

# Wood の異常回折周辺における 周期高速多重極境界要素法の挙動について

## ON THE BEHAVIOUR OF PERIODIC FAST MULTIPOLE BOUNDARY INTEGRAL EQUATION METHOD NEAR WOOD'S ANOMALIES

大谷 佳広<sup>1)</sup>, 西村 直志<sup>2)</sup>

Yoshihiro OTANI and Naoshi NISHIMURA

- 1) 京都大学情報学研究科 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: otani@mbox.kudpc.kyoto-u.ac.jp)  
2) 京都大学情報学研究科 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: nchml@i.kyoto-u.ac.jp)

In this paper, we examine the behaviour of the periodic FMM (FMM for periodic scattering problems) when Wood's anomalies arise. Wood's anomalies are phenomena known in the scattering of electromagnetic waves by gratings. They are defined as strong variations in diffracted or transmitted fields over very narrow incident frequency or angle ranges. Some types of Wood's anomalies are known to be related to resonance phenomena. When this type of Wood's anomalies arise, guided modes or leaky modes are induced in the directions of the periodicity and they exert harmful influences on the accuracy of numerical solutions. In this paper we check the accuracy of the periodic FMM and study the convergence properties of the linear solver near Wood's anomalies. Through the numerical analyses, we found that we need finer meshes near anomalies in order to obtain accurate solutions.

**Key Words:** Boundary Integral Equation Method, Fast Multipole Method, Periodic Scattering Problems, Maxwell's Equations

### 1. はじめに

近年、フォトニック結晶<sup>(1)</sup>やメタマテリアル<sup>(2)</sup>といった、構造に周期性を有する新しい光学材料が注目を集めている。これらの周期性を有する新しい光学材料を開発、設計するには、周期波動問題を効率良く扱うことのできる数値解法が必須となる。特に、実問題においては解析モデルの形状が相当複雑であると考えられるから、解くべき問題のサイズは大規模になると予想される。周期問題でない、無限領域における波動散乱問題に対してはこれまで多くの研究がなされており、高速多重極境界要素法<sup>(3, 4)</sup>を用いて大規模な問題が解けることが示されている。しかし、周期波動問題に高速多重極境界要素法を適用した研究は稀である。周期波動散乱問題、つまり  $n$  次元  $m$  重周期波動問題 ( $n > m$ ) においては高速多重極境界要素法が有効であると考えられるため、著者らはこれまで、周期波動散乱問題における高速多重極境界要素法 (periodic FMM) の開発に取り組んできた (2 次元 Helmholtz 方程式<sup>(5)</sup>、3 次元 Maxwell<sup>(6, 7)</sup> 方程式)。

さて、Maxwell 方程式の周期波動散乱問題、特に回折格子の研究分野においては、Wood's anomaly (ウツの異常回折)<sup>(8)</sup> という現象が知られている。これは、入射光の波長、あるいは入射角のわずかな変化に対し、場が劇的に変化する現象のことである。この現象は、解くべき方程式、モデル形状に固有の現象であるが、数値解法の挙動に影響を与える。

Wood's anomaly には、Rayleigh type と resonance type があることが知られているが<sup>(9)</sup>、一般的に、resonance type の anomaly は数値解析の精度を悪化させる要因になりうる。resonance type の anomaly とは、入射光の特定の波長あるいは入射角において、周期方向への導波モード、あるいは漏洩モードが入射波によって誘起される現象である。導波モードが誘起される場合には、解が一意でなくなるか、あるいは可解性がなくなる。漏洩モードが誘起される場合には、解の一意性、可解性は失われないが、解くべき方程式の条件が悪くなる可能性がある。いずれのモードも、数値解の精度、あるいは線形方程式の収束性に悪影響を与えると予想されることから、resonance type の anomaly が生じる場合の periodic FMM の挙動について調べておくことは重要である。そこで、

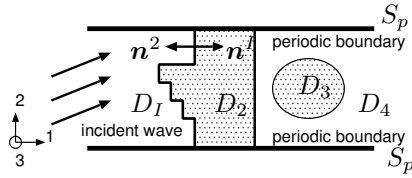


Fig. 1 Periodic boundary value problems

本研究では、3次元 Maxwell 方程式の2重周期問題において、導波モードあるいは漏洩モードが起こる条件近辺における periodic FMM の数値解の精度、ならびに線形反復解法 FGMRES<sup>(10)</sup> の収束性について調べた。

## 2. 問題設定

最初に3次元 Maxwell 方程式2重周期問題の定式化を行う。

いま、解析領域を  $D = ((-\infty, \infty), [-L/2, L/2], [-L/2, L/2])$  とし、Fig. 1 に示すように、 $D = D_1 \cup D_2 \cup \dots \cup D_N$  であるとする。各々の領域内では次の Maxwell 方程式が満たされるものとする。

$$\nabla \times \mathbf{E} = ik_0 \mu^i \mathbf{H}, \quad \nabla \times \mathbf{H} = -ik_0 \epsilon^i \mathbf{E} \quad \text{in } D_i \quad (1)$$

