計算数理工学論文集 Vol. 14 (2014 年 12 月), 論文 No. 19-141206 JASCOME

周期単位の一部に欠陥を有する領域における 2 次元 Helmholtz 方程式の境界値問題の数値解法について

A numerical method for boundary value problems for Helmholtz' equation with partly defective unit of periodicity in 2D

野瀬 大一郎 [1)], 新納 和樹 [2)], 西村 直志 [3)]

Taichiro NOSE, Kazuki NIINO and Naoshi NISHIMURA

1) 京都大学 情報学研究科 大学院生 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: nose@acs.i.kyoto-u.ac.jp)
2) 京都大学 情報学研究科 助教 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: niino@acs.i.kyoto-u.ac.jp)
3) 京都大学 情報学研究科 教授 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: nchml@i.kyoto-u.ac.jp)

We present a numerical method for scattering problems associated with almost but not completely periodic structures for Helmholtz' equation in 2D. The solution process of this problem using the Floquet transform requires the evaluation of an integral whose integrand depends on solutions of certain periodic boundary value problems. We apply a periodic version of fast multipole method to compute this integrand. The effectiveness of the proposed method is demonstrated with some numerical examples.

Key Words: Wave Scattering, Defective Periodicity, Fast Multipole Method, Floquet's Transform

1. 序論

近年，フォトニック結晶やメタマテリアルといった周期構造を有する光学材料が注目を集めている．そのため周期波動散乱問題を解くことの重要性が増してきている．周期波動散乱問題の解法として，周期性のある問題を効率よく計算できる周期高速多重極境界要素法が有効であることが先行研究により示されている [(1)]．

周期多重極法は領域と入射波が周期性を持ち，支配方程式の解が周期境界条件を満たす問題しか扱うことができないが，積分方程式に Floquet 変換を施すことによって，これ以外の問題も解くことができるようになる．これまでに，領域は周期性があるが，入射波には周期性がない問題 [(2)] 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 [(3)]．特に後者は，人為的な欠陥部分を持つフォトニック結晶構造の解析に応用が可能であると考えられる．

しかし，周期構造の一部が欠陥を有する領域に対する境界値問題の従来の解法は，周期単位の全てが欠損している場合しか扱うことができず，人為的な欠陥を持つフォトニック結晶構造の解析の応用には不十分であった．そのような応用を考えた場合，人為的な欠陥部分を有する領域に対する解法が必要である．

2014 年 9 月 24 日受付，2014 年 10 月 24 日受理

そこで，本研究では周期単位の一部に欠陥を有する散乱体による波動散乱問題の定式化を行い，提案手法と従来法による解を比較することでその妥当性を確認する．また，数値解の収束性を改善するための前処理法を提案する．最後に，ストップバンドにおける周期単位の一部に欠陥を有する散乱体による波動散乱問題の解析を行なう．

2. 定式化

2.1. 周期単位の一部に欠陥を有する散乱体による境界値問題

本研究では，周期単位の一部に欠陥を有する場合の境界値問題を考える．Fig. 1 のように x_1 方向に周期 L の周期性

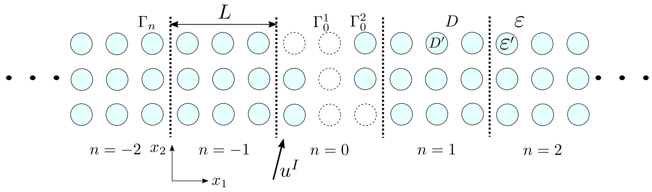

Fig. 1 周期単位の一部に欠陥部分を含む領域.

を持つ 2 次元領域において，$n = 0$ の周期単位の一部が欠損している問題を考える．各周期単位は無限領域 D と散乱体 D' から成っている．$-1/2L < x_1 < 1/2L$ の部分において $\Gamma_0^2 = \partial D \cap \partial D'$ とし，他の周期単位では物理的な境界が存在するが，$-1/2L < x_1 < 1/2L$ においては物理的な境界が存在しな

い，いわゆる欠陥部分の境界については，定式化の便宜上，仮想境界 Γ_0^1 を定義し，$\Gamma_0 = \Gamma_0^1 \cup \Gamma_0^2$ とする．また $(n-1/2)L < x_1 < (n+1/2)L \quad (n \neq 0)$ においても対応する境界 $\Gamma_n^1, \Gamma_n^2, \Gamma_n$ を同様に定義する．ただし $(n-1/2)L < x_1 < (n+1/2)L \quad (n \neq 0)$ において，Γ_n^1 は仮想境界ではなく，$\Gamma_n = \Gamma_n^1 \cup \Gamma_n^2 = \partial D \cap \partial D'$ となっていることに注意する．

