

# 殆ど周期的な構造における Helmholtz 方程式の 境界値問題の解法の改良について

An improved method of solution of almost periodic boundary value problems for Helmholtz' equation

森田 樹一郎<sup>1)</sup>, 西村 直志<sup>2)</sup>

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 an improved method of analysis for boundary value problems on a domain with disturbed periodicity for Helmholtz' equation in 2D. Our previous efforts on the same problem have shown needs of improving the numerical integrations in the inverse Floquet transform in connection with the resonance anomalies. In this paper, we propose to locate resonance anomalies on the integration paths of the inverse Floquet transform by using the SS method. The paths of integration are modified consistently. We also propose a new iterative method to determine the unknowns, which is seen to be good-conditioned mathematically. Numerical examples show the effectiveness of the proposed methods.

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

## 1. 序論

周期構造における波動散乱問題の解析手法は、フォトリック結晶やメタマテリアル<sup>(1)</sup>といった光学の分野への応用が期待されており、近年盛んに研究が行われている。そのため、周期構造における波動散乱問題の高速・高精度な数値解法が研究されている。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等が用いられているが、我々の開発した周期多重極境界要素法<sup>(2)</sup>も、特に無限領域での波動散乱問題において有効である<sup>(3)</sup>。

周期多重極法は領域と入射波が共に周期性を持ち、支配方程式の解が周期境界条件を満たす場合しか扱うことができないが、Floquet 変換と組み合わせることで、これ以外の問題も解くことが可能になる。これまでに、対象とする領域は周期的であるが入射波には周期性がない問題<sup>(4)</sup>や、周期構造の一部が欠陥を有する領域における波動散乱問題の解法も提案されている<sup>(7)</sup>。特に後者は、例えば、人為的な欠陥部分を持つフォトリック結晶構造の解析に応用でき、そのような構造は光を自在に伝搬させたり、蓄えたりするために利用できると考えられている。

しかし、周期構造の一部に乱れを含んだ領域における波動散乱問題を解く際に Floquet 変換を用いた場合、解は逆 Floquet 変換として Floquet 波数に関する有限区間での積分で与えられる。しかし、被積分関数に現れる resonance type の anomaly

の影響により、数値積分の精度、あるいは数値解の収束性が悪化する場合があることが知られている<sup>(7)</sup>。resonance type の anomaly の位置は境界値問題の固有値に対応しており、その位置を特定するためには、考えている境界値問題に対する非線形固有値問題を解く必要がある。

周期波動散乱問題の固有値解析に対しては、一般化固有値問題に対して与えられた複素領域内に存在する固有値と固有ベクトルを周回積分を用いて求める手法である Sakurai-Sugiura(SS)法<sup>(5)</sup>が有効であると考えられる。実際、SS法は境界要素法における固有値問題のような非線形問題に対しても適用が可能であり、固有値の数や位置の特定が困難な問題に対しても有効である。また、2次元 Helmholtz 方程式の周期境界値問題に対して SS法と周期多重極法を用いた固有値解析が可能であることが示されている<sup>(6)</sup>。

そこで、本研究では欠陥を有する周期領域の波動問題を精度よく解くため、SS法を用いた境界値問題の固有値解析を行い、resonance type の anomaly の位置を特定した後、Floquet 波数を複素数に拡張し、複素平面内で anomaly を回避するように積分経路の変更を行うことで数値解の精度、および収束性を改善する手法を提案する。また、数値解の収束性を改善するため、解を求める際に用いる方程式の再構成を行う。このようにして得られた新しい方程式が良条件であることを示し、数値実験によって提案手法の有効性を検証する。

## 2. 定式化

### 2.1. 周期領域周期境界値問題

本小節では、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。定式化については森田, 西村<sup>(7)</sup>を, 周期多重極法の詳細については Otani and Nishimura<sup>(2)</sup>を参照されたい。