ここに、 $\mathbf{E}$  は  $\sqrt[4]{\mu_0/\epsilon_0}$  で規格化された電場であり、 $\mathbf{H}$  は  $\sqrt[4]{\epsilon_0/\mu_0}$  で規格化された磁場である。ただし、 $\epsilon_0$ 、 $\mu_0$ 、 $k_0$  はそれぞれ真空の誘電率、透磁率、波数である。また、 $\epsilon^i$ 、 $\mu^i$  はそれぞれ領域  $D_i$  の比誘電率、比透磁率であり、 $D_i$  の波数、屈折率はそれぞれ  $k^i = k_0 \sqrt{\epsilon^i \mu^i}$ 、 $n^i = \sqrt{\epsilon^i \mu^i}$  である。

無限遠  $x_1 \rightarrow -\infty$  を含む領域を  $D_I$  とし、 $D_I$  では周期的な入射波  $\mathbf{E}^{\text{inc}}$ 、 $\mathbf{H}^{\text{inc}}$  が存在するものとする。入射波は Maxwell 方程式 (1) を満たし、周期境界  $S_p = \{x | x \in \partial D, |x_2| = L/2 \text{ or } |x_3| = L/2\}$  において、以下のような周期境界条件を満たすように与える。

$$\mathbf{E}^{\text{inc}}(x_1, L/2, x_3) = e^{i\beta_2} \mathbf{E}^{\text{inc}}(x_1, -L/2, x_3)$$

$$\mathbf{E}^{\text{inc}}(x_1, x_2, L/2) = e^{i\beta_3} \mathbf{E}^{\text{inc}}(x_1, x_2, -L/2)$$

$$\mathbf{H}^{\text{inc}}(x_1, L/2, x_3) = e^{i\beta_2} \mathbf{H}^{\text{inc}}(x_1, -L/2, x_3)$$

$$\mathbf{H}^{\text{inc}}(x_1, x_2, L/2) = e^{i\beta_3} \mathbf{H}^{\text{inc}}(x_1, x_2, -L/2)$$

ここに、 $\beta_i$  は  $x_i = -L/2$  と  $x_i = L/2$  の間における入射波の位相差である。特に、入射波が平面波の場合は、以下のように与えられる。

$$\mathbf{E}^{\text{inc}} = \mathbf{a}^{\text{inc}} e^{ik^I \hat{\mathbf{k}}^{\text{inc}} \cdot \mathbf{x}}, \quad \mathbf{H}^{\text{inc}} = \mathbf{b}^{\text{inc}} e^{ik^I \hat{\mathbf{k}}^{\text{inc}} \cdot \mathbf{x}}$$

ここに、 $\mathbf{a}^{\text{inc}}$ 、 $\mathbf{b}^{\text{inc}}$  は入射波の振幅であり、 $\hat{\mathbf{k}}^{\text{inc}}$  は入射波の伝播方向を表す単位ベクトルである。平面入射波の場合には、位相差  $\beta_i$  は  $\beta_i = Lk^I \hat{k}_i^{\text{inc}}$ 、 $i = 2, 3$  と表される。

入射波の周期条件に対応して、周期境界  $S_p$  において、 $\mathbf{E}$ 、 $\mathbf{H}$  に以下のような周期境界条件を課す。

$$\mathbf{E}(x_1, L/2, x_3) = e^{i\beta_2} \mathbf{E}(x_1, -L/2, x_3)$$

$$\mathbf{E}(x_1, x_2, L/2) = e^{i\beta_3} \mathbf{E}(x_1, x_2, -L/2)$$

$$\mathbf{H}(x_1, L/2, x_3) = e^{i\beta_2} \mathbf{H}(x_1, -L/2, x_3)$$

$$\mathbf{H}(x_1, x_2, L/2) = e^{i\beta_3} \mathbf{H}(x_1, x_2, -L/2) \quad (2)$$

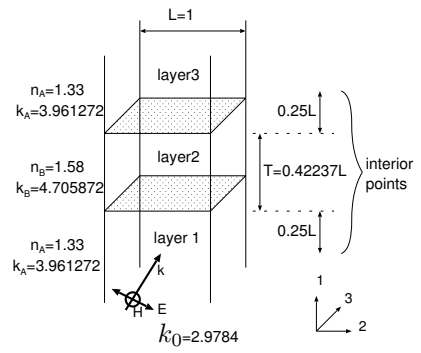


Fig. 2 Model of dielectric layers of slabs

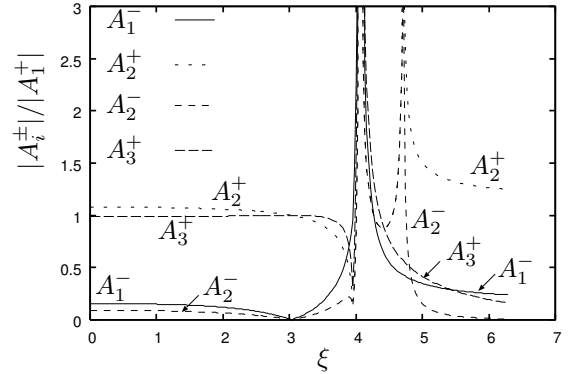


Fig. 3 Amplitudes  $|A_i^\pm|/|A_1^+|$

上記の問題についての、境界積分方程式、ならびに periodic FMM の定式化については、紙面の制約から割愛する。大谷ら<sup>(6)</sup>、Otani<sup>(7)</sup> を参照して頂きたい。