いま，各領域において Helmholtz 方程式

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

を満たす解 u を境界条件

$$\begin{aligned} u &= u' \\ q = \frac{1}{\varepsilon}\frac{\partial u}{\partial n} &= \frac{1}{\varepsilon'}\frac{\partial u'}{\partial n} \end{aligned} \qquad \text{on} \quad \bigcup_{(n,j)\neq(0,1)} \Gamma_n^j$$

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．ここに k, k' はそれぞれ領域 D, D' における波数，n は D' から見た境界の外向き単位法線ベクトルである．また $\varepsilon, \varepsilon'$ は問題を 2 次元電磁波動散乱問題と見なしたとき，領域 D, D' の誘電率に相当する．以下では簡単のため，周期長を $L = 1$ とし，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，散乱体の外部領域における積分方程式:

$$\begin{aligned} \frac{u_m^j(\boldsymbol{x})}{2} &= u_{Im}(\boldsymbol{x}) \\ &+ \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{\Gamma_0} \frac{\partial G(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y} + (m-n)\boldsymbol{e}_1)}{\partial n_y} u_n(\boldsymbol{y}) \mathrm{d}S_y \\ &- \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{\Gamma_0} \varepsilon G(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y} + (m-n)\boldsymbol{e}_1) q_n(\boldsymbol{y}) \mathrm{d}S_y \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma_0^j \, (m \in \mathbb{Z}) \end{aligned} \tag{1}$$

$$\begin{aligned} \frac{q_m^j(\boldsymbol{x})}{2} &= q_{Im}(\boldsymbol{x}) \\ &+ \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{\Gamma_0} \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial^2 G(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y} + (m-n)\boldsymbol{e}_1)}{\partial n_x \partial n_y} u_n(\boldsymbol{y}) \mathrm{d}S_y \\ &- \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{\Gamma_0} \frac{\partial G(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y} + (m-n)\boldsymbol{e}_1)}{\partial n_x} q_n(\boldsymbol{y}) \mathrm{d}S_y \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma_0^j \, (m \in \mathbb{Z}) \end{aligned} \tag{2}$$

散乱体の内部領域における積分方程式:

$$\begin{aligned} \frac{u_n^j(\boldsymbol{x})}{2} &= -\int_{\Gamma_0^j} \frac{\partial G'(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})}{\partial n_y} u_n^j(\boldsymbol{y}) \mathrm{d}S_y \\ &+ \varepsilon' \int_{\Gamma_0^j} G'(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}) q_n^j(\boldsymbol{y}) \mathrm{d}S_y \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma_0^j \quad (n \neq 0) \end{aligned} \tag{3}$$

$$\begin{aligned} \frac{q_n^j(\boldsymbol{x})}{2} &= -\int_{\Gamma_0^j} \frac{1}{\varepsilon'} \frac{\partial^2 G'(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})}{\partial n_x \partial n_y} u_n^j(\boldsymbol{y}) \mathrm{d}S_y \\ &+ \int_{\Gamma_0^j} \frac{\partial G'(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})}{\partial n_x} q_n^j(\boldsymbol{y}) \mathrm{d}S_y \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma_0^j \quad (n \neq 0) \end{aligned} \tag{4}$$

$$\begin{aligned} \frac{u_0^2(\boldsymbol{x})}{2} &= -\int_{\Gamma_0^2} \frac{\partial G'(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})}{\partial n_y} u_0^2(\boldsymbol{y}) \mathrm{d}S_y \\ &+ \varepsilon' \int_{\Gamma_0^2} G'(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}) q_0^2(\boldsymbol{y}) \mathrm{d}S_y \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma_0^2 \end{aligned} \tag{5}$$

$$\begin{aligned} \frac{q_0^2(\boldsymbol{x})}{2} &= -\int_{\Gamma_0^2} \frac{1}{\varepsilon'} \frac{\partial^2 G'(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})}{\partial n_x \partial n_y} u_0^2(\boldsymbol{y}) \mathrm{d}S_y \\ &+ \int_{\Gamma_0^2} \frac{\partial G'(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})}{\partial n_x} q_0^2(\boldsymbol{y}) \mathrm{d}S_y \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma_0^2 \end{aligned} \tag{6}$$

および仮想境界 Γ_0^1 の内部領域における積分方程式:

$$\begin{aligned} \frac{u_0^1(\boldsymbol{x})}{2} &= -\int_{\Gamma_0^1} \frac{\partial G(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})}{\partial n_y} u_0^1(\boldsymbol{y}) \mathrm{d}S_y \\ &+ \varepsilon \int_{\Gamma_0^1} G(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}) q_0^1(\boldsymbol{y}) \mathrm{d}S_y \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma_0^1 \end{aligned} \tag{7}$$

$$\begin{aligned} \frac{q_0^1(\boldsymbol{x})}{2} &= -\int_{\Gamma_0^1} \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial^2 G(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})}{\partial n_x \partial n_y} u_0^1(\boldsymbol{y}) \mathrm{d}S_y \\ &+ \int_{\Gamma_0^1} \frac{\partial G(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})}{\partial n_x} q_0^1(\boldsymbol{y}) \mathrm{d}S_y \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma_0^1 \end{aligned} \tag{8}$$

