

周期性の乱れを含む領域における Helmholtz 方程式の境界値問題の解法について

On a numerical solution of boundary value problems for
Helmholtz' equation in a domain with disturbed periodicity

森田 樹一郎¹⁾, 西村 直志²⁾

Juichiro MORITA and Naoshi NISHIMURA

- 1) 京都大学大学院情報学研究科 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町 E-mail: jmorita@acs.i.kyoto-u.ac.jp)
2) 京都大学大学院情報学研究科 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町 E-mail: nchml@i.kyoto-u.ac.jp)

This paper presents a method of analysis for boundary value problems on a domain with disturbed periodicity for Helmholtz' equation in 2D. Floquet's transform is an important ingredient in our formulation, which converts non-periodic functions into periodic functions. We apply periodic FMM to our problems with the help of Floquet's transform. We then validate the proposed method by comparing numerical results with those obtained with the conventional approaches.

Key Words: BIEM, FMM, Helmholtz' equation, Periodic problems

1. 序論

近年, フォトニック結晶やメタマテリアルをはじめとする周期構造に起因した特徴的な性質を示す物質⁽¹⁾が新たな光学材料として注目を集めている. 例えば, フォトニック結晶は微小な誘電体が周期的に配列した構造を持ち, 周期構造により特定の周波数の波が透過しないストップバンド特性を有することが知られている.

一方, こういった材料の設計のために, 周期構造の波動散乱問題の高速・高精度な数値解法の開発が望まれている. 周期波動問題の数値解法としては有限差分時間領域法や有限要素法, 周期多重境界要素法⁽²⁾などが挙げられるが, このうち, 周期多重境界要素法は特に有効であると考えられる.

実際, 境界要素法は対象とする領域の境界のみの離散化によって解析を行うことができる点から, 特に無限領域での波動散乱問題において有利である特色を持つ⁽³⁾. また, 高速多重極法を適用することで境界要素法の最大の欠点である計算量の問題を大きく改善することが可能である⁽⁴⁾.

周期多重極境界要素法は, 対象領域と入射波が共に周期性を持つような周期領域周期境界値問題に対して, 周期 Green 関数を用い, 周期単位であるユニットセルと多重極法のレベル 0 の box を同一視することでその影響を評価する手法である. これまでに, Helmholtz 方程式⁽²⁾, Maxwell 方程式⁽⁵⁾, Navier-Cauchy の方程式⁽⁶⁾などにおいてその有効性が確認された.

さらに, 対象とする領域は周期的であるが入射波には周期性が無いような周期領域非周期境界値問題にも周期多重極法を用いた解法が提案されている⁽⁷⁾. このような問題は支配方程式の解が周期境界条件を満たさないため, 周期多重極法を直接用いることはできない. しかし, Floquet 変換と組み合わせることで, 周期多重極法を用いて解を求めることが可能になる.

一方, 完全なストップバンド特性を持つフォトニック結晶構造に人為的な欠損部分を作ることによって光の局在モード, あるいは光を自在に伝搬させる導波管を実現できると考えられている. しかしながら, 従来の周期多重極法では, 周期性の乱れを含んだ領域を持つ問題を厳密に扱うことは出来ず, 乱れを含んだ十分大きな周期を持つスーパーセル問題として扱う近似解法が知られているのみである. そこで, 本論文では Helmholtz 方程式を支配方程式とする 2 次元領域において, 入射波は周期的であるが対象領域の周期構造の一部分が欠損している境界値問題に対して, Floquet 変換を用いて周期多重極法を適用するアルゴリズムを提案する. すなわち, 一般に Floquet 変換された関数は周期関数であるという性質を利用して, 非周期境界値問題を周期多重極法の適用が可能な問題へ帰着させる. さらに, 提案手法によって得られた数値解と従来の周期多重極法による近似解との比較により精度の検証を行う.

2. 定式化

2.1. 周期領域周期境界値問題

本論文の主題である周期性の乱れを含んだ領域における境界値問題の解法の定式化を行うためには、完全な周期領域における境界値問題の解法である周期多重極法の諸式が必要になる。そこで本節では、周期領域周期境界値問題の定式化と周期多重極法について必要最小限を記す。周期多重極法の詳細については Otani and Nishimura⁽²⁾ を参照されたい。

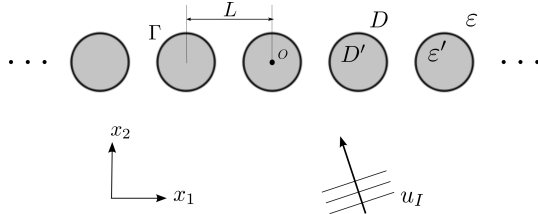


Fig.1 Periodic domain for x_1 axis.