## 3. モードを誘起する条件周辺における数値解法の検証

「はじめに」で述べたように、周期方向への導波モード、あるいは漏洩モードが入射波によって誘起される場合には、解法の精度、収束性が悪くなる可能性がある。そこで、本章では、導波モードが誘起される場合、漏洩モードが誘起される場合についての検討を、それぞれ誘電体平行層、誘電体回折格子モデルを用いて行った。

### 3.1. 導波モードが生じる場合

Fig. 2 に示すように、3層の誘電体平行層 ( $x_1$  軸方向に順に層 1( $D^1$ )、層 2( $D^2$ )、層 3( $D^3$ ) とする) に  $x_1$  正方向に伝播する波が入射する問題を考える。いま、 $x_3$  方向には場は一定であるとし、 $\beta_3 = 0$  とする。磁場について  $x_3$  成分のみが非零であるような、いわゆる TM 問題を考える。真空中の波数を  $k_0 = 2.9784$  とする。層 1、3 の屈折率  $n_A = 1.33$  (波数  $k_A = 3.961272$ ) とし、層 2 の屈折率  $n_B = 1.58$  (波数  $k_B = 4.705872$ ) とする。本モデルの形状は  $x_2, x_3$  方向に同一であるが、便宜的に周期長を  $L = 1$  と取り、 $-\frac{L}{2} \leq x_2, x_3 \leq \frac{L}{2}$  を繰り返し周期とする。また、層 2 の厚さを  $T = 0.42237L$  とする。

このようなモデルにおいては、特定の波数において中間層 2 に導波モードが生じる。そこで、最初に、導波モードが生じる場合の位相差  $\beta_2$  を求めておく。いま、 $x_3$  方向に場は一

定であると仮定しているので、磁場の第3成分  $H_3$  は  $x_1 - x_2$  面内において2次元 Helmholtz 方程式を満たす。

$$\Delta H_3 + (k^i)^2 H_3 = 0 \quad \text{in } D^i \quad (3)$$

また、 $D^+$  と  $D^-$  の境界面において、次の境界条件を満たす。

$$H_3^+ = H_3^-, \quad \frac{1}{\epsilon^+} \frac{\partial H_3^+}{\partial x_1} = \frac{1}{\epsilon^-} \frac{\partial H_3^-}{\partial x_1}$$

ここで、 $H_3^\pm$  は、境界上における  $H_3$  の領域  $D^\pm$  内部からの極限值を表す。いま、 $H_3$  の  $x_2$  方向依存性を  $H_3 = F(x_1)e^{i\xi x_2}$  の形で仮定する。ただし、 $F$  はある関数である。すると、式 (3) が零入射波条件下で非自明解を持つための  $\xi$  の必要条件は以下で与えられる。

$$\tan \frac{\sqrt{k_B^2 - \xi^2} T}{2} = \begin{cases} \frac{\epsilon_B \sqrt{\xi^2 - k_A^2}}{\epsilon_A \sqrt{k_B^2 - \xi^2}} \\ -\frac{\epsilon_A \sqrt{k_B^2 - \xi^2}}{\epsilon_B \sqrt{\xi^2 - k_A^2}} \end{cases} \quad \text{or} \quad (4)$$

$$-k_B \leq \xi \leq -k_A, \quad k_A \leq \xi \leq k_B \quad (5)$$

$T = 0.42237L$  のとき、式 (4) を満たす  $\xi$  を  $\Xi$  と書くと、 $\Xi = \pm k_B$ 、 $\Xi \sim \pm 4.066/L$  となるが、 $\Xi = \pm k_B$  の場合には、 $x_1 \rightarrow \pm\infty$  において0に収束する導波モードは得られない。従って、導波モードが誘起されるための条件は  $\Xi \sim \pm 4.066/L$  である。このモードが周期境界条件を満たすためには、 $\Xi L = 2n\pi + \beta_2$ 、 $n \in \mathbb{Z}$  でなければならない。

次に、数値解との比較のため、所与の位相差  $\beta_2$  に対する解析解を構成しておく。層1、2、3内で、 $H_3$  を次の形に仮定する。

$$H_3^1 = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left( A_1^+(\xi_n) e^{i(\xi_n x_2 + q_1(\xi_n) \cdot (x_1 - d^1))} + A_1^-(\xi_n) e^{i(\xi_n x_2 - q_1(\xi_n) \cdot (x_1 - d^1))} \right)$$

$$H_3^2 = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left( A_2^+(\xi_n) e^{i(\xi_n x_2 + q_2(\xi_n) \cdot (x_1 - d^1))} + A_2^-(\xi_n) e^{i(\xi_n x_2 - q_2(\xi_n) \cdot (x_1 - d^1))} \right)$$

$$H_3^3 = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left( A_3^+(\xi_n) e^{i(\xi_n x_2 + q_3(\xi_n) \cdot (x_1 - d^2))} \right) \quad (6)$$