によって表現される．ここに u_n 等は x_1 方向の単位ベクトル $\boldsymbol{e}_1$ を用いて

$$u_n(\boldsymbol{x}) = u(\boldsymbol{x} + n\boldsymbol{e}_1)$$

と表される．また u_n^j は境界 Γ_n^j における解を表し，G, G' はそれぞれ領域 D, D' における波数 k, k' で定義される Helmholtz 方程式の基本解

$$G(\boldsymbol{x}) = \frac{\mathrm{i}}{4} H_0^{(1)}(k|\boldsymbol{x}|), \quad G'(\boldsymbol{x}) = \frac{\mathrm{i}}{4} H_0^{(1)}(k'|\boldsymbol{x}|),$$

$H_0^{(1)}$ は 0 次の第一種 Hankel 関数である．

2.2. Floquet 変換

2.1 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.

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．

$$f^\alpha(x_1) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(x_1 + n) e^{i\alpha n},$$
$$f(x_1 + n) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f^\alpha(x_1) e^{-i\alpha n} \mathrm{d}\alpha.$$

一般に, Floquet 変換された関数 $f^\alpha(x_1)$ は次のような周期性を持つ．

$$f^\alpha(x_1 + n) = f^\alpha(x_1) e^{-i\alpha n}. \tag{9}$$

また公式

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\alpha n} = 2\pi\delta(\alpha) \qquad (-\pi < \alpha < \pi) \tag{10}$$

より, 位相差 β の周期性をもつ関数 u_∞, q_∞ を Floquet 変換すると

$$u_\infty^\alpha = 2\pi\delta(\alpha + \beta) u_\infty, \tag{11}$$
$$q_\infty^\alpha = 2\pi\delta(\alpha + \beta) q_\infty \tag{12}$$

となる．特に, 入射波は (11), (12) を満足する．

2.3. Floquet 変換された境界積分方程式

2.1 節で定義した問題の解 u, q の境界 $\cup_n\Gamma_n^j$ への制限を u^j, q^j, その Floquet 変換を $u^{j\alpha}$, $q^{j\alpha}$ とすると，式 (1) ~ (6) より，$u^{j\alpha}$, $q^{j\alpha}$ は次の積分方程式を満たす.

$$\begin{pmatrix} -(D^{\alpha}_{11}+D'_{11}) & (\varepsilon S^{\alpha}_{11}+\varepsilon' S'_{11}) & -D^{\alpha}_{12} & \varepsilon S^{\alpha}_{12} \\ -(\frac{1}{\varepsilon}N^{\alpha}_{11}+\frac{1}{\varepsilon'}N'_{11}) & (D^{*\alpha}_{11}+D^{*\prime}_{11}) & -\frac{1}{\varepsilon}N^{\alpha}_{12} & D^{*\alpha}_{12} \\ -D^{\alpha}_{21} & \varepsilon S^{\alpha}_{21} & -(D^{\alpha}_{22}+D'_{22}) & (\varepsilon S^{\alpha}_{22}+\varepsilon' S'_{22}) \\ -\frac{1}{\varepsilon}N^{\alpha}_{21} & D^{*\alpha}_{21} & -(\frac{1}{\varepsilon}N^{\alpha}_{22}+\frac{1}{\varepsilon'}N'_{22}) & (D^{*\alpha}_{22}+D^{*\prime}_{22}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^{1\alpha} \\ q^{1\alpha} \\ u^{2\alpha} \\ q^{2\alpha} \end{pmatrix}$$
$$+\begin{pmatrix} \begin{pmatrix} -(D_{11}-D'_{11}) & (\varepsilon S_{11}-\varepsilon' S'_{11}) \\ -(\frac{1}{\varepsilon}N_{11}-\frac{1}{\varepsilon'}N'_{11}) & (D^{*}_{11}-D^{*\prime}_{11}) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u^1_0 \\ q^1_0 \end{pmatrix} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u^{1\alpha}_I \\ q^{1\alpha}_I \\ u^{2\alpha}_I \\ q^{2\alpha}_I \end{pmatrix}. \quad (13)$$