Fig.1 のように x_1 方向に周期 L の周期性を持った 2 次元領域を考える。各周期単位は部分領域 D と D' から成っており、 D は無限領域であるとする。

いま、各領域において Helmholtz 方程式

$$(\Delta + k^2)u_\infty = 0 \quad \text{in } D \quad (1)$$

$$(\Delta + k'^2)u'_\infty = 0 \quad \text{in } D' \quad (2)$$

を満たす解 u_∞, u'_∞ を境界条件

$$\begin{aligned} u_\infty &= u'_\infty \\ \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial u_\infty}{\partial n} &= \frac{1}{\varepsilon'} \frac{\partial u'_\infty}{\partial n} \end{aligned} \quad \text{on } \Gamma \quad (3)$$

と周期境界条件

$$\begin{aligned} u_\infty(x_1 + L, x_2) &= e^{i\beta} u_\infty(x_1, x_2) \\ \frac{\partial u_\infty}{\partial x_1}(x_1 + L, x_2) &= e^{i\beta} \frac{\partial u_\infty}{\partial x_1}(x_1, x_2) \end{aligned} \quad (4)$$

および、 D における散乱波 $u_\infty^s = u_\infty - u_I$ に対する放射条件のもとで解く。ここに、 u_∞, u'_∞ はそれぞれ各領域の閉包 \bar{D}, \bar{D}' で定義される関数、 $k = \omega \sqrt{\varepsilon}, k' = \omega \sqrt{\varepsilon'}$ は波数、 ω は角振動数、 β は位相差、 $\varepsilon, \varepsilon'$ はそれぞれ領域 D, D' における誘電率、 Γ は $\partial D \cap \partial D'$ を表す。入射波 u_I は平面波とし、 u_I の法線微分を q_I とする。また、 $\frac{\partial}{\partial n}$ は法線微分であり法線ベクトルの向きは D' から D 側を向いた方向に定める。

上記の問題に対応する境界積分方程式は次のように表現される。

$$\begin{pmatrix} -(D^{-\beta} + D') & (\varepsilon S^{-\beta} + \varepsilon' S') \\ -(\frac{1}{\varepsilon} N^{-\beta} + \frac{1}{\varepsilon'} N') & (D^{*\beta} + D'^*) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_\infty \\ q_\infty \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_I \\ q_I \end{pmatrix} \quad (5)$$

ここに、 $S, D, D^*, N, S^{-\beta}, D^{-\beta}, D^{*\beta}, N^{-\beta}$ は、それぞれ

$$Sv = \int_\Gamma G(\mathbf{x} - \mathbf{y})v(\mathbf{y})dS_y \quad (6)$$

$$Dv = \int_\Gamma \frac{\partial G(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\partial n_y} v(\mathbf{y})dS_y \quad (7)$$

$$D^*v = \int_\Gamma \frac{\partial G(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\partial n_x} v(\mathbf{y})dS_y \quad (8)$$

$$Nv = \int_\Gamma \frac{\partial^2 G(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\partial n_x \partial n_y} v(\mathbf{y})dS_y \quad (9)$$

$$S^{-\beta}v = \int_\Gamma G^{-\beta}(\mathbf{x} - \mathbf{y})v(\mathbf{y})dS_y \quad (10)$$

$$D^{-\beta}v = \int_\Gamma \frac{\partial G^{-\beta}(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\partial n_y} v(\mathbf{y})dS_y \quad (11)$$

$$D^{*\beta}v = \int_\Gamma \frac{\partial G^{-\beta}(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\partial n_x} v(\mathbf{y})dS_y \quad (12)$$

$$N^{-\beta}v = \int_\Gamma \frac{\partial^2 G^{-\beta}(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\partial n_x \partial n_y} v(\mathbf{y})dS_y \quad (13)$$

で定義される積分作用素であり、 G は 2 次元 Helmholtz 方程式の基本解

$$G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \frac{i}{4} H_0^{(1)}(k|\mathbf{x} - \mathbf{y}|) \quad (14)$$

を、 $G^{-\beta}$ は周期境界条件を満たす周期 Green 関数

$$G^{-\beta}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\beta n} G(\mathbf{x} - \mathbf{y} - nL\mathbf{e}_1) \quad (15)$$

を表している。 $G^{-\beta}$ という表記は後で導入する Floquet 変換との整合性からこのようにした。また、 $H_n^{(1)}$ は n 次の第一種 Hankel 関数、 $q_\infty = \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial u_\infty}{\partial n} = \frac{1}{\varepsilon'} \frac{\partial u'_\infty}{\partial n}$ であり、 \mathbf{e}_1 は x_1 方向の単位ベクトルを表す。