ここに、 $\xi_n = \frac{2n\pi + \beta_2}{L}$ 、 $q_i(\xi) = \sqrt{(k^i)^2 - \xi^2}$  であり、 $d^1$ 、 $d^2$  はそれぞれ領域1、2の境界、領域2、3の境界の  $x_1$  座標である。ただし、 $(k^i)^2 < \xi^2$  のとき、 $\text{Im}(q_i) > 0$  とする。また、 $H_3$  の右辺括弧内第1項は入射波を表す。上式のように  $H_3$  の形を仮定すると、振幅  $A_i^\pm(\xi)$  は次のように求まる。

$$A_1^-(\xi) = \left( R_{12} + \frac{T_{21} R_{23} T_{12} e^{2iq_2 T}}{1 - R_{21} R_{23} e^{2iq_2 T}} \right) A_1^+(\xi)$$

$$A_2^-(\xi) = \frac{R_{23} T_{12} e^{2iq_2 T}}{1 - R_{21} R_{23} e^{2iq_2 T}} A_1^+(\xi)$$

$$A_2^+(\xi) = \frac{T_{12}}{1 - R_{21} R_{23} e^{2iq_2 T}} A_1^+(\xi)$$

$$A_3^+(\xi) = \frac{T_{23} T_{12} e^{iq_2 T}}{1 - R_{21} R_{23} e^{2iq_2 T}} A_1^+(\xi)$$

ここで、 $T_{ij}$ 、 $R_{ij}$  は次のように与えられる。

$$R_{ij} = \frac{q_i - q_j}{\epsilon^i + \epsilon^j}, \quad T_{ij} = \frac{2q_i}{\epsilon^i + \epsilon^j}$$

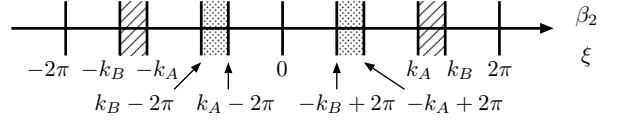


Fig. 4 Region of  $\beta_2$  (tinted area),  $\xi$  (striped area) where guided modes may exist

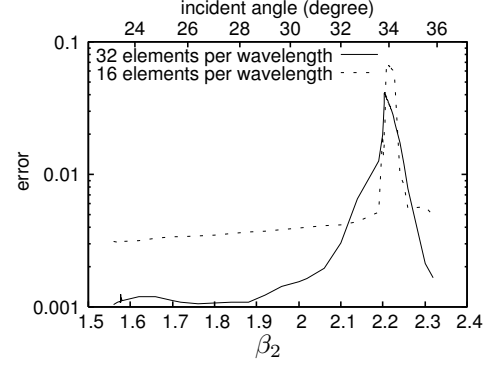


Fig. 5 Relative error (plane wave incidence to slabs)

$0 \leq \xi \leq 2\pi$  に対する  $|A_i^\pm(\xi)|/|A_1^+(\xi)|$  を Fig. 3 に示す。振幅  $A_i^\pm$  の分母は  $\Xi = \pm k_B$ 、 $\Xi \sim \pm 4.066/L$  において零になる。このため、式 (6) において  $\xi_n \sim \pm 4.066/L$  を取りうる場合には  $H_3$  は発散する。しかし、 $\xi_n \rightarrow \pm k_B$  となる場合には、実は  $H_3$  は発散せず有限な極限值を持つ。

本研究では、入射波が平面波の場合と、周期線波源からの波である場合の2通りを扱った。入射波が平面波の場合は、式 (6) における和は  $n = 0$  の時のみ残る。さらに、平面波入射の場合は  $\beta_2 = k_A L \sin \phi$  ( $\phi$  は入射角) であって  $-k_A \leq \beta_2 \leq k_A$  であるから、 $\xi_n \sim \pm 4.066/L$  となり得ない。従って、解が発散することはない。ただし、 $\beta_2 \sim \pm 4.066 \mp 2\pi$  (複号同順) においては導波モードが存在し、解が一意でなくなる。一方、入射波が周期線波源からの波である場合には、 $\xi_n$  が  $\xi_n \sim \pm 4.066/L$  を取るとき、すなわち  $\beta_2 \sim \pm 4.066 + 2n\pi$ 、 $n \in \mathbb{Z}$  の場合に解は発散する。