ここに

$$S^{\alpha}_{ij}v = \int_{\Gamma_0^j} G^{\alpha}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})v(\boldsymbol{y})\mathrm{d}S_y \quad \boldsymbol{x} \text{ on } \Gamma_0^i$$
$$D^{\alpha}_{ij}v = \int_{\Gamma_0^j} \frac{\partial G^{\alpha}}{\partial n_y}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})v(\boldsymbol{y})\mathrm{d}S_y \quad \boldsymbol{x} \text{ on } \Gamma_0^i$$
$$D^{*\alpha}_{ij}v = \int_{\Gamma_0^j} \frac{\partial G^{\alpha}}{\partial n_x}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})v(\boldsymbol{y})\mathrm{d}S_y \quad \boldsymbol{x} \text{ on } \Gamma_0^i$$
$$N^{\alpha}_{ij}v = \fint_{\Gamma_0^j} \frac{\partial^2 G^{\alpha}}{\partial n_x \partial n_y}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})v(\boldsymbol{y})\mathrm{d}S_y \quad \boldsymbol{x} \text{ on } \Gamma_0^i$$
$$S'_{ij}v = \int_{\Gamma_0^j} G'(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})v(\boldsymbol{y})\mathrm{d}S_y \quad \boldsymbol{x} \text{ on } \Gamma_0^i$$
$$D'_{ij}v = \int_{\Gamma_0^j} \frac{\partial G'}{\partial n_y}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})v(\boldsymbol{y})\mathrm{d}S_y \quad \boldsymbol{x} \text{ on } \Gamma_0^i$$
$$D^{*\prime}_{ij}v = \int_{\Gamma_0^j} \frac{\partial G'}{\partial n_x}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})v(\boldsymbol{y})\mathrm{d}S_y \quad \boldsymbol{x} \text{ on } \Gamma_0^i$$
$$N'_{ij}v = \fint_{\Gamma_0^j} \frac{\partial^2 G'}{\partial n_x \partial n_y}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})v(\boldsymbol{y})\mathrm{d}S_y \quad \boldsymbol{x} \text{ on } \Gamma_0^i$$

であり，$\fint$ は超特異積分の有限部分，G^{α} は位相差 $-\alpha$ の周期境界条件を満たす周期 Green 関数

$$G^{\alpha}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha n} G(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}-nL\boldsymbol{e}_1)$$

である.

いま，解 u, q の境界 Γ_n^j 上への制限 u_n^j, q_n^j を以下のように完全周期領域 (すなわち $n=0$ の部分において欠損がないもの) における Floquet 波数 β の周期境界値問題の解 u_∞^j, q_∞^j と，補正項 $\tilde{u}_n^j$, $\tilde{q}_n^j$ の和で次のように書く.

$$u_n^j(\boldsymbol{x}) = u_\infty^j(\boldsymbol{x})e^{i\beta n} + \tilde{u}_n^j(\boldsymbol{x}), \quad (14)$$
$$q_n^j(\boldsymbol{x}) = q_\infty^j(\boldsymbol{x})e^{i\beta n} + \tilde{q}_n^j(\boldsymbol{x}). \quad (15)$$

ここに，Floquet 波数 β は，入射波を $u_I = e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_I\cdot\boldsymbol{x}}$ と書くとき $\beta = k_{I1}L$ と定義され，周期単位の両端における入射波の位相差を表す．このとき，解 u^j, q^j の Floquet 変換は

$$u^{j\alpha}(\boldsymbol{x}) = 2\pi\delta(\alpha+\beta)u_\infty^j(\boldsymbol{x}) + \tilde{u}^{j\alpha}(\boldsymbol{x}),$$
$$q^{j\alpha}(\boldsymbol{x}) = 2\pi\delta(\alpha+\beta)q_\infty^j(\boldsymbol{x}) + \tilde{q}^{j\alpha}(\boldsymbol{x})$$

となる．これらの量を積分方程式 (13) に代入すると，次の積分方程式を得る.

$$\begin{pmatrix} -(D^{-\beta}+D') & (\varepsilon S^{-\beta}+\varepsilon' S') \\ -(\frac{1}{\varepsilon}N^{-\beta}+\frac{1}{\varepsilon'}N') & (D^{*-\beta}+D^{*\prime}) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_\infty \\ q_\infty \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_I \\ q_I \end{pmatrix}, \quad (16)$$

$$\begin{pmatrix} M^{\alpha}_{11} & M^{\alpha}_{12} \\ M^{\alpha}_{21} & M^{\alpha}_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \tilde{u}^{1\alpha} \\ \tilde{q}^{1\alpha} \\ \tilde{u}^{2\alpha} \\ \tilde{q}^{2\alpha} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L\begin{pmatrix} u^1_0 \\ q^1_0 \end{pmatrix} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (17)$$