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。

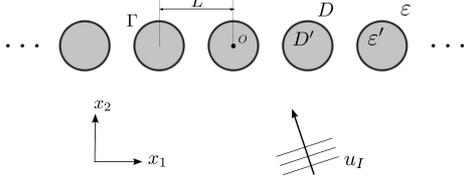


Fig.1 1 periodic domain

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  $u_\infty$  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

$$\begin{aligned} u_\infty(L/2, x_2) &= e^{i\beta} u_\infty(-L/2, x_2) \\ \frac{\partial u_\infty}{\partial x_1}(L/2, x_2) &= e^{i\beta} \frac{\partial u_\infty}{\partial x_1}(-L/2, x_2) \end{aligned} \quad (4)$$

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,  $u_\infty, u'_\infty$  は  $D, D'$  から境界への  $u_\infty$  の極限值,  $k = \omega\sqrt{\varepsilon}$ ,  $k' = \omega\sqrt{\varepsilon'}$  はそれぞれ領域  $D, D'$  における波数,  $\omega$  は角振動数,  $\beta$  は Floquet 波数 (入射波の周期端での位相差),  $\varepsilon, \varepsilon'$  はそれぞれ領域  $D, D'$  における誘電率,  $\Gamma$  は  $\partial D \cap \partial D'$  を表す。入射波  $u_I$  は平面波とする。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すことができる。

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

ここに,  $S', D', D^{*\beta}, N'$  は,

$$\begin{aligned} S'v &= \int_\Gamma G(\mathbf{x}-\mathbf{y})v(\mathbf{y})dS_y, & D'v &= \int_\Gamma \frac{\partial G(\mathbf{x}-\mathbf{y})}{\partial n_y}v(\mathbf{y})dS_y, \\ D^{*'}v &= \int_\Gamma \frac{\partial G(\mathbf{x}-\mathbf{y})}{\partial n_x}v(\mathbf{y})dS_y, & N'v &= \int_\Gamma \frac{\partial^2 G(\mathbf{x}-\mathbf{y})}{\partial n_x \partial n_y}v(\mathbf{y})dS_y \end{aligned}$$

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

$$G(\mathbf{x}-\mathbf{y}) = \frac{i}{4} H_0^{(1)}(k|\mathbf{x}-\mathbf{y}|) \quad (6)$$

を表し,  $G'$  は  $G$  で  $k$  を  $k'$  に置き換えたものである。また,  $S^{-\beta}, D^{-\beta}, D^{*\beta}, N^{-\beta}$  は  $S$  等で  $G$  を  $G^{-\beta}$  置き換えたものであり,  $G^{-\beta}$  は周期境界条件 (4) を満たす周期 Green 関数

$$G^{-\beta}(\mathbf{x}-\mathbf{y}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\beta n} G(\mathbf{x}-\mathbf{y}-nL\mathbf{e}_1) \quad (7)$$

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,  $q_n = \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial u_n}{\partial n} = \frac{1}{\varepsilon'} \frac{\partial u'_n}{\partial n}$  であり,  $\mathbf{e}_1$  は  $x_1$  方向の単位ベクトルを表す。

### 2.2. 欠陥を有する周期構造における境界値問題と積分方程式

次に, 領域が欠陥の有する周期構造である場合の境界値問題を考える。本節の内容は森田, 西村<sup>(7)</sup>で導かれているが, 参照の便宜のため簡潔に再録する。

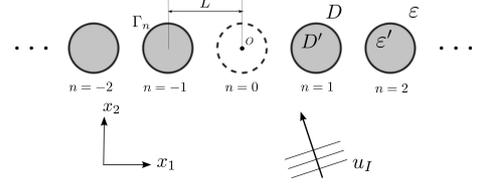


Fig.2 Domain with disturbed periodicity

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, 周期構造の一部分 ( $n=0$ ) が欠損している問題を考える。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。また,  $\Gamma_n$  は  $\partial D \cap \partial D'$  のうち,  $(n-1/2)L < x_1 < (n+1/2)L$  に存在する部分である。 $n=0$  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  $\Gamma_0$  を定義しておく。