### 3.1.1 入射波が平面波の場合

前述のように、入射波が平面波であるから、 $-k_A \leq \beta_2 \leq k_A$  である。従って、導波モードが生じうる  $\xi$  の範囲 (式 (5)) に対応する  $\beta_2$  の範囲は、 $k_A - 2\pi \leq \beta_2 \leq k_B - 2\pi$ 、 $-k_B + 2\pi \leq \beta_2 \leq -k_A + 2\pi$  である (Fig. 4 参照)。本研究では、 $-k_B + 2\pi \leq \beta_2 \leq -k_A + 2\pi$  の範囲の  $\beta_2$  に対して数値解析を行った。

数値解析では、Table 1 に示す、2種類のメッシュを用いた。内点は Table 2 のように配置した。線形方程式の反復解法にはリスタートなしの Flexible GMRES (FGMRES) を用いた。前処理行列は多重極法で直接計算される近傍計算の係数行列とし、前処理行列の逆を作用させる操作は GMRES を用いて行った。FGMRES の収束判定条件は  $10^{-3}$  とした。前処理用 GMRES の反復は、残差が  $10^{-1}$  となるか反復回数

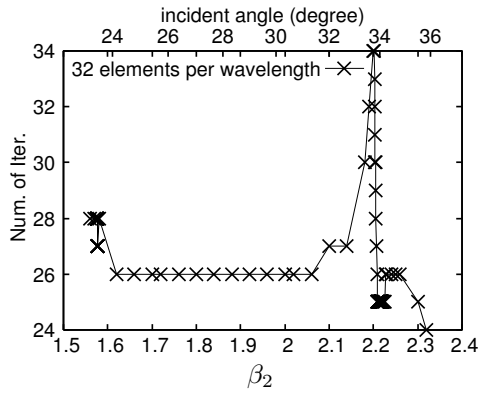


Fig. 6 Numbers of iterations of FGMRES (plane wave incidence to slabs)

Table 1 Meshes (slabs)

Type	Num. of elem. per wavelength	Total num. of elem.	DOF
mesh 1	16	576	1728
mesh 2	32	2304	6921

が 30 回となったところで打ち切った。

位相差  $\beta_2$  (入射角  $\phi$ ) を変化させた時の、内点計算値の解析解からの誤差を Fig. 5 に示す。なお、入射角  $\phi$  と  $\beta_2$  の間には  $\beta_2 = k_A L \sin \phi$  の関係がある。ここで、誤差は次のように定義した。

$$\text{error} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^3 |H_{ij}^{\text{ref}} - H_{ij}^{\text{FMM}}|^2}{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^3 |H_{ij}^{\text{ref}}|^2}}$$

ここに、 $N$  は総内点数であり、内点  $i$  における  $H_j$  の解析解を  $H_{ij}^{\text{ref}}$ 、計算値を  $H_{ij}^{\text{FMM}}$  と書いた。Fig. 5 より、mesh 1、mesh 2 いずれの場合においても、 $\beta_2 \sim 2.217 (= -4.066 + 2\pi)$  付近で誤差が増大していることが分かる。ただし、メッシュを細かくすると、誤差の最大値が減少している。

次に、Fig. 6 に、mesh 2 の場合における、位相差  $\beta_2$  (入射角  $\phi$ ) と FGMRES の反復回数との関係を示す。 $\beta_2 \sim 2.217 (= -4.066 + 2\pi)$  付近で反復回数が増大していることが分かる。

これらの結果から、導波モードが存在する位相差  $\beta_2$  (入射角  $\phi$ ) の周辺において、数値解の精度、反復解法の収束性がともに悪化することが分かった。

### 3.1.2 周期線波源から波が入射する場合

次のような、 $(x_1, x_2) = (d^1 - 0.5L, mL)$ 、 $m \in \mathbb{Z}$  に配置された周期線波源からの TM 入射波を考える。

$$H_3^{\text{inc}}(\mathbf{x}) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} G^{2D}(x_1 - d^1 + 0.5L, x_2 - mL) e^{im\beta_2}$$

ここに、 $G^{2D}$  は 2 次元 Helmholtz 方程式の基本解であり、以下のように与えられる。

$$G^{2D}(x_1, x_2) = \frac{i}{4} H_0^{(1)} \left( k_A \sqrt{x_1^2 + x_2^2} \right)$$

Table 2 Interior points (slabs)

Domain	Num. of interior points $(x_1, x_2, x_3)$	Range of $x_1$
1	$13 \times 13 \times 25$	$d^1 - 0.25L + \epsilon \leq x_1 \leq d^1 - \epsilon$
2	$21 \times 13 \times 25$	$d^1 + \epsilon \leq x_1 \leq d^2 - \epsilon$
3	$13 \times 13 \times 25$	$d^2 + \epsilon \leq x_1 \leq d^2 + 0.25L - \epsilon$

In the above,  $\epsilon = 0.01$ .

The ranges of  $x_2, x_3$  are  $-\frac{L}{2} + \epsilon \leq x_2, x_3 \leq \frac{L}{2} - \epsilon$  for all domains.