周期高速多重極法とは、与えられた u, q に対して、式 (5) の左辺を高速に計算する手法である。式 (5) を離散化して得られる線形方程式を反復法で解くことにより、これを効率良く解くことができる。

2.2. 周期性に乱れを含む領域における境界値問題

本節以降では周期性に乱れのある領域における境界値問題を考える。

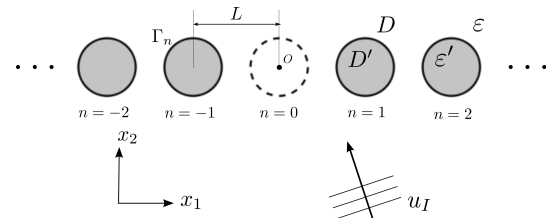


Fig.2 Domain with disturbed periodicity.

Fig.2 のように x_1 方向に周期 L の周期性を持った 2 次元領域において、周期構造の一部 ($n = 0$) が欠損している問題を考える。領域は部分領域 D と D' から成っており、 D は無限領域であるとする。また $(n - 1/2)L < x_1 < (n + 1/2)L$ の部分において $\Gamma_n = \partial D \cap \partial D'$ とする。 $n = 0$ においては物理的な境界は存在しないが定式化の便宜上、仮想境界 Γ_0 を定義しておく。

いま, 各領域において Helmholtz 方程式

$$(\Delta + k^2)u = 0 \quad \text{in } D \quad (16)$$

$$(\Delta + k^2)u' = 0 \quad \text{in } D' \quad (17)$$

を満たす解 u を, 境界条件

$$\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial u}{\partial n} = \frac{1}{\varepsilon'} \frac{\partial u'}{\partial n} \quad \text{on } \Gamma = \bigcup_{n \neq 0} \Gamma_n \quad (18)$$

および, D における散乱波 $u^s = u - u_l$ に対する放射条件のもとで求める. 以下では簡単のため, 周期長を $L = 1$ とし, u_l は平面波の場合のみを考える.

上記の問題に対応する境界積分方程式は次のように表現される.

$$\begin{aligned} \frac{u_m(\mathbf{x})}{2} &= u_l(\mathbf{x}) + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{\Gamma_n} \frac{\partial G(\mathbf{x} - \mathbf{y} - n\mathbf{e}_1)}{\partial n_y} u_n(\mathbf{y}) dS_y \\ &\quad - \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{\Gamma_n} \varepsilon G(\mathbf{x} - \mathbf{y} - n\mathbf{e}_1) q_n(\mathbf{y}) dS_y \\ &\quad \mathbf{x} \in \Gamma_m \quad (m \in \mathbb{Z}) \quad (19) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{q_m(\mathbf{x})}{2} &= q_l(\mathbf{x}) + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{\Gamma_n} \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial^2 G(\mathbf{x} - \mathbf{y} - n\mathbf{e}_1)}{\partial n_x \partial n_y} u_n(\mathbf{y}) dS_y \\ &\quad - \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{\Gamma_n} \frac{\partial G(\mathbf{x} - \mathbf{y} - n\mathbf{e}_1)}{\partial n_x} q_n(\mathbf{y}) dS_y \\ &\quad \mathbf{x} \in \Gamma_m \quad (m \in \mathbb{Z}) \quad (20) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{u_n(\mathbf{x})}{2} &= - \int_{\Gamma_n} \frac{\partial G'(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\partial n_y} u_n(\mathbf{y}) dS_y \\ &\quad + \varepsilon' \int_{\Gamma_n} G'(\mathbf{x} - \mathbf{y}) q_n(\mathbf{y}) dS_y \\ &\quad \mathbf{x} \in \Gamma_n \quad (n \neq 0) \quad (21) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{q_n(\mathbf{x})}{2} &= - \int_{\Gamma_n} \frac{1}{\varepsilon'} \frac{\partial^2 G'(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\partial n_x \partial n_y} u_n(\mathbf{y}) dS_y \\ &\quad + \int_{\Gamma_n} \frac{\partial G'(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\partial n_x} q_n(\mathbf{y}) dS_y \\ &\quad \mathbf{x} \in \Gamma_n \quad (n \neq 0) \quad (22) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{u_0(\mathbf{x})}{2} &= - \int_{\Gamma_0} \frac{\partial G(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\partial n_y} u_0(\mathbf{y}) dS_y \\ &\quad + \varepsilon \int_{\Gamma_0} G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) q_0(\mathbf{y}) dS_y \\ &\quad \mathbf{x} \in \Gamma_0 \quad (23) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{q_0(\mathbf{x})}{2} &= - \int_{\Gamma_0} \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial^2 G(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\partial n_x \partial n_y} u_0(\mathbf{y}) dS_y \\ &\quad + \int_{\Gamma_0} \frac{\partial G(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\partial n_x} q_0(\mathbf{y}) dS_y \\ &\quad \mathbf{x} \in \Gamma_0 \quad (24) \end{aligned}$$

ここに, 関数 u_n, q_n はそれぞれ関数 u, q の定義域を Γ_n に制限したものである.