ここに，M^{α}_{ij}，L はそれぞれ

$$M^{\alpha}_{ij} = \begin{pmatrix} -(D^{\alpha}_{ij}+D'_{ij}) & (\varepsilon S^{\alpha}_{ij}+\varepsilon' S'_{ij}) \\ -(\frac{1}{\varepsilon}N^{\alpha}_{ij}+\frac{1}{\varepsilon'}N'_{ij}) & (D^{*\alpha}_{ij}+D^{*\prime}_{ij}) \end{pmatrix} \quad (i=j) \quad (18)$$

$$M^{\alpha}_{ij} = \begin{pmatrix} -D^{\alpha}_{ij} & \varepsilon S^{\alpha}_{ij} \\ -\frac{1}{\varepsilon}N^{\alpha}_{ij} & D^{*\alpha}_{ij} \end{pmatrix} \quad (i \neq j) \quad (19)$$

$$L = \begin{pmatrix} (D_{11}-D'_{11}) & -(\varepsilon S_{11}-\varepsilon' S'_{11}) \\ (\frac{1}{\varepsilon}N_{11}-\frac{1}{\varepsilon'}N'_{11}) & -(D^{*}_{11}-D^{*\prime}_{11}) \end{pmatrix} \quad (20)$$

を表す．また，S，D，D^*，N は，Helmholtz 方程式の基本解 G に関する一重層ポテンシャル，二重層ポテンシャル，一重層ポテンシャルの法線微分，二重層ポテンシャルの法線微分を表し，S' 等は基本解 G' の対応するポテンシャルである．また S^{α} 等は S 等の Floquet 変換であり，これらは Floquet 波数が $-\alpha$ である周期境界値問題の層ポテンシャルに他ならない．さらに $S_{ij}q$ 等は

$$S_{ij}q(\boldsymbol{x}) = \int_{\Gamma_0^j} G(x-y)q(y)dS, \qquad x \in \Gamma_0^i$$

を表す．式 (14)，(15) に Floquet 逆変換を用いると，次の制約条件が得られる.

$$u_n^j(\boldsymbol{x}) = u_\infty^j(\boldsymbol{x})e^{i\beta n} + \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\tilde{u}^{j\alpha}e^{-i\alpha n}\mathrm{d}\alpha,$$
$$q_n^j(\boldsymbol{x}) = q_\infty^j(\boldsymbol{x})e^{i\beta n} + \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\tilde{q}^{j\alpha}e^{-i\alpha n}\mathrm{d}\alpha.$$

この式より，特に $n=0$ のとき

$$u_0^j(\boldsymbol{x}) = u_\infty^j(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\tilde{u}^{j\alpha}\mathrm{d}\alpha, \quad (21)$$
$$q_0^j(\boldsymbol{x}) = q_\infty^j(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\tilde{q}^{j\alpha}\mathrm{d}\alpha \quad (22)$$

を得る.

3. 数値解法

3.1. 反復解法

本節では，反復解法の定式化と数値計算方法について記す．まず，式 (21)，(22) より，次式が得られる.

$$\begin{pmatrix} u^1_0 \\ q^1_0 \end{pmatrix} - \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\begin{pmatrix} \tilde{u}^{1\alpha}(u^1_0, q^1_0) \\ \tilde{q}^{1\alpha}(u^1_0, q^1_0) \end{pmatrix}\mathrm{d}\alpha = \begin{pmatrix} u^1_\infty \\ q^1_\infty \end{pmatrix} \quad (23)$$

u^1_∞, q^1_∞ は，積分方程式 (16) を周期多重極法を用いて解くことにより求められる既知の関数である．次に方程式 (23) を u^1_0, q^1_0 について (F)GMRES ((Flexible) Generalized Minimal RESidual method) による反復解法で解く．このとき，$(\tilde{u}^{1\alpha}, \tilde{q}^{1\alpha})^T$ は，式

(17) を GMRES で解くことで求める．さらに，式 (23) 中の α 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 α について式 (17) の解を求める．

3.2. 前処理

Krylov 部分空間を用いた線形方程式の反復解法では前処理行列を係数行列に乗ずることで，収束を改善する前処理と呼ばれる手法が知られている．ここでは，式 (23) を離散化して得られる線形方程式の収束を改善するために前処理を行う．

式 (17) を $\tilde{u^j}^{\alpha}, \tilde{q^j}^{\alpha}$ について解き，式 (23) に代入することで次式を得る．

$$\left(I - \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}(M_{11} - M_{12}M_{22}^{-1}M_{21})^{-1}L\mathrm{d}\alpha\right)\begin{pmatrix} u_0^1 \\ q_0^1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_\infty^1 \\ q_\infty^1 \end{pmatrix}. \tag{24}$$