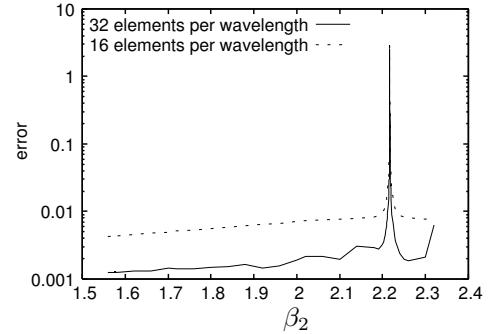


Fig. 7 Relative error (line source wave incidence to slabs)

ここで、 $H_0^{(1)}$  は 0 次第 1 種 Hankel 関数である。 $H_3^{\text{inc}}$  は次のように、一般化 Fourier 級数展開される。

$$H_3^{\text{inc}}(x_1, x_2) = \frac{i}{2L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{e^{iq_1(\xi_n)|x_1 - d^1 + 0.5L| + i\xi_n x_2}}{q_1(\xi_n)}$$

従って、 $x_1 \geq d^1 - 0.5L$  における  $H_3$  の解析解は、式 (6) において

$$A_1^+(\xi_n) = \frac{i}{2L} \frac{e^{i0.5Lq_1(\xi_n)}}{q_1(\xi_n)}$$

としたものである。

$\beta_2$  を変化させた時の、内点計算値の解析解からの誤差を Fig. 7 に示す。 $\beta_2 \sim 2.217 (= -4.066 + 2\pi)$  において解析解は発散するが、数値解の誤差も発散していることが分かる。なお、数値解析に用いた解析メッシュ、計算内点、線形方程式の反復解法、前処理方法、誤差の定義は平面波入射の場合と同一である。

次に、Fig. 8 に、mesh 2 の場合における、 $\beta_2$  と FGMRES の反復回数の関係を示す。 $\beta_2 \sim 2.217 (= -4.066 + 2\pi)$  付近で反復回数が増大している。

### 3.2. 漏洩モードが生じる場合

Tamir ら<sup>(11)</sup> は、Fig. 9 に示す誘電体回折格子に平面波が入射する問題において、漏洩モードによる anomaly が生じることを示した。誘電体回折格子は  $c, p_1, p_2, f, s$  の 5 つの領域からなり、 $x_3$  方向に形状が一定である。周期長  $L$  は Fig. 9 における  $\Lambda$  と取った。各領域の比誘電率は Fig. 9 に示す通りである。ここでは TE 問題すなわち、場が  $x_3$  方向に一定であり、電場  $E$  は  $x_3$  成分のみが非零である問題を取り扱う。入射波は平面波であり、入射角  $\theta_e$  は 38 度で固定する。

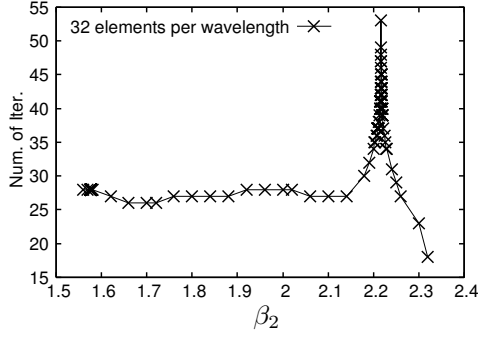


Fig. 8 Number of iterations of FGMRES (line source wave incidence to slabs)

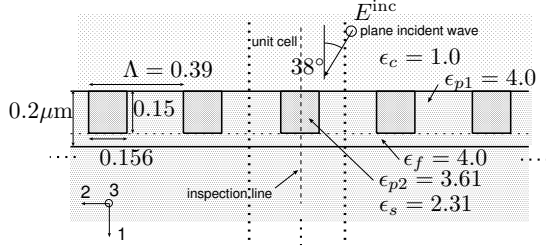


Fig. 9 Model of dielectric gratings

いま、領域  $c, s$  において、電場の第3成分  $E_3$  を次のように展開する。

$$E_3^c = E_3^{\text{inc}} + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \rho_n e^{i(\xi_n x_2 - q_{cn} x_1)}$$

$$E_3^s = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \tau_n e^{i(\xi_n x_2 + q_{sn} x_1)}$$

ここに、 $\xi_n = \beta_2 + \frac{2n\pi}{L}$ 、 $q_{\{c,s\}n} = \sqrt{k_{\{c,s\}n}^2 - \xi_n^2}$  である。Tamir らは数値解析によって、入射波の波長  $\lambda$  が後述の  $\lambda_{Pq}$  に近いとき、 $\rho_0, \tau_0$  が近似的に次の形に表されることを示した。

$$\rho_0 = \frac{\lambda - \lambda_{\rho 0}}{\lambda - \lambda_{Pq}} S_{\rho 0}, \quad \tau_0 = \frac{\lambda - \lambda_{\tau 0}}{\lambda - \lambda_{Pq}} S_{\tau 0}$$