2.3. Floquet 変換

2.2 節に示した境界値問題は u, q が周期境界条件を満たさないため, そのままでは周期多重極法で解くことはできない. そこで, 境界積分方程式に Floquet 変換を施す.

1 変数関数 $f(x)$ に対する Floquet 変換 $f^\alpha(x)$ を次式で定義する.

$$f^\alpha(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(x+n) e^{ian} \quad (25)$$

以下では, $f^\alpha(x)$ のように関数の Floquet 変換を上付き添字 α で表すことにする. また, 逆 Floquet 変換は次式で与えられる.

$$f_n(x) = f(x+n) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f^\alpha(x) e^{-ian} d\alpha \quad (26)$$

一般に, Floquet 変換された関数 $f^\alpha(x)$ は次のような周期性を持つ.

$$f^\alpha(x+n) = f^\alpha(x) e^{-ian} \quad (27)$$

また公式

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ian} = 2\pi \delta(\alpha) \quad (-\pi < \alpha < \pi) \quad (28)$$

より, 位相差 β の周期性 (4) をもつ関数 u_∞, q_∞ の Floquet 変換を $u_\infty^\alpha, q_\infty^\alpha$ とすると,

$$u_\infty^\alpha = 2\pi \delta(\alpha + \beta) u_\infty \quad (29)$$

$$q_\infty^\alpha = 2\pi \delta(\alpha + \beta) q_\infty \quad (30)$$

となる. ここに, $\delta(\alpha)$ は Dirac のデルタ関数である. 特に, 入射波は (29), (30) を満足する.

2.4. Floquet 変換された積分方程式

Floquet 変換された積分方程式は次のように表される.

$$\begin{aligned} &\begin{pmatrix} -(D^\alpha + D') & (\varepsilon S^\alpha + \varepsilon' S') \\ -(\frac{1}{\varepsilon} N^\alpha + \frac{1}{\varepsilon'} N') & (D^{*\alpha} + D^{*'}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^\alpha \\ q^\alpha \end{pmatrix} \\ &+ \begin{pmatrix} -(D - D') & (\varepsilon S - \varepsilon' S') \\ -(\frac{1}{\varepsilon} N - \frac{1}{\varepsilon'} N') & (D^* - D^{*'}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0 \\ q_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_l^\alpha \\ q_l^\alpha \end{pmatrix} \quad (31) \end{aligned}$$

領域の周期性に乱れを含んだ問題の解 u_n, q_n と周期領域周期境界値問題の解 u_∞, q_∞ の差を Γ_n に制限したものを \tilde{u}_n, \tilde{q}_n とすると, u_n, q_n は次のように書ける.

$$u_n(\mathbf{x}) = u_\infty(\mathbf{x}) e^{i\beta n} + \tilde{u}_n(\mathbf{x}) \quad (32)$$

$$q_n(\mathbf{x}) = q_\infty(\mathbf{x}) e^{i\beta n} + \tilde{q}_n(\mathbf{x}) \quad (33)$$

領域の周期性に乱れを含んだ問題の解は漸的に周期領域周期境界値問題の解 u_∞, q_∞ に近づくものと考えられるので \tilde{u}_n は $n \rightarrow \infty$ のとき 0 に近づくものとする. 式 (29), (30), (32), (33) より u, q の Floquet 変換は

$$u^\alpha(\mathbf{x}) = 2\pi \delta(\alpha + \beta) u_\infty(\mathbf{x}) + \tilde{u}^\alpha(\mathbf{x}) \quad (34)$$

$$q^\alpha(\mathbf{x}) = 2\pi \delta(\alpha + \beta) q_\infty(\mathbf{x}) + \tilde{q}^\alpha(\mathbf{x}) \quad (35)$$