式 (24) に現れる $M_{11} - M_{12}M_{22}^{-1}M_{21}$，$L$ の主シンボルは，M_{12}, M_{21} がコンパクト作用素であることに注意すると，次のようになる．

$$\sigma(M_{11} - M_{12}M_{22}^{-1}M_{21}) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\varepsilon+\varepsilon'}{2r} \\ -\left(\frac{1}{\varepsilon} + \frac{1}{\varepsilon'}\right)\frac{r}{2} & 0 \end{pmatrix},$$

$$\sigma(L) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\varepsilon'-\varepsilon}{2r} \\ \left(\frac{1}{\varepsilon} - \frac{1}{\varepsilon'}\right)\frac{r}{2} & 0 \end{pmatrix}.$$

ここに，r を Γ_0^1 の接線方向の Fourier パラメータとする. これらを用いると，式 (24) の左辺に現れる作用素は,

$$I - \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}(M_{11} - M_{12}M_{22}^{-1}M_{21})^{-1}L\mathrm{d}\alpha = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\varepsilon-\varepsilon'}{\varepsilon+\varepsilon'} & 0 \\ 0 & 1 + \frac{\varepsilon-\varepsilon'}{\varepsilon+\varepsilon'} \end{pmatrix} + K \tag{25}$$

の形になることがわかる．ここに K はコンパクト作用素である．作用素 (25) はコンパクトを除いて絶対値最大の固有値と絶対値最小の固有値の比が

$$\left|\frac{\max(\varepsilon, \varepsilon')}{\min(\varepsilon, \varepsilon')}\right| \tag{26}$$

程度であり，これ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．ε と ε' の比が大きい場合は (24) の左辺に現れる作用素は悪条件となる．

そこで式 (24) を離散化して得られる線形方程式を GMRES を用いて解く際に，右前処理行列 M

$$M = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\varepsilon-\varepsilon'}{\varepsilon+\varepsilon'} & 0 \\ 0 & 1 + \frac{\varepsilon-\varepsilon'}{\varepsilon+\varepsilon'} \end{pmatrix}$$

を用いて作用素を良条件にすることで，反復回数が少なくなることが期待される．

3.3. 積分経路の変更

式 (23) に含まれる逆 Floquet 変換の積分経路はその近傍に anomaly を持つことがある．anomaly には Rayleigh type と resonance type の 2 種類があり，resonance type の anomaly は Rayleigh type の anomaly に比べて強い特異性を持ち，その付近では数値積分を精度良く計算できないと考えられている [5]．Rayleigh type の anomaly の位置は $\alpha = \pm k + 2n\pi$ (n:整数) であるが，resonance type の anomaly は考えている問題の固有値に対応しており一般にその数や位置を解析的に求めることが困難である．そこで本研究では，Sakurai-Sugiura (SS) 法 [6] を用いて，数値的に resonance type の anomaly の位置を特定する．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．以下では，積分経路の設定の方法について必要最小限を記す．詳細は，森田・西村 [4] を参照されたい．

積分経路の変更は，得られた固有値 λ_j のうち，適当な正の値 δ に対して，$|\Im\lambda_j| < \delta$ 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 $\Re\lambda_j$ を中心とする半径 R の半円弧上とし，固有値の虚部が正の場合は下半面に，負の場合は上半面に回避する．λ_j の虚部が非常に小さいときは感度解析を用いて回避する方向を決定するが，詳細は省略する．

なお，Rayleigh type の anomaly の近傍においても同様の積分路の変更を行う．積分路は，$\alpha = -k + 2n\pi$ を満たす Rayleigh type の anomaly の場合は上半面に， $\alpha = k + 2n\pi$ を満たす Rayleigh type の anomaly の場合は下半面に回避する．このように積分路を選ぶと，Rayleigh type の anomaly の近傍で周期 Green 関数が正則な側に積分路を変更したことになる．

4. 数値計算結果

本節では，3 節に示した手法を用いて 2.1 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，3.1 節で述べた反復解法では，式 (23) の解法における GMRES の許容誤差を 10^{-5}，式 (24) に含まれる求解 (実質的には式 (17) を解くこと) のための GMRES の許容誤差を 10^{-8} とした．式 (17) を離散化した線形方程式には Calderon の式に基づく前処理 [7] を施した．また以下の全ての数値例では，周期 $L = 1$ とした．

4.1. 精度の検証

本節では，提案法の妥当性を検証するため，周期領域に欠陥を有する散乱体による波動散乱問題を従来法と提案手法で解いた結果を比較する．

Fig.2 のような領域の問題を考える．従来法では，Fig.2 のように 1 つの周期単位に 1 つの散乱体が存在するとし，提案手法では，Fig.3 のように 1 つの周期単位 (周期長を従来法のそれの 3 倍とする) に 3 つの散乱体が存在するとして，欠陥部分の解 u_0 を比較した．外部領域の誘電率 ε と散乱体内部の誘電率 ε' をそれぞれ $\varepsilon = 1.0$，$\varepsilon' = 2.0$ とし，円形散乱体の半径を 0.3 とし，入射波の角振動数を $\omega = 5.0$，入射角度を $\phi = 1.0$[rad] とした．このときの境界 Γ_0 における数値解 $u_0(\boldsymbol{x})$ の $\boldsymbol{x}$ に関するプロットを Fig. 4 に示す．これより，提案手法と従来法によって得られた数値解がほぼ一致していることがわかる．