いま, 各領域において Helmholtz 方程式

$$(\Delta + k^2)u = 0 \quad \text{in } D \quad (8)$$

$$(\Delta + k'^2)u = 0 \quad \text{in } D' \quad (9)$$

を, 境界条件

$$\begin{aligned} u &= u' \\ \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial u}{\partial n} &= \frac{1}{\varepsilon'} \frac{\partial u'}{\partial n} \end{aligned} \quad \text{on } \Gamma = \bigcup_{n \neq 0} \Gamma_n \quad (10)$$

および,  $D$  における散乱波  $u^s = u - u_I$  に対する放射条件のもとで解く。以下では簡単のため,  $L=1$  とし, 入射波  $u_I$  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すことができる。

$$\frac{u_m}{2} = u_{Im} + \sum_{n=-\infty}^{\infty} D_{m-n} u_n - \sum_{n=-\infty}^{\infty} \varepsilon S_{m-n} q_n \quad \text{on } \Gamma_0 \quad (m \in \mathbb{Z}) \quad (11)$$

$$\frac{q_m}{2} = q_{Im} + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\varepsilon} N_{m-n} u_n - \sum_{n=-\infty}^{\infty} D_{m-n}^* q_n \quad \text{on } \Gamma_0 \quad (m \in \mathbb{Z}) \quad (12)$$

$$\frac{u_n}{2} = -D'u_n + \varepsilon' S' q_n \quad \text{on } \Gamma_0 \quad (n \neq 0) \quad (13)$$

$$\frac{q_n}{2} = -\frac{1}{\varepsilon'} N' u_n + D^{*'} q_n \quad \text{on } \Gamma_0 \quad (n \neq 0) \quad (14)$$

$$\frac{u_0}{2} = -D u_0 + \varepsilon S q_0 \quad \text{on } \Gamma_0 \quad (15)$$

$$\frac{q_0}{2} = -\frac{1}{\varepsilon} N u_0 + D^* q_0 \quad \text{on } \Gamma_0 \quad (16)$$

ここに、 $u_n$  等は、関数  $u$  において  $x_1$  を  $x_1 + n$  で置き換えたものである。上式のうち (11), (12) は外部領域  $D$ , (13)–(16) は各内部領域に対する積分方程式である。

次に、変数  $x_1$  の関数  $f(x_1)$  に対する Floquet 変換と逆変換を次式で定義する。

$$f^\alpha(x_1) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(x_1 + n) e^{i\alpha n} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_n(x_1) e^{i\alpha n} \quad (17)$$

$$f_n(x_1) = f(x_1 + n) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f^\alpha(x_1) e^{-i\alpha n} d\alpha \quad (18)$$

式 (11), (12), (13), (14), (15), (16) を Floquet 変換すると、次式を得る。

$$\begin{pmatrix} -(D^\alpha + D') & (\varepsilon S^\alpha + \varepsilon' S') \\ -(\frac{1}{\varepsilon} N^\alpha + \frac{1}{\varepsilon'} N') & (D^{*\alpha} + D^{*'}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^\alpha \\ q^\alpha \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -(D - D') & (\varepsilon S - \varepsilon' S') \\ -(\frac{1}{\varepsilon} N - \frac{1}{\varepsilon'} N') & (D^* - D^{*'}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0 \\ q_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_l^\alpha \\ q_l^\alpha \end{pmatrix} \quad (19)$$

いま、解  $u_n, q_n$  を以下のように周期領域周期境界値問題の解  $u_\infty, q_\infty$  と、剰余項  $\tilde{u}_n, \tilde{q}_n$  の和で置き換える。

$$u_n(x) = u_\infty(x) e^{i\beta n} + \tilde{u}_n(x) \quad (20)$$

$$q_n(x) = q_\infty(x) e^{i\beta n} + \tilde{q}_n(x) \quad (21)$$

これらと入射波の Floquet 変換を積分方程式 (19) に代入すると、以下の式が得られる。

$$\begin{pmatrix} -(D^{-\beta} + D') & (\varepsilon S^{-\beta} + \varepsilon' S') \\ -(\frac{1}{\varepsilon} N^{-\beta} + \frac{1}{\varepsilon'} N') & (D^{*-\beta} + D^{*'}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_\infty \\ q_\infty \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_l \\ q_l \end{pmatrix} \quad (22)$$

