3次元Maxwell 方程式直交異方周期散乱問題における高速多重極境界要素法

Fast Multipole Method for Orthotropoic Periodic Scattering Problems in Maxwell's Equations in 3D

大谷　佳広 [1)], 西村　直志 [2)]

Yoshihiro OTANI 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: otani@mbox.kudpc.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 discusses an FMM (Fast Multipole Method) for orthotropic periodic boundary value problems for Maxwell's equations in 3D. We consider scattering problems where metallic or dielectric scatters are aligned periodically with different periodic lengths in two orthogonal directions. The multipole and local expansions of the periodic Green function are used for accelerating the solution of the integral equations. We derive Fourier integral expressions for the periodic Green function and its derivatives, which are essential ingredients in our formulation. The cells used in the proposed FMM are not cubic because all the cells in the FMM tree are geometrically similar to the unit cell of the periodic structure. We show modifications required to the FMM algorithm for introducing non-cubic cells. Through numerical tests we conclude that the proposed method is efficient and accurate.

Key Words : fast multipole method (FMM), boundary element method (method of moments), periodic problems, lattice sums

1. はじめに

境界要素法は偏微分方程式の数値解法の一つであり，ここ十数年の間に開発の進んだ高速多重極法 (1) と組み合わせて使用することにより，大規模な問題の解析が可能になった．現在では，高速多重極境界要素法は基礎研究の段階を過ぎたと言え，より工学的に有用な問題，実用的な問題へ適用する試みが多くなされている．

一方で，近年，フォトニック結晶やメタマテリアルといった，周期構造に起因して特徴的な性質を示す新しい材料に注目が集まっている．そのため，波動周期境界値問題を高精度で効率的に解析できる数値解法への需要が高まっている．

このような背景の下，著者らは，3 次元 Maxwell 方程式の 2 軸等方周期問題における高速多重極法 periodic FMM(2) を開発し，数値実験による性能検証により，フォトニック結晶等の光学材料設計のための有力な解析ツールになりうることを示した．ただし，そこでは，等方周期問題，すなわち直交 2 軸方向について周期長が等しい問題に対象を限定しており，扱うことのできるモデルは限られていた．

そこで，本研究では，3 次元 Maxwell 方程式 2 周期問題における periodic FMM を直交異方周期問題に拡張する．periodic FMM の定式化では，周期 Green 関数の多重極展開を用いるが，その際周期 Green 関数及びその高階導関数の格子和が必要となる．そこで，Fourier 解析を用いて，それらの関数の算法を導く．また，periodic FMM では，周期構造の繰り返し単位構造（unit cell）を FMM 木構造の level 0 セルとするため，異方周期問題では FMM 木構造の全てのセルを非立方体（直方体）とする必要がある．そこで，直方体セルを導入するために必要な，FMM アルゴリズムの修正点について述べる．最後に，数値解析により，本研究で提案する解法の効率性，数値解の妥当性を検証する．

2. 定式化

2.1. 問題の記述

いま，解析モデルは x_2，x_3 方向に周期的であり，周期長をそれぞれ L_2，L_3 とする．さらに，$L_2 \geq L_3$ と仮定する．次に，解析領域 D を次のように定める．

$$D = (-\infty, \infty) \otimes (-L_2/2, L_2/2) \otimes (-L_3/2, L_3/2),$$

さらに，D は，Fig. 1 のように，N 個の部分領域に分割され，

2008 年 9 月 25 日受付，2008 年 10 月 24 日受理

各々の領域 D_i で，次の Maxwell 方程式が成り立つとする．

$$\nabla \times \boldsymbol{E} = i\omega\mu^i \boldsymbol{H} \quad \nabla \times \boldsymbol{H} = -i\omega\epsilon^i \boldsymbol{E} \quad \text{in } D_i$$