4.2. ストップバンドにおける波動散乱問題

Fig.5 のように領域は周期単位に円形散乱体が縦横に 5 個ずつ計 25 個存在する周期領域を考える．外部領域の誘電率 ε と散乱体内部の誘電率 ε' をそれぞれ $\varepsilon = 1.0$，$\varepsilon' = 9.0$ とし，円形散乱体の半径を 0.08 とし，入射波の角振動数を $\omega = 13.0$,

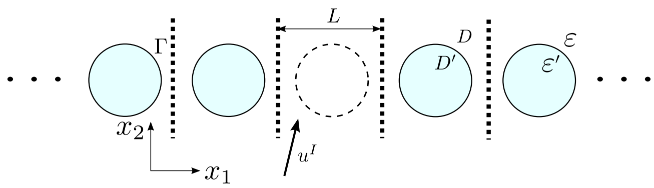

Fig.2　従来法.

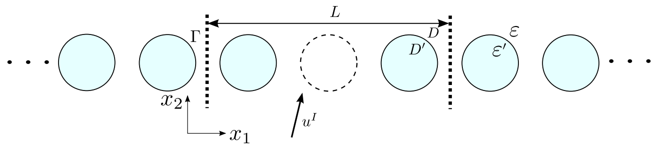

Fig.3　提案手法.

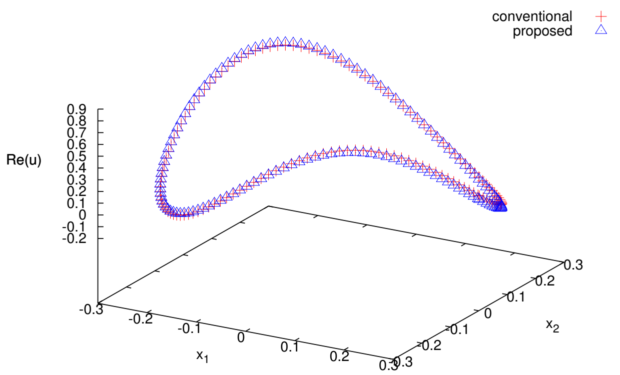

Fig.4　境界 Γ_0 における数値解 $\Re[u_0(\boldsymbol{x})]$.

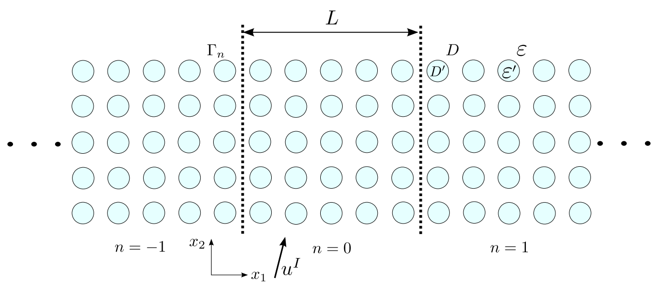

Fig.5　周期領域.

入射角度を $\phi = 0.0$[rad] とする．この問題を周期多重極法で解いて得られた数値解 $u_0(\boldsymbol{x})$ を x_1 方向から見たプロットを Fig. 6 に示す．これより，ストップバンド現象が発生し，入射波が周期領域をほとんど透過していないことがわかる．

次に，Fig.7 のように同様の領域で $n = 0$ の周期単位では欠陥が存在する領域を考える．この問題を提案手法で解いて得られた数値解 $u_0(\boldsymbol{x})$ の実部と虚部を x_1 方向から見たプロットをそれぞれ Fig.8，Fig.9 に示す．同図では，欠陥部分において，入射波が透過している様子が観察できる．

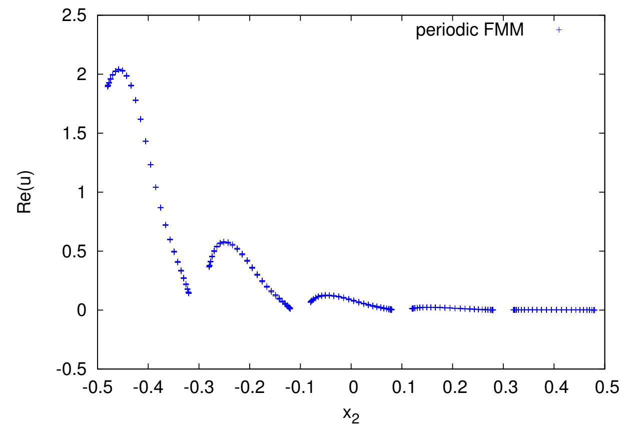

Fig.6　x_1 方向から見た数値解 $\Re[u_0(\boldsymbol{x})]$.