$$\begin{pmatrix} -(D^\alpha + D') & (\varepsilon S^\alpha + \varepsilon' S') \\ -(\frac{1}{\varepsilon} N^\alpha + \frac{1}{\varepsilon'} N') & (D^{*\alpha} + D^{*'}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{u}^\alpha \\ \tilde{q}^\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (D - D') & -(\varepsilon S - \varepsilon' S') \\ (\frac{1}{\varepsilon} N - \frac{1}{\varepsilon'} N') & -(D^* - D^{*'}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0 \\ q_0 \end{pmatrix} \quad (23)$$

ここで、(20), (21) より

$$u_0(x) = u_\infty(x) + \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \tilde{u}^\alpha d\alpha \quad (24)$$

$$q_0(x) = q_\infty(x) + \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \tilde{q}^\alpha d\alpha \quad (25)$$

が制約条件として課される。なお、(24), (25) の積分経路は実軸上取るが、実軸上に極がある時は極限吸収原理を考慮してこれを複素面内で回避する。

### 3. 数値解法

#### 3.1. 従来法

本小節では、従来法 (approach 1) による (22), (23), (24), (25) の数値計算方法を示す。

1. 積分方程式 (22) を  $u_\infty, q_\infty$  について解き、 $u_0, q_0$  の初期値を  $u_0 = u_\infty, q_0 = q_\infty$  とする。
2. 与えられた  $u_0, q_0$  に対して、式 (23) を  $\tilde{u}^\alpha, \tilde{q}^\alpha$  について解く。このとき、3. で  $\tilde{u}^\alpha$  の  $\alpha$  に関する数値積分 (24), (25) を計算するため、数値積分法が要求する  $\alpha$  に対して解  $\tilde{u}^\alpha, \tilde{q}^\alpha$  を求める。線形方程式の反復解法には GMRES を用いる。
3. 制約条件 (24), (25) より 2. で求めた  $\tilde{u}^\alpha, \tilde{q}^\alpha$  を用いて  $u_0, q_0$  を求める。
4. 上記の 2. と 3. を  $u_0, q_0$  が十分に収束するまで、反復して計算を行う。

なお、3. において式 (24), (25) 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。この点は Rayleigh type の anomaly と呼ばれる。Rayleigh type 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  $\alpha^\pm$  とする ( $\alpha^- < \alpha^+$ )。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 積分を用いる。

#### 3.2. 積分経路の設定

前節で述べた Rayleigh type の anomaly に加えて、逆 Floquet 変換の積分経路上に被積分関数が resonance type の anomaly を持つことがある。resonance type の anomaly は Rayleigh type の anomaly に比べて強い特異性を持ち (通常複素面で一位の極である)、積分路の分割では数値積分を精度良く計算できないと考えられる。そのため、従来法では、resonance type の anomaly の影響により逆 Floquet 変換における数値積分の精度が悪化する場合があるという問題点が挙げられる。resonance type の anomaly は一般にその数や位置を特定することは困難であるが、考えている問題の固有値に対応する。そこで、本研究では Sakurai-Sugiura(SS) 法を用いて、数値的に resonance type の anomaly の位置を特定することを考える。

境界要素法に対する SS 法は、対象となる問題から導出される境界積分方程式を離散化して得られる線形方程式

$$A(\beta)x = b \quad (26)$$

の係数行列  $A(\beta)$  について、 $A(\beta)x_0 = \mathbf{0}$  となる  $x_0 \neq \mathbf{0}$  が存在するような固有値  $\beta$  を求める数値計算法である。境界要素法では、Floquet 波数  $\beta$  は係数行列  $A$  に非線形に含まれているが、SS 法は非線形固有値問題にも適用できるので、好都合である。