であり、積分方程式 (31) は

$$2\pi\delta(\alpha + \beta) \left\{ \begin{pmatrix} u_l \\ q_l \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -(D^{-\beta} + D') & (\varepsilon S^{-\beta} + \varepsilon' S') \\ -(\frac{1}{\varepsilon} N^{-\beta} + \frac{1}{\varepsilon'} N') & (D^{*\beta} + D^{*\prime}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_\infty \\ q_\infty \end{pmatrix} \right\} \\ - \begin{pmatrix} (D - D') & -(\varepsilon S - \varepsilon' S') \\ (\frac{1}{\varepsilon} N - \frac{1}{\varepsilon'} N') & -(D^* - D^{*\prime}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0 \\ q_0 \end{pmatrix} \\ + \begin{pmatrix} -(D^\alpha + D') & (\varepsilon S^\alpha + \varepsilon' S') \\ -(\frac{1}{\varepsilon} N^\alpha + \frac{1}{\varepsilon'} N') & (D^{*\alpha} + D^{*\prime}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{u}^\alpha \\ \tilde{q}^\alpha \end{pmatrix} = 0 \quad (36)$$

となる。式 (36) は、次の 2 つの式が満たされるとき成立する。

$$\begin{pmatrix} -(D^{-\beta} + D') & (\varepsilon S^{-\beta} + \varepsilon' S') \\ -(\frac{1}{\varepsilon} N^{-\beta} + \frac{1}{\varepsilon'} N') & (D^{*\beta} + D^{*\prime}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_\infty \\ q_\infty \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_l \\ q_l \end{pmatrix} \quad (37)$$

$$\begin{pmatrix} -(D^\alpha + D') & (\varepsilon S^\alpha + \varepsilon' S') \\ -(\frac{1}{\varepsilon} N^\alpha + \frac{1}{\varepsilon'} N') & (D^{*\alpha} + D^{*\prime}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{u}^\alpha \\ \tilde{q}^\alpha \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} (D - D') & -(\varepsilon S - \varepsilon' S') \\ (\frac{1}{\varepsilon} N - \frac{1}{\varepsilon'} N') & -(D^* - D^{*\prime}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0 \\ q_0 \end{pmatrix} \quad (38)$$

したがって、本研究では式 (37), (38) を解く。式 (37) は式 (5) に一致すること、及び式 (37), (38) はともに周期多重極法を用いて解くことができる点に注意する。ここで、式 (26), (32), (33) より

$$u_0(x) = u_\infty(x) + \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \tilde{u}^\alpha(x) d\alpha \quad (39)$$

$$q_0(x) = q_\infty(x) + \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \tilde{q}^\alpha(x) d\alpha \quad (40)$$

が制約条件として課される。

また、解 \tilde{u}^α , \tilde{q}^α が得られると、 n 番目の周期単位における解 u_n , q_n は式 (26) を用いて次のように計算できる。

$$u_n(x) = u_\infty(x) e^{i\beta n} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \tilde{u}^\alpha(x) e^{-i\alpha n} d\alpha \quad (41)$$

$$q_n(x) = q_\infty(x) e^{i\beta n} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \tilde{q}^\alpha(x) e^{-i\alpha n} d\alpha \quad (42)$$

2.5. 数値計算法

本研究で用いた式 (37), (38), (39), (40) の数値計算方法を以下に示す。

1. 積分方程式 (37) を u_∞ , q_∞ について周期多重極法を用いて解く。
2. u_0 , q_0 の初期値を $u_0 = u_\infty$, $q_0 = q_\infty$ とする。
3. 与えられた u_0 , q_0 に対して積分方程式 (38) を \tilde{u}^α , \tilde{q}^α について周期多重極法を用いて解く。このとき 4. で \tilde{u}^α の α に関する数値積分 (39), (40) を計算するため、数値積分法が要求する α の数に応じて繰り返し周期多重極法を実行する。
4. 制約条件 (39), (40) より u_0 , q_0 を求める。

5. 上記の 3 と 4 を各反復毎の u_0 , q_0 の相対誤差が十分に収束するまで反復して計算を行う。数値計算例では停止条件を $\frac{\|\tilde{u}^{(k)} - \tilde{u}^{(k-1)}\|_{L_2(\Gamma_0)}}{\|\tilde{u}^{(k)}\|_{L_2(\Gamma_0)}} < 10^{-5}$ とした。ここに $\tilde{u}^{(k)}$ は k 回の反復計算を行ったときの \tilde{u} の値である。

6. 式 (41), (42) より u_n , q_n を計算する。

なお、4. において式 (39), (40) の被積分関数は $\alpha = \pm k + 2n\pi$ において、一般に何らかの特異性を持つ。この特異性は Rayleigh の anomaly と呼ばれる。Rayleigh の anomaly は積分区間 $[-\pi, \pi]$ において最大で 2 点存在する。この 2 点を α^\pm とする。区間 $[-\pi, \pi]$ を 3 つの区間 $[\pi, \alpha^-]$, $[\alpha^-, \alpha^+]$, $[\alpha^+, \pi]$ に分割して積分を行う。ここでの数値積分の計算には Gauss 求積法を用いる。数値計算例では、各区間における数値積分の分点数をそれぞれ 20 とした。