ここに、 $S_{\rho 0}, S_{\tau 0}$  は定数である。また、 $\lambda_{Pq}, \lambda_{\rho 0}, \lambda_{\tau 0}$  は次のような値を持つ。

$$\lambda_{Pq} = 0.468632 + i1.12 \times 10^{-4}$$

$$\lambda_{\rho 0} = 0.468793 - i7.17 \times 10^{-5}$$

$$\lambda_{\tau 0} = 0.468569 + i5.77 \times 10^{-6}$$

$\lambda_{Pq}$  は  $x_3$  方向に伝播する漏洩モードに対応する極である。 $\lambda_{Pq}, \lambda_{\rho 0}, \lambda_{\tau 0}$  は相互に値が近く、非常に小さい虚部を持っている。従って  $\lambda \sim \lambda_{Pq}$  の時には、 $\lambda$  の変化に対し  $\rho_0, \tau_0$  が大きく変動する、いわゆる anomaly が起こる。

本数値解析では、 $\lambda \sim \lambda_{Pq}$  の場合に  $\rho_0, \tau_0$  を求め、Tamir らの結果と比較した。解析メッシュは Table 3 に示す3種類を用いた。Fig. 10 に、mesh 3 を用いた場合の結果を示す。 $\rho_0, \tau_0$  が大きく変動している領域においても、Tamir らの結果と periodic FMM による結果はよく一致している。

Table 3 Meshes (dielectric grating)

Type	Num. of elem. per wavelength	Total num. of elem.	DOF
mesh 1	7.5	1066	3172
mesh 2	15	4050	12100
mesh 3	30	16000	47900

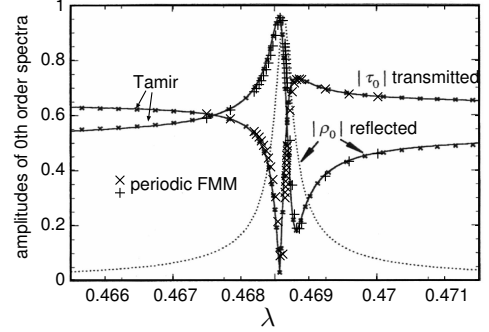


Fig. 10 Amplitudes of 0th order diffracted and reflected waves (solid line · small ×: Tamir et al., ×+: periodic FMM)

次に、数値解の妥当性を検証するために、エネルギー保存則が数値的に満たされているか確認した。Maxwell 方程式では、エネルギー流束はポインティングベクトル

$$\mathbf{p} = \frac{1}{2} \text{Re}(\mathbf{E} \times \bar{\mathbf{H}})$$

によって表される<sup>(12)</sup>。ここに、 $\bar{\cdot}$  は複素共役を表す。ポインティングベクトルを用いると、周期境界値問題におけるエネルギー保存則は、次のように表される。

$$\int_{S_{\infty}} p_1^{\text{sca}} dS + \int_{S_{-\infty}} (-p_1^{\text{sca}}) dS = \int_{S_{-\infty}} (p_1^{\text{inc}}) dS \quad (7)$$

ここで、 $p_1^{\text{sca}}, p_1^{\text{inc}}$  はそれぞれ散乱波 ( $\mathbf{E} - \mathbf{E}^{\text{inc}}, \mathbf{H} - \mathbf{H}^{\text{inc}}$ )、入射波 ( $\mathbf{E}^{\text{inc}}, \mathbf{H}^{\text{inc}}$ ) から計算されるポインティングベクトルの  $x_1$  成分である。また、

$$S_{\infty} = \lim_{R \rightarrow \infty} \{(x_1, x_2, x_3) | x_1 = R, |x_2|, |x_3| \leq \frac{L}{2}\}$$

$$S_{-\infty} = \lim_{R \rightarrow \infty} \{(x_1, x_2, x_3) | x_1 = -R, |x_2|, |x_3| \leq \frac{L}{2}\}$$

である。式 (7) の左辺第1項を透過エネルギー、第2項を反射エネルギー、右辺を入射エネルギーと呼ぶことにする。これらのエネルギーは遠方場計算によって求める<sup>(6, 7)</sup>。Fig. 11 に、透過エネルギーと反射エネルギーの和の、入射エネルギーに対する比を示す。mesh 1, mesh 2 を用いた場合には、場が大きく変動する波長帯でエネルギー保存則に数パーセントの誤差があるのに対し、mesh 3 を用いた場合には誤差は0.5パーセント程度である。このことから、anomaly が生じる場合には分割の細かいメッシュを用いる必要があることが分かる。

次に、mesh 3 を用いた場合の FGMRES の反復回数を、Fig. 12 に示す。 $\rho_0, \tau_0$  の変動が大きい波長帯において、反復回数が増大していることが分かる。

$\lambda$  が  $\lambda_{Pq}$  に近いときは、漏洩モードが誘起される。Tamir らはこのことを数値解析によって確認した。具体的には、

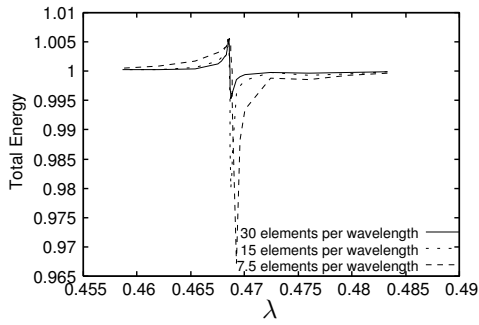


Fig. 11 Total energy (grating)