本研究では、SS 法を用いて得られた固有値をもとに、逆 Floquet 変換における特異性を伴う積分を回避するため、Floquet 波数を複素数に拡張し、複素平面内で積分路の変更を行う。積分経路を設定する方法を以下に記す。

積分経路の変更は、固有値  $\lambda_j$  のうち、実部が区間  $[-\pi, \pi]$  に含まれ、適当な正の値  $\delta$  に対して、 $|\text{Im}\lambda_j| < \delta$  を満たす固有値に対して行う。固有値を回避する経路は、固有値の実部に対応する  $\alpha$  を中心とする半径  $R$  の半円弧状に設定し、固有値の虚部が正の場合には下半平面にとり、負の場合には上半

平面にとる．こうしてこの円の内部の実軸上の経路を上記の半円上の経路に変更する．この変更は，固有値が被積分関数の孤立特異点であることから，半径  $R$  が十分小さいときには許容される．また，固有値  $\lambda_j$  の虚部が極めて小さい場合には，極限吸収原理を考慮して次のような方法をとる．まず角振動数  $\omega$  に対する感度  $\frac{d\lambda_j}{d\omega}$  を差分近似

$$\frac{d\lambda_j}{d\omega} \approx \frac{\lambda_j(\omega + \Delta\omega) - \lambda_j(\omega)}{\Delta\omega} \quad (27)$$

により計算し， $\text{Re} \frac{d\lambda_j}{d\omega} > 0$  となる固有値に対しては下半平面に， $\text{Re} \frac{d\lambda_j}{d\omega} < 0$  となる固有値に対しては上半平面に積分路を選ぶ．これは  $\omega \rightarrow \omega + i\epsilon$  ( $\epsilon > 0$ ) としたとき実軸から上(下)に移動する固有値は下(上)側から回避することを意味している．

なお，Rayleigh type の anomaly の近傍においても同様に積分経路の変更を行う．積分路は， $\alpha = -k + 2n\pi$  を満たす Rayleigh type の anomaly に対しては上半平面に， $\alpha = k + 2n\pi$  を満たす Rayleigh type の anomaly に対しては下半平面に選ぶ．このようにすれば，Rayleigh type の anomaly の近傍において，周期 Green 関数が正則な側に積分路を迂回させたことになるが，詳細は省略する．

### 3.3. 反復解法の改良

式 (23), (24), (25) を用いた従来法による反復解法では，一般には数値解が収束しない可能性がある．実際，従来法では外部領域の誘電率  $\epsilon$  と散乱体内部の誘電率  $\epsilon'$  のコントラストが大きくなるにつれ反復回数が大きく増加し，数値解が収束しない場合もあった<sup>(7)</sup>．そこで，本研究では，従来法とは異なる定式化による反復解法を提案する．定式化と数値計算方法を以下に示す．まず，(23), (24), (25) より次式が得られる．

$$\left( I - \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} (M^\alpha)^{-1} L d\alpha \right) \begin{pmatrix} u_0 \\ q_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_\infty \\ q_\infty \end{pmatrix} \quad (28)$$

ここに， $M^\alpha$ ,  $L$  は，それぞれ

$$M^\alpha = \begin{pmatrix} -(D^\alpha + D') & (\epsilon S^\alpha + \epsilon' S') \\ -(\frac{1}{\epsilon} N^\alpha + \frac{1}{\epsilon'} N') & (D^{*\alpha} + D^{*'}) \end{pmatrix} \quad (29)$$

$$L = \begin{pmatrix} (D - D') & -(\epsilon S - \epsilon' S') \\ (\frac{1}{\epsilon} N - \frac{1}{\epsilon'} N') & -(D^* - D^{*'}) \end{pmatrix} \quad (30)$$

を表し， $I$  は単位作用素である．

本手法では，積分方程式 (22) を  $u_\infty, q_\infty$  について，周期多重極法を用いて解く．次に，方程式 (28) を  $u_0, q_0$  について FGMRES による反復解法で解く．このとき， $(M^\alpha)^{-1} L(u_0, q_0)^T$  は，方程式

$$M^\alpha \begin{pmatrix} v \\ w \end{pmatrix} = L \begin{pmatrix} u_0 \\ q_0 \end{pmatrix} \quad (31)$$