ここに，$\boldsymbol{E}$，$\boldsymbol{H}$ はそれぞれ電場，磁場であり，ω は周波数，ϵ^i，μ^i はそれぞれ領域 D_i の誘電率，透磁率である．これらより，領域 D_i の波数は $k_i = \omega\sqrt{\epsilon^i\mu^i}$ と与えられる．さらに，$\boldsymbol{E}$，$\boldsymbol{H}$ は，部分領域同士の境界面において，接線成分が連続であるとする．また，領域 D_I は無限遠 $x_1 \to -\infty$ を含み，次のような入射波が存在するとする．

$$\boldsymbol{E}^{\mathrm{inc}} = \boldsymbol{a}^{\mathrm{inc}} e^{i\boldsymbol{k}_I^{inc}\cdot\boldsymbol{x}} \quad \boldsymbol{H}^{\mathrm{inc}} = \boldsymbol{b}^{\mathrm{inc}} e^{i\boldsymbol{k}_I^{inc}\cdot\boldsymbol{x}}$$

さらに，周期境界 $S_p = \{\boldsymbol{x} |\ \boldsymbol{x} \in \partial D,\ |x_2| = L_2/2 \text{ or } |x_3| = L_3/2\}$ において，次のような周期境界条件を課す．

$$\boldsymbol{X}(x_1, L_2/2, x_3) = e^{i\beta_2}\boldsymbol{X}(x_1, -L_2/2, x_3)$$
$$\boldsymbol{X}(x_1, x_2, L_3/2) = e^{i\beta_3}\boldsymbol{X}(x_1, x_2, -L_3/2)$$

ここに，$\boldsymbol{X}$ は $\boldsymbol{E}$ または $\boldsymbol{H}$ である．また，β_i は次で与えられる $x_i = -L_i/2$ と $x_i = L_i/2$ との間の入射波の位相差である．

$$\beta_i = L_i k_i^{\mathrm{inc}}, \quad i = 2, 3.$$

加えて，$(\boldsymbol{E}^{\mathrm{sca}}, \boldsymbol{H}^{\mathrm{sca}}) = (\boldsymbol{E} - \boldsymbol{E}^{\mathrm{inc}}, \boldsymbol{H} - \boldsymbol{H}^{\mathrm{inc}})$ で与えられる散乱波成分について，$x_1 \to \pm\infty$ において放射条件を課す．

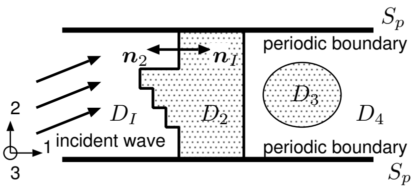

Fig. 1　Periodic boundary value problems

2.2. 周期 Green 関数

周期問題における境界要素法において用いる周期 Green 関数について述べる．Maxwell 方程式の 2 周期問題の Green 関数を Γ_{ip}^{P} と書く．Γ_{ip}^{P} は次の支配方程式を満たす．

$$e_{ijk}e_{klm}\Gamma_{mp,lj}^{\mathrm{P}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) - k^2\Gamma_{ip}^{\mathrm{P}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) = \delta_{ip}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}),$$

さらに，$\boldsymbol{E}$，$\boldsymbol{H}$ と同様の周期境界条件を満たすものとする．

Fourier 解析によると，Γ_{ip}^{P} が次のような格子和表現を有することが分かる．

$$\Gamma_{ip}^{\mathrm{P}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) = \sum_{\boldsymbol{\omega}\in\mathcal{L}} \Gamma_{ip}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}-\boldsymbol{\omega})e^{i\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\omega}} \tag{1}$$

ここに，Γ_{ip} は 3 次元 Maxwell 方程式の基本解，$\mathcal{L}$ は格子点であり，$\mathcal{L} = \{(0, \omega_2, \omega_3)|\ \omega_2 = pL_2,\ \omega_3 = qL_3,\ p, q \in \mathbb{Z}\}$ と定義される．Γ_{ip}^{P} は次のようにも書ける．

$$\Gamma_{ip}^{\mathrm{P}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) = \left(\frac{1}{k^2}\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial x_p} + \delta_{ip}\right) G^{\mathrm{P}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})$$