3. 数値計算例

本節では 2.5 節に示した手法を用いて 2.2 節で定式化した問題を解き、得られた計算結果を示す。以下では各周期単位に含まれる領域は半径 0.4 の円であるとし、 $\omega = 2.0$ とした。なお、周期多重極法における線型方程式の反復解法には GMRES を用い、その許容誤差を 1.0×10^{-5} とした。また、線型方程式には Calderon の式に基づく前処理⁽⁸⁾ を施した。

3.1. 反復回数

外部の領域の誘電率 $\varepsilon = 1.0$ に対して散乱体内部の誘電率 ε' の値を変化させたとき、相対誤差 $\frac{\|\tilde{u}^{(k)} - \tilde{u}^{(k-1)}\|_{L_2(\Gamma_0)}}{\|\tilde{u}^{(k)}\|_{L_2(\Gamma_0)}}$ が 10^{-5} を下回るまでに要した反復回数を Fig. 3 に示す。誘電率のコントラストが大きくなるにつれ反復回数が増加していることがわかる。また、 $\varepsilon < \varepsilon'$ の場合には特異点が現れることがあり、その近傍では収束が遅くなっていることが見てとれる。一方、 $\varepsilon > \varepsilon'$ の場合には、このような特異点は現れないことが知られている⁽⁹⁾。

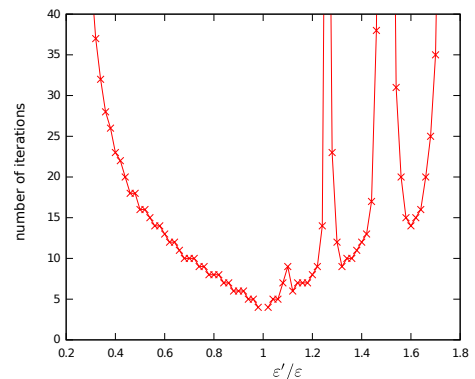


Fig. 3 The number of iterations v.s. permittivity of inclusion.

3.2. $\varepsilon > \varepsilon'$ の場合

まず、外部の領域の誘電率 ε に対して、内部の領域の誘電率 ε' が小さい場合について数値計算例を示す。 $\varepsilon > \varepsilon'$ のとき、Rayleigh の anomaly 以外の特異点は現れない。このことは式 (39) の被積分関数の分布から確かめることができ

る。式 (39) の被積分関数 $\tilde{u}^\alpha(x)$ の実部を, x を固定して α に関してプロットして, Fig.4 を得た。同図は誘電率をそれぞれ $\varepsilon = 1.0$, $\varepsilon' = 0.5$, 入射角を $\phi = 1.0[\text{rad}]$ としたときの境界上の点 $x = (0.135, 0.376)$ におけるグラフである。これより, $\alpha \approx \pm 2.60$ に Rayleigh の anomaly による特異点が現れていることが確認できる。

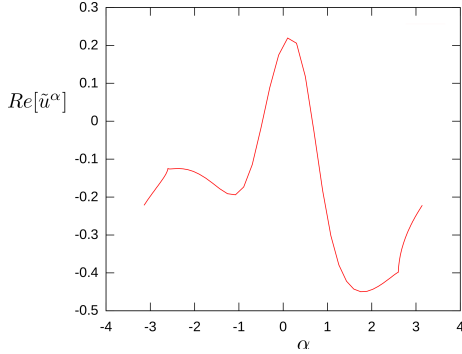


Fig. 4 The integrand of the inverse Floquet transform v.s. Floquet parameter α in the case of $\varepsilon > \varepsilon'$.

提案手法の妥当性を検証するため, 同様の問題を従来の周期多重極法で解き, 計算結果の比較を行った。ここでは参照解として Fig.5 のように, Fig.2 の問題の周期単位 L の N 倍の周期単位を持ち, 各周期単位が欠損部分を含むようなスーパーセル問題を考える。この問題は従来の周期多重極法で解くことができ, さらにスーパーセル問題の解は NL が大きくなるにつれて 2.2 節の解に近づくと考えられる。周期境界値問題

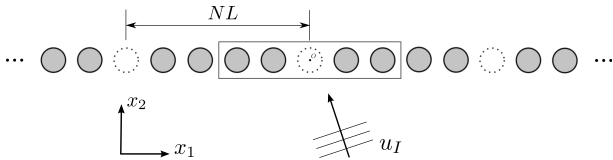


Fig. 5 Supercell problem ($NL = 5.0$).