を  $(v, w)^T$  について GMRES で解くことで求める．さらに， $(M^\alpha)^{-1} L(u_0, q_0)^T$  の  $\alpha$  に関する数値積分を行うため，数値積分点に対応するそれぞれの  $\alpha$  について式 (31) の解を求める．

上で導入した新しい計算法は，反復法で解く場合，良条件であることを示すことができる．実際， $M^\alpha$ ,  $L$  の主シンボル  $\sigma(M^\alpha)$ ,  $\sigma(L)$  は，それぞれ次のようになる．

$$\sigma(M^\alpha) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\epsilon + \epsilon'}{2r} \\ (\frac{1}{\epsilon} + \frac{1}{\epsilon'}) \frac{r}{2} & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma(L) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\epsilon' - \epsilon}{2r} \\ (\frac{1}{\epsilon'} - \frac{1}{\epsilon}) \frac{r}{2} & 0 \end{pmatrix}$$

ここに， $r$  は  $\Gamma_0$  接線方向の Fourier パラメータである．これらを用いると，(28) 左辺に現れる作用素は

$$I - \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} (M^\alpha)^{-1} L d\alpha = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\epsilon - \epsilon'}{\epsilon + \epsilon'} & 0 \\ 0 & 1 + \frac{\epsilon - \epsilon'}{\epsilon + \epsilon'} \end{pmatrix} + \text{コンパクト}$$

の形となることがわかる．従って， $\epsilon$  と  $\epsilon'$  の比が極端に大きくない限り (28) 左辺に現れる作用素は良条件である．また，この作用素はコンパクトを除いて最大固有値と最小固有値の比が

$$\frac{\max(\epsilon, \epsilon')}{\min(\epsilon, \epsilon')} \quad (32)$$

程度であり，(32) はこの作用素を離散化したときの条件数を見積もるために使えるものと考えられる．

なお，(31) 左辺の作用素は，Calderon の式を考慮すると，その 2 乗が定数倍を除いて単位作用素+コンパクト作用素となることを示すことができる<sup>(8)</sup>．このことは Krylov 部分空間法を用いて (31) を解いたとき，収束が非常に速いことを意味している．

## 4. 数値計算結果

以下では数値計算結果を示す．各周期単位に含まれる散乱体は半径 0.4 の円であるとした．また， $\epsilon = 1.0$  とし，入射波の入射角は  $\phi = 0.5$  [rad] とした．式 (28) の解法における FGMRES の許容誤差を  $10^{-5}$ ，式 (31) の解法における GMRES の許容誤差を  $10^{-8}$  とした．

### 4.1. 被積分関数

式 (24) の被積分関数  $\tilde{u}^\alpha(x)$  の実部を，境界  $\Gamma_0$  上の 1 点  $x = (0.135, 0.376)$  において  $\alpha$  の実部に関してプロットしたものを Fig. 3 に示す．ここに， $\omega = 4$ ， $\epsilon' = 1.2$  とした．このとき

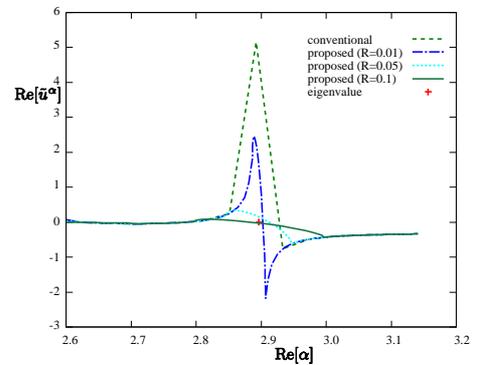


Fig. 3 The integrand of the inverse Floquet transform v.s. the Floquet parameter  $\alpha$

