から  $\sigma=0.4$  程度の優性遺伝子が出現している。しかし、その優性遺伝子を超える遺伝子が現れるのは第 10 世代である。このことは世代における優性遺伝子の割合が高くなると、良いペアリングが起こる確率が高まらないことを示唆している。より優性な遺伝子を生み出すには世代内のよい環境が必要であると理解できる。以上のような傾向は繰り返し行った試行に一貫した傾向であり、GA 探索が首尾よく機能していることが明らかになった。

図 4 に示した SGA から明らかのように優性遺伝子で世代が飽和してくると、自分自身と同じ遺伝子とペアを作り始める。すると、どんな組み合わせをしても同じ遺伝子しか生成されなくなる。GA はこの難点を乗り越えるために、突然変異機構を含有している。つまり、優性遺伝子のある確率でまったく異なる遺伝子に変異させることで、飽和を避ける。しかしながら、ランダムに変異させるのでは、第 1 世代の遺伝子と同じような生成に陥ってしまう。どのような変異が適切であるかは、現在の問題に対してはまだ明らかではない。ただ、図 6 の結果は飽和に達する前段階であり、今回の探索の中では突然変異は重要な問題とはならなかった。

図 7(a) は図 6 のなかで  $\sigma=0.51$  の単位胞構造を示している。図 6 の探索において、第 12 世代に現れる遺伝子である。金属の充填率は 1/6 と小さく単純な構造ながら、 $\sigma$  の平均より 2 倍程度大きな非対称性を示す。

極微細加工技術を用いて、現実的に試料を作製できる構造に改良したものが図 7(b) の構造で、金属を基板と同じ材料で支えるようにした。この微修正によって、反射率が数パーセント大きくなってしまいが、基本的な非対称性には変わりはない。図 7(c) は図 7(b) の単位胞をもつ 1 次元フォトニック結晶スラブの光学スペクトルを高精度に

再計算したものである。光のエネルギーは 1.3 eV で、入射光角度依存性を示している。透過率（青線）に明瞭な非対称性が現れている。反射率（赤線）は相反性から常に対称的であるから、 $\sigma$ によって表される非対称性は吸収（灰色線）の非対称性と直結している。

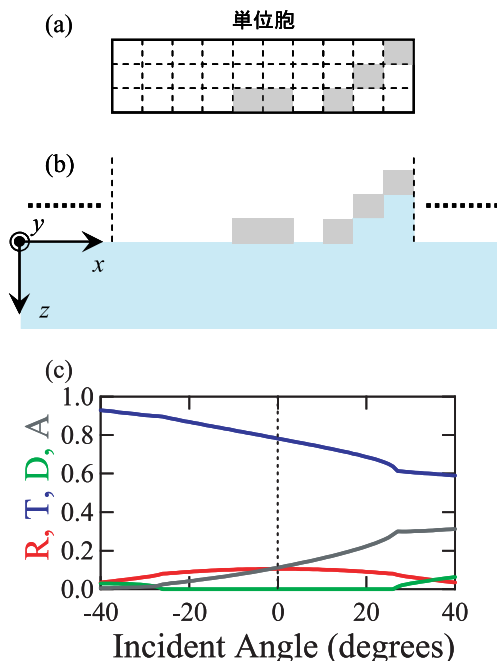


図 7 GA 探索で得られた非対称性の大きい単位胞構造と光学スペクトル。(a) 図 6 での探索で見出された  $\sigma=0.51$  の単位胞構造。(b) 実際の試料作製がおこないやすい構造に少し変形した構造。(c) (b)の単位胞をもつ 1 次元フォトニック結晶スラブの 1.3 eV における光学スペクトルの入射光角度依存性。入射光の偏光は電場  $\mathbf{E}$  が  $xz$  面内にある  $p$  偏光である。赤線は反射率、青線は透過率、緑線は回折効率、灰色は吸収を表す。

### 2.3. リソースの使用状況

ここで図 6 の探索で要した SX-7C のリソースについて触れておきたい。

光学的な非対称構造を見つけることを第一の目的にしたので、計算の高精度さをすこし犠牲にして動作時間を短縮するようにした。具体的には光学応答を計算する散乱行列のサイズを  $740 \times 740$  に抑えた。これによって、4 並列下での CPU 時間は 1 世代、200 個の遺伝子を評価するのに約 2300 秒 (0.64 時間)、1 個の遺伝子評価時間が  $2300/200=11.5$  秒と比較的短時間で実行できた。CPU 時間 (実行時間) は約 8 時間で、ベクトル化率は 99.02%、並列化率 (= User Time / Real Time) は 2.83 であった。

高精度な実行には散乱行列を  $2500 \times 2500$  以上のサイズにする必要があり、1 個の遺伝子を評価するのに 363 秒かかる。図 6 のジョブでは 11.5 秒であったことを考えると、リソースは急激に増加する。この原因は以前にも報告したとおり [1]、複素行列の固有値と固有ベクトルを求める ASL 関数で並列化が困難であることにある。図 7(c) の光学スペクトルは高精度に計算したものであるため、定量的に信頼できる。