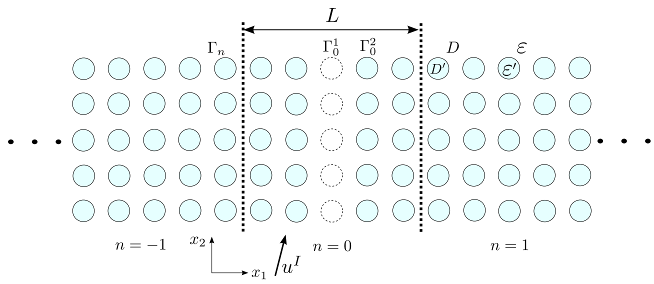

Fig.7　周期単位の一部に欠陥を有する領域.

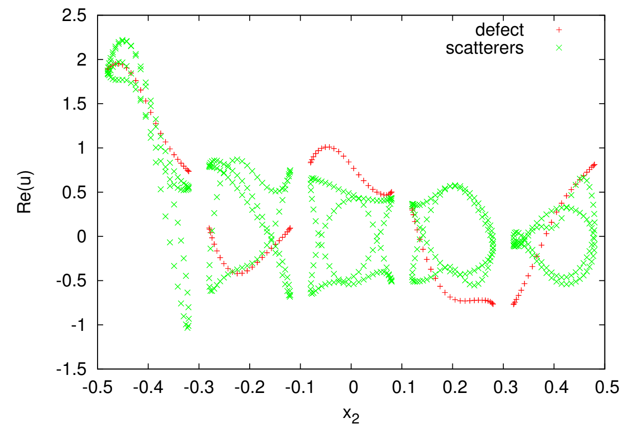

Fig.8　x_1 方向から見た数値解 $\Re[u_0(\boldsymbol{x})]$.

5. 結論

本研究では，周期単位の一部に欠陥を有する 1 次元構造による 2 次元 Helmholtz 方程式の波動散乱問題の解法を提案した．従来法と提案法の数値解を比較することで計算結果の妥当性が確かめられた．また，反復解法に対する前処理手法を提案した．さらに，完全周期問題ではストップバンドを生ずる条件の下で，周期単位の一部に欠陥を有する散乱体による波動散乱問題の解析を行った．計算結果より，欠陥部分を入射波が透過している様子を観察できた．

今後の課題としては，大規模な問題に対する本手法の適用

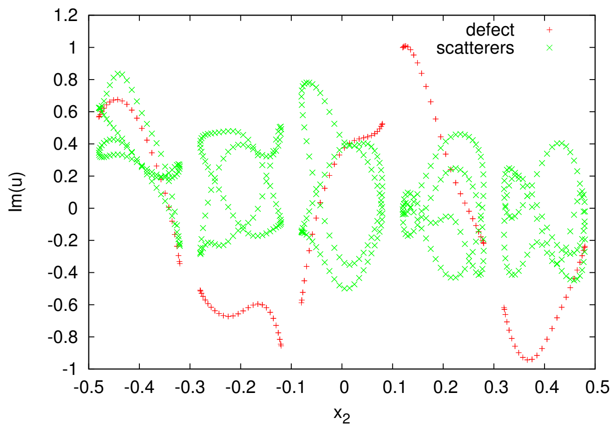

Fig.9 x_1 方向から見た数値解 $\Im[u_0(\boldsymbol{x})]$.

や，本手法を用いて内点計算を含む様々な解析を行うことが挙げられる。また高速直接解法による解法の高速化も残された課題であるが、これについては既に一定の成果が得られつつある．

参考文献

(1) 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, Vol. 73, pp. 381–406，2008.

(2) 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，Vol. 13, pp. 155–158，2008.

(3) 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，Vol. 11, pp. 65–70, 2011.

(4) 森田樹一郎，西村直志: 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，計算数理工学会論文集，Vol. 13, pp. 43–48, 2013.

(5) Y. Otani, N. Nishimura: Behaviour of periodic fast multipole boundary integral equation method for Maxwell's equations near Wood's anomalies，Contemporary Mathematics, Vol. 494, pp. 43–59, AMS, 2009.

(6) T．Sakurai，H．Sugiura: A projection method for generalized eigenvalue problems，Journal of Computational and Applied Mathematics，Vol. 159，pp. 119–128, 2003.

(7) 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，計算数理工学会論文集, Vol. 9, pp. 1–6, 2009.