固有値は  $\lambda_j = 2.8965 + 1.1231 \times 10^{-4}i$  に存在する．提案手法に

において修正した積分経路は、固有値を中心とする円周上にとり、その半径は  $R = 0.01$ ,  $R = 0.05$ ,  $R = 0.10$  の3通りを考えた。Fig.3より、提案手法における被積分関数が、従来法における被積分関数に比べて滑らかになっていることがわかる。また、積分路の半径を大きくとるにつれ、被積分関数に現れるピークの値の絶対値が小さくなっていることがわかる。

#### 4.2. 数値解

前節と同様の条件のもとで、提案手法による数値解と従来法による数値解の比較を行った。境界  $\Gamma_0$  における数値解  $u_0(x)$  の実部のプロットを図4に示す。これより、積分経路を

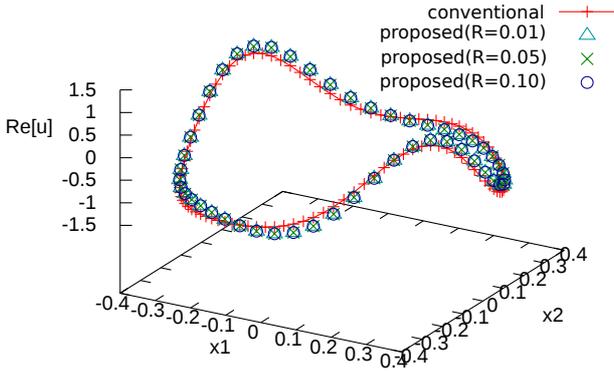


Fig.4 Computed values of  $\text{Re}[u_0(x)]$  on  $\Gamma_0$

変更して得られた数値解は、 $R$  の値によらず、互いに良く一致していることがわかる。また、従来法の解もこれらと大略一致していることがわかる。なお、精度面からは  $R$  は大きく取るのが良いが、anomaly の発生頻度によっては  $R$  の選択範囲が制限されることも考えられるので、一般には  $R$  の選択は問題依存になるものと考えられる。

#### 4.3. 感度の計算

4.1と同様の条件のもとで、固有値  $\lambda_j$  の感度の計算を行った結果を、表(1)に示す。感度の計算には式(27)を用い、 $\Delta\omega = 1.0 \times 10^{-3}$  とした。これより  $\frac{d\lambda_j}{d\omega}$  の実部の符号と  $\lambda_j$  の虚部の符号が一致していることが確かめられる。

Table 1 Sensitivity of eigenvalues computed with finite difference

$j$	$\lambda_j$
1	$-2.89653318133407 - 0.0001095957052218599i$
2	$2.89653311435992 + 0.0001126099831603301i$
$j$	$d\lambda_j/d\omega$
1	$-27.7291590796257 - 0.01286620892134118i$
2	$27.7281074064555 + 0.007511308766489476i$

#### 4.4. 反復回数

以下の4つの解法について数値計算を行い、収束性能の比較を行った。

**approach 1** 3.1節に示した従来法による解法。

**approach 2** 複素平面に拡張された積分経路上で数値積分を行う解法。

**approach 3** 式(28)をFGMRESを用いて解く解法。

**approach 4** 積分路の変更と、式(28)のFGMRESによる解法を組み合わせた解法。

$\varepsilon = 1.0$  に対して  $\varepsilon'$  を変化させたとき、数値解が十分に収束するまでに要した反復回数を Fig.5 に示す。パラメータは  $\omega = 2.0\pi$ ,  $R = 0.10$  とした。approach 1 では反復回数が大きく増加する場合があるのに対し、積分経路の変更を行った approach 2 では少ない反復回数で数値解が収束していることがわかる。approach 3 と approach 4 ではさらに少ない反復回数で数値解が収束している。