の周期長 $NL = 5$, 誘電率をそれぞれ $\varepsilon = 1.0$, $\varepsilon' = 0.5$, 入射角を $\phi = 1.0[\text{rad}]$ としたときの, 境界上での解 $u(x)$ の実部の x に関するプロットを Fig. 6 に示す。提案手法による解とスーパーセル問題の解が良く一致している。また, NL を変化させたときのスーパーセル問題の数値解 $u_{\text{conv}}(x)$ と提案手法による解 $u(x)$ の Γ_0 における相対誤差 $\frac{|u - u_{\text{conv}}|}{|u|}$ の最大値を Fig. 7 に示す。これより NL が大きくなるにつれ, $u_{\text{conv}}(x)$ が $u(x)$ に近づいていることがわかる。

3.3. $\varepsilon < \varepsilon'$ の場合

次に, 外部の領域の誘電率に対して, 内部の領域の誘電率が大きい場合について数値計算例を示す。

誘電率をそれぞれ $\varepsilon = 1.00$, $\varepsilon' = 1.20$, 入射波の周波数 $\omega = 6.41$ 入射角を $\phi = 0.5[\text{rad}]$ としたとき, $x = (0.135, 0.376)$ における (39) の被積分関数 $\tilde{u}^\alpha(x)$ の実部を α に関してプロットしたものが, Fig.8 である。

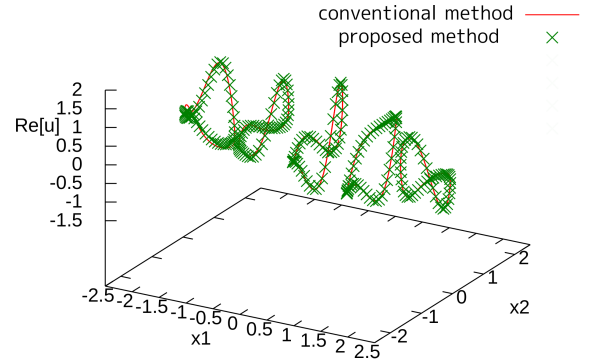


Fig. 6 Comparison of the result with proposed method and that with supercell approximation

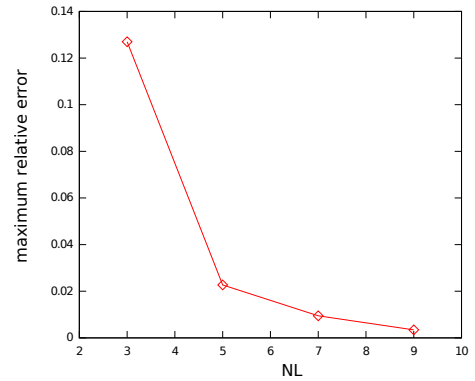


Fig. 7 Maximum relative error v.s. period of supercell (NL).

$\alpha \approx \pm 0.124$ の Rayleigh の anomaly 以外に, $\alpha \approx \pm 0.27$ の付近に anomaly が現れていることが見てとれる。この点において被積分関数は一見, 発散しているように見えるが, ピークの値は有限値であることを確認した。実際, この値が無限大になるのであれば, 対応する α に対して導波モードが存在することになる。このようなモードはいわゆる embedded mode⁽⁹⁾ である。しかし, その様なモードは散乱体の形が x_2 に対して対称で $\alpha = 0$ のときに存在することが知られているが, それ以外では知られておらず, ここでもいわゆる Leaky mode になっていると考えられる。

$\varepsilon < \varepsilon'$ のもとで入射波の周波数を変化させたときの提案手法による解とスーパーセル問題 ($NL = 5.0$, $NL = 7.0$, $NL = 9.0$) の解との比較を行った。誘電率をそれぞれ $\varepsilon = 1.0$, $\varepsilon' = 1.2$, 入射角を $\phi = 0.5[\text{rad}]$ とし, 境界上の点 $x = (0.388, 0.098)$ における解を Fig. 9 に示す。ここでの式 (41),(42) の数値積分の計算では, 3 つの区間 $[\pi, \alpha^-]$, $[\alpha^-, \alpha^+]$, $[\alpha^+, \pi]$ について分点数をそれぞれ 100 とした。この結果からスーパーセル問題の場合には, 欠損部分が周期的に含まれていることにより生じる特異点が現れていると考えられる。また, $\varepsilon > \varepsilon'$ の場合と比べて, 提案手法による解とスーパーセルによる近似解は良好な一致を示さなかった。この原因として以下の 2 つが考えられる。