ここに，G^{P} は 3 次元 Helmholtz 方程式の周期 Green 関数であり，Γ_{ip} の場合と同様に 3 次元 Helmholtz 方程式の基本解 G の格子和によって表現される．

2.3. 境界積分方程式

異なる領域間の境界において，$\boldsymbol{E}$ と $\boldsymbol{H}$ の接線成分の連続性から，次のような境界積分方程式を得る．

$$\begin{aligned}
0 = \sum_d \Bigg(& \delta_{dI} \int_{\partial D_d \setminus S_p} \boldsymbol{t}^d(x)\cdot\boldsymbol{E}^{\mathrm{inc}}(x) dS_x \\
& + \int_{\partial D_d \setminus S_p}\int_{\partial D_d \setminus S_p} \Big\{ \boldsymbol{t}^d(x)\cdot\Big(\boldsymbol{m}^d(y)\times\nabla_y G_d^{\mathrm{P}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\Big) \\
& - i\omega\mu^d \boldsymbol{t}^d(x)\cdot\boldsymbol{j}^d(y) G_d^{\mathrm{P}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) \\
& + \frac{i}{\omega\epsilon^d}\mathrm{div}_S \boldsymbol{t}^d(x)\ \mathrm{div}_S \boldsymbol{j}^d(y) G_d^{\mathrm{P}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\Big\} dS_y dS_x \Bigg)
\end{aligned} \tag{2}$$

$$\begin{aligned}
0 = \sum_d \Bigg(& \delta_{dI} \int_{\partial D_d \setminus S_p} \boldsymbol{t}^d(x)\cdot\boldsymbol{H}^{\mathrm{inc}}(x) dS_x \\
& + \int_{\partial D_d \setminus S_p}\int_{\partial D_d \setminus S_p} \Big\{ -\boldsymbol{t}^d(x)\cdot\Big(\boldsymbol{j}^d(y)\times\nabla_y G_d^{\mathrm{P}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\Big) \\
& - i\omega\epsilon^d \boldsymbol{t}^d(x)\cdot\boldsymbol{m}^d(y) G_d^{\mathrm{P}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) \\
& + \frac{i}{\omega\mu^d}\mathrm{div}_S \boldsymbol{t}^d(x)\ \mathrm{div}_S \boldsymbol{m}^d(y) G_d^{\mathrm{P}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\Big\} dS_y dS_x \Bigg)
\end{aligned} \tag{3}$$

ここに，和を取る変数 d は部分領域の番号である．また，$\boldsymbol{j}^d$，$\boldsymbol{m}^d$ はそれぞれ領域 D_d についての表面電流，表面磁流ベクトルであり，$\boldsymbol{j} = \boldsymbol{n}^d \times \boldsymbol{H}$，$\boldsymbol{m} = \boldsymbol{E} \times \boldsymbol{n}^d$ と定義される．$\boldsymbol{n}^d$ は領域 D_d の外向き法線ベクトル，$\boldsymbol{t}^d = \boldsymbol{T} \times \boldsymbol{n}^d$ であり，$\boldsymbol{T}^d$ は試験ベクトルである．$\boldsymbol{T}^d$ は，境界上に稜線がある場合でも接線成分が連続であるとする．

上の積分方程式において，$\boldsymbol{j}^d$，$\boldsymbol{m}^d$ が未知変数であり，式 (2) と (3) を連立して解くことにより $\boldsymbol{j}^d$，$\boldsymbol{m}^d$ を求める．なお，上記の定式化は PMCHW(T) formulation[(3)] と等価であり，見掛けの固有値問題を回避していることに注意する．

2.4. 高速多重極法

本節では，高速多重極法における諸公式を示す．周期高速多重極法の定式化の多くは，通常の（周期でない）高速多重極法の定式化と共通している．そのため，ここでは通常の高速多重極法の定式化のみを示し，3 節において周期高速多重極法への拡張方法について述べる．