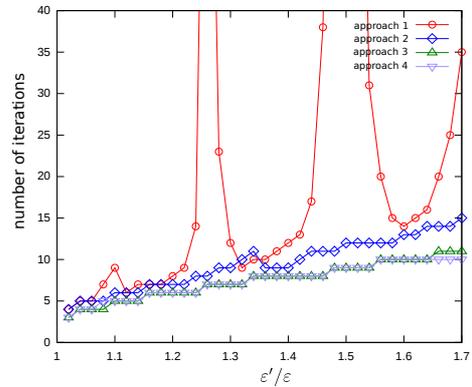


Fig.5 Number of iterations

なお、同じ問題を従来法で  $\varepsilon'/\varepsilon < 1$  の範囲(この場合は anomaly が発生しない)も含めて解いたときの GMRES の反復回数(Fig. 6 上. 前報<sup>(7)</sup>より再録)と、(32)で導いた対応する作用素の固有値の集積点の値の比(同図下)を Fig. 6 に示す(Fig. 5 の改良法による反復回数も参照)。現在知られている GMRES 法の収束に関する結果はもう少し複雑ではあるが<sup>(9)</sup>、Fig. 6 は GMRES 法の反復回数と(32)の比の関連性を示しており、興味深い。

#### 5. 結論

本研究では、欠陥を有する周期構造における2次元 Helmholtz 方程式の境界値問題に対する従来法の精度、および収束性能の改良を行った。具体的には、SS法を用いて resonance type の anomaly に対応する固有値の解析を行い、逆 Floquet 変換における積分路を変更することで resonance type の anomaly を回避する方法を採った。また、数値解の収束性を改善するため、解を求める際に用いる方程式の再構成を行った。数値計算により提案手法の効果が確かめられた。

今後の課題として、photonic 結晶への応用を見据えた、より複雑な問題への適用や Maxwell 方程式への拡張をあげることができる。

## 参考文献

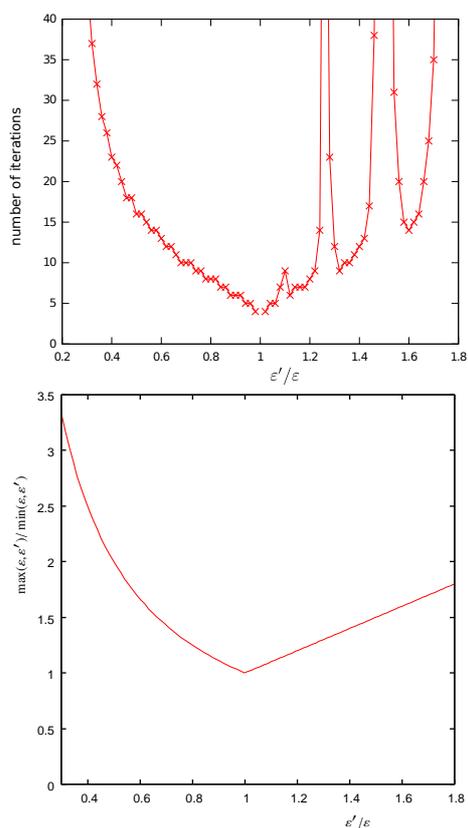


Fig.6 Upper figure: Number of iterations for the conventional approach (from Morita and Nishimura<sup>(7)</sup>). Lower figure: Condition number estimated with (32).

- (1) J. Pendry: Negative refraction makes a perfect lens, *Physical Review Letters*, 85, pp. 3966–3969, 2000 .
- (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) 新納和樹, 西村直志: 周期多重極法を用いた Helmholtz 方程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.
- (5) T. Sakurai, H. Sugiura: A projection for generalized eigenvalue problems, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 159, pp. 119–128, 2003.
- (6) 野瀬大一郎, 西村直志: 2次元 Helmholtz 方程式の境界値問題に対する Sakurai-Sugiura 法を用いた固有値解析, 計算工学講演会論文集, 17, H-2-6, 2012.
- (7) 森田樹一郎, 西村直志: 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, 計算数理工学会論文集, 11, pp. 65–70, 2011.
- (8) K. Niino and N. Nishimura: Preconditioning based on Calderon's formulae for periodic fast multipole methods for Helmholtz' equation, *Journal of Computational Physics*, 231, pp.66–81, 2012.
- (9) Y. Saad: Iterative Methods for Sparse Linear Systems, SIAM, 2003.