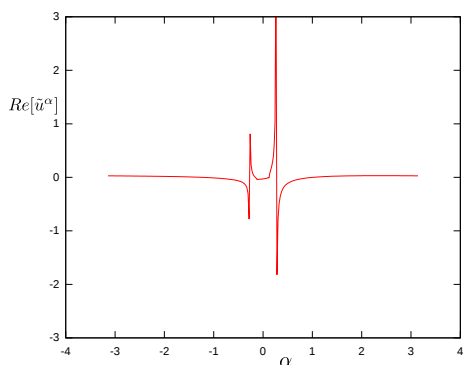


Fig. 8 The integrand of the inverse Floquet transform v.s. Floquet parameter α in the case of $\varepsilon < \varepsilon'$.

- スーパーセル問題において、欠損部分の周期性に起因した anomaly が発生するため、 $NL \rightarrow \infty$ としたときに、スーパーセル問題の解が収束しない可能性がある。
- Fig. 8 に示したように、式 (39), (40) の被積分関数に現れるピークの影響により、数値積分の精度が悪化している可能性もある。

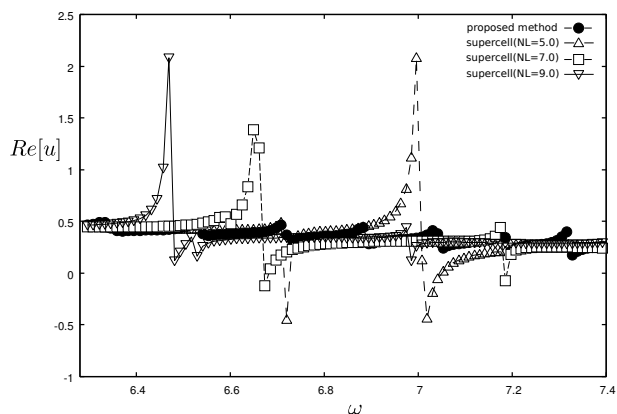


Fig. 9 Comparison of the result with proposed method and that with supercell approximation

4. 結論

本研究では、周期性の乱れを含んだ領域における境界値問題に対して、Floquet 変換を用いることにより周期多重極法を適用して数値解を計算する手法を提案した。第 3 節の結果より、Rayleigh の anomaly 以外の特異点の現れない、散乱体内

部の誘電率が外部の誘電率よりも小さい場合について、計算結果の妥当性が確かめられた。

しかし、散乱体内部の誘電率が外部の誘電率よりも大きい場合には、Wood の anomaly と総称される Rayleigh の anomaly とは異なる性質を持つ anomaly が現れることがあり、スーパーセル近似は現実的でない事があり得る。この場合、本手法のような厳密な解法が必要であると考えられる。ただし、本手法も現状では精度上の問題や収束性能など、改善の余地が多くあり、今後の研究が必要である。

参考文献

- (1) L. Brillouin: Wave Propagation in Periodic Structures, Dover Publication, 2003.
- (2) Y. Otani, N. Nishimura: An FMM for periodic boundary value problems for cracks for Helmholtz' equation in 2D, International Journal for Numerical Method in Engineering, 73, pp.381–406, 2008.
- (3) 小林昭一 (編): 波動解析と境界要素法, 京都大学学術出版会, 2000.
- (4) Y. J. Liu, N. Nishimura: The fast multipole boundary element method for potential problem: A tutorial, Engineering Analysis with Boundary Elements 30, pp.371–381, 2006.
- (5) Y. Otani, N. Nishimura: A periodic FMM for Maxwell's equations in 3D and its applications to problems related to photonic crystals. Journal of Computational Physics, 227, pp. 4630–4652, 2008.
- (6) 飯盛浩司, 吉川仁, 西村直志: 3次元動弾性学における周期多重極法とその平面 2 周期構造による散乱問題への適用, 応用力学論文集, 13, pp. 169–178, 8 2010.
- (7) 新納和樹, 西村直志: 周期多重極法を用いた Helmholtz 方程式の周期領域非周期境界値問題の解法, 計算工学講演会論文集, 13, pp.155–158, 2008.
- (8) 新納和樹, 西村直志: 2次元 Helmholtz 方程式の 1 周期境界値問題に対する Calderon の式に基づく前処理について, 計算数理工学論文集, 9, pp. 1–6, 2009.
- (9) A. S. Bonnet-Bendhia, F. Starling: Guided waves by electromagnetic gratings and non-uniqueness examples for the diffraction problems, Mathematical Methods in the Applied Sciences, 17, pp. 305–338, 1994.