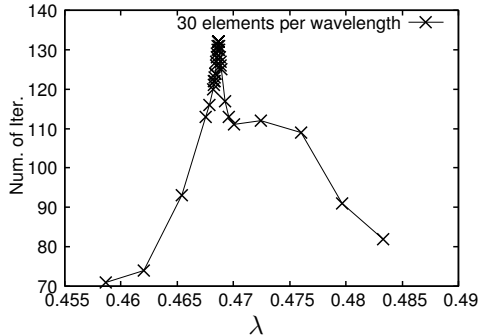


Fig. 12 Number of iterations of FGMRES (grating)

$\lambda \sim 0.4686$  の時に、Fig. 9 に示す観測線上で、ポインティングベクトルの  $x_2$  成分を求めた。そこで、本数値解析でもポインティングベクトルを計算し、Tamir らの結果と比較した。結果を Fig. 13 に示す。Tamir らの結果と periodic FMM による結果はよく一致していることが分かる。領域  $f$ 、 $p_2$  において、漏洩モードによる  $x_2$  方向エネルギー流束のピークが観察される。入射波のポインティングベクトルの  $x_2$  成分は、 $p_2^{\text{inc}} = \frac{1}{2} \sin \theta_c$  であるから、流束のピーク値は入射波のエネルギー流束のおよそ 2000 倍である。

#### 4. 結論

resonance type の Wood's anomaly は、一般的に数値解法の精度を悪化させる。そこで、本研究では、周期の方向に導波モード、漏洩モードが誘起される場合の periodic FMM の精度、反復解法の収束性について調べた。その結果、これらのモードが生じる場合には数値解の精度が悪化すること、反復解法の収束性が悪くなることを確認した。ただし、数値解の精度の悪化はメッシュを細かくすることによってある程度防げることが分かった。従って、モードを誘起する入射波長、入射角の周辺では細かいメッシュを用いる必要がある。

もちろん、一般の問題では、モードが存在する波長、入射角は予め分からないことが普通である。そこで、

- 入射波長、入射角のわずかな変化に対して場が大きく変化する
- エネルギー保存の精度が悪い
- 線形解法の反復回数が増加する

ような入射波長帯、入射角帯が存在する場合にはモードを誘

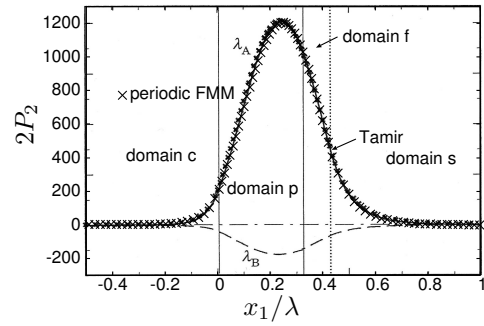


Fig. 13 Energy flux in the direction of  $x_2$  ( $\lambda \sim 0.4686$ )

起している可能性があるとして、メッシュを細かくして計算してみることを望ましい。

謝辞 本研究は、科学研究費補助金（特別研究員奨励費）の補助を受けた。ここに謝意を表す。

#### 参考文献

- (1) J.D. Joannopoulos, R.D. Meade and J.N. Winn: *Photonic Crystals*, (1995), Princeton University Press.
- (2) J.B. Pendry: Negative refraction makes a perfect lens, *Physical Review Letters*, **85**(2000), pp. 3966–3969.
- (3) L. Greengard and V. Rokhlin: A fast algorithm for particle simulations, *Journal of Computational Physics*, **73**(1987), pp. 325–348.
- (4) N. Nishimura: Fast multipole accelerated boundary integral equation methods, *Applied Mechanics Reviews*, **55**(2002), pp. 299–324.
- (5) Y. Otani and N. Nishimura: An FMM for periodic boundary value problems for cracks for Helmholtz' equation in 2D, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **73**(2008), pp. 381–406.
- (6) 大谷佳広, 西村直志: 3次元 Maxwell 方程式の周期境界値問題における高速多重極境界要素法, *応用力学論文集*, **10**(2007), pp. 243–254.
- (7) Y. Otani: Fast multipole methods for periodic problems in elasticity and electromagnetics, PhD thesis, Kyoto University, (2007).
- (8) R. Petit (Eds): *Electromagnetic theory of gratings*, (1980), Springer-Verlag.
- (9) A. Hessel and A. A. Oliner: A new theory of Wood's anomalies on optical gratings, *Applied Optics*, **4**(1965), pp. 1275–1297.
- (10) Y. Saad: *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*, Second Edition, (2003), SIAM.
- (11) T. Tamir and S. Zhang: Resonant scattering by multilayered dielectric gratings, *Journal of the Optical Society of America A*, **14**(1997), pp. 1607–1616.
- (12) W.C. Chew: *Waves and Fields in Inhomogeneous Media*, (1995), IEEE Computer Society Press