## 2.4. 非対称性の起源

今回の GA 探索は回折光が発生しない条件下で実行した。したがって、非対称性の起源は異方的な回折光による寄与によるものではなく、異方的な吸収によるものである。

入射角度が 20 度のときは  $y$  軸に平行な金属のロッド間に生じる共鳴状態を励起していることが光吸収の原因と考えられる。図 8 左に概念的に示すように、金属ロッドに局在するプラズモン共鳴状態であると予想される。

この予想は図 7(b) で階段状になっている部分を 2 段にして、 $xy$  平面上の 2 メッシュ分つながった金属を取り除いた構造で同様の光学スペクトルを計算しても定性的に同じ傾向が確認されたことから支持される。このような金属ロッド間の共鳴状態の詳細は、電磁場分布やエネルギースペクトルの検討から今後明らかにできると考えている。

一方、入射角度が -20 度のときは、吸収が少なく、かつ透過率が高い。このような高透過率が実現する  $p$  偏光下では、金属表面を伝播する表面プラズモンを誘起して、低損失な光伝播を可能にしている場合が多い。図 8 右にその概念図を示している。階段状にならんだ金属を壁として光が伝播することで低損失な光学応答を示していると考えられる。

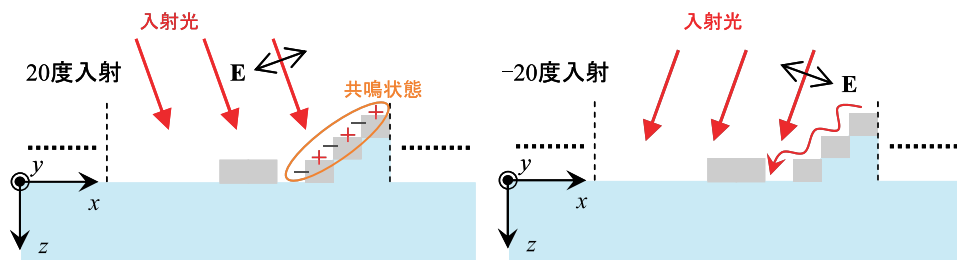


図 8 入射角度 20 度と -20 度の場合で生じる非対称性の起源の概念図。20 度入射の場合は共鳴状態のスナップショットを概念的に示している。時間的には＋が振動する。-20 度入射の場合は階段状の金属壁を伝播するモードが予想される。入射光の偏光は  $p$  偏光である。

今回、GA 探索した結果得られた非対称性の起源は異方性の強いプラズモニック共鳴にあると考えられる。つまり、空間分散の大きなプラズモニック共鳴の利用は光学的な非対称性を得るために効果的である。最小の非対称構造としては金属の充填率が 1/15 でも非対称性が発現することが確認された一方で、図 3 のように充填率が 30% を超える単位胞構造でも光学的な非対称性が非常に小さい場合もある。GA 探索を通じて、このように様々な知見を得ることができた。

## 3. まとめと展望

光機能性をもつ人工周期構造の GA 探索を行い、1 次元金属フォトニック結晶スラブについての結果を中心に述べてきた。この系は比較的単純でありながら、直感に頼って所望の構造を見つけることが困難であるという意味で、GA 探索の有効性を探る良い試金石であった。結果として、想定していなかった大きな光学的非対称性の発現



も見出すことができた。その起源は異方性の強いプラズモニック共鳴であると考えられる。このような系は特定の角度から入射する光を効率的に吸収する構造であり、太陽電池と組み合わせることによって光エネルギー変換の高効率化に貢献することなどが期待できる。特徴ある対象を見出すことで新たな研究テーマの開拓にもつながり、今後の展開が楽しい状況である。

人工構造体の光学特性への GA 応用はこれまでほとんど報告例がなかったが [5]、今後スーパーコンピュータを活用することで様々な探索が実行されると期待できる。

GA 探索の対象を今後 2 次元系、3 次元系へと広げていく際に問題となる膨大な計算時間の短縮に新たなスーパーコンピュータ SX-9 (2008 年 3 月導入) が大いに貢献してくれることを期待したい。

## 謝辞

この研究は情報シナジーセンター (現・サイバーサイエンスセンター) との共同研究として実施され、とくにセンターの大泉氏にはコードの改良にご尽力いただきました。フォトニックバンドの GA 探索では石川理至君の多大なる貢献がありました。この場を借りて各氏に感謝いたします。また、この研究の一部は光科学技術研究振興財団の援助を受けて行われました。

## 参考文献

- [1] 岩長, SENAC **39**(3), 25—32 (2006).
- [2] 岩長, SENAC **40**(3), 5—14 (2007).
- [3] M. Iwanaga, A. S. Vengurlekar, T. Hatano, and T. Ishihara, *Am. J. Phys.* **75**, 899—902 (2007).
- [4] D. E. Goldberg, *Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning* (Addison-Wesley, Boston, 1989).
- [5] L. Shen, Z. Ye, and S. He, *Phys. Rev. B* **68**, 035109 (2003).