本手法では，大谷ら [(4)] が提案した切替えアルゴリズムを用いている．すなわち，FMM 木構造において，浅いレベルでは diagonal form を用い，深いレベルでは low frequency FMM を用いる．切替えレベルは，セルの寸法と波数によって定める．本論文では，紙面の制約より，low frequency FMM に必要な公式のみ示す．diagonal form については，Otani ら [(2)] を参照されたい．

Maxwell 方程式における高速多重極法は，次に示すような，$\boldsymbol{E}$，$\boldsymbol{H}$ に対する積分表示から得られる．

$$\begin{aligned}
E_i(x) = -\frac{1}{k^2}e_{ikj}\frac{\partial}{\partial x_k}\int_{\partial D_i} \Bigg(& i\omega\mu e_{pqj}\frac{\partial}{\partial y_q}G(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})j_p(y) \\
& - e_{pqr}e_{rsj}\frac{\partial}{\partial y_s}\frac{\partial}{\partial y_q}G(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})m_p(y)\Bigg) dS_y
\end{aligned} \tag{4}$$

$$\begin{aligned}
H_i(x) = -\frac{e_{iuv}e_{vkj}}{i\omega\mu k^2}\frac{\partial}{\partial x_u}\frac{\partial}{\partial x_k}\int_{\partial D_i} \Bigg(& i\omega\mu e_{pqj}\frac{\partial}{\partial y_q}G(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})j_p(y) \\
& - e_{pqr}e_{rsj}\frac{\partial}{\partial y_s}\frac{\partial}{\partial y_q}G(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})m_p(y)\Bigg) dS_y
\end{aligned} \tag{5}$$

ここで，3 次元 Helmholtz 方程式の基本解 G は次のように多重極展開される．

$$G(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})=\frac{e^{ik|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}}{4\pi|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}=\frac{ik}{4\pi}\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n}(2n+1)\tilde{I}_n^m(\overrightarrow{Oy})O_n^m(\overrightarrow{Ox})$$

ここに，$|\overrightarrow{Ox}|>|\overrightarrow{Oy}|$ である．O_n^m，I_n^m，$\tilde{I}_n^m$ は次のように定義される．

$$O_n^m(\overrightarrow{Ox})=h_n^{(1)}(k|\overrightarrow{Ox}|)Y_n^m\left(\frac{\overrightarrow{Ox}}{|\overrightarrow{Ox}|}\right)$$

$$I_n^m(\overrightarrow{Ox})=j_n(k|\overrightarrow{Ox}|)Y_n^m\left(\frac{\overrightarrow{Ox}}{|\overrightarrow{Ox}|}\right),\quad \tilde{I}_n^m(\overrightarrow{Ox})=j_n\overline{Y}_n^m$$

また，$h_n^{(1)}$，j_n はそれぞれ，第 1 種球 Hankel 関数，球 Bessel 関数であり，Y_n^m は次で定義される球面調和関数である．

$$Y_n^m\left(\frac{\overrightarrow{Ox}}{|\overrightarrow{Ox}|}\right)=\sqrt{\frac{(n-m)!}{(n+m)!}}P_n^m(\cos\theta)e^{im\phi}$$

ただし，(r,θ,ϕ) は $\overrightarrow{Ox}$ の極座標である．また，P_n^m は，Legendre 陪関数であり，$m\le 0$ のとき以下のように定義する．

$$P_n^{-m}(x)=(-1)^m\frac{(n-m)!}{(n+m)!}P_n^m(x)\quad(m\ge 0)$$

G の多重極展開を式 (4)，(5) に代入すると，展開中心 O についての多重極モーメント $M_{i,n,m}(O)$ は次の形で定義すれば良いことが分かる．

$$M_{j,n,m}(O)=\int\left(-e_{pqr}e_{rsj}\frac{\partial}{\partial y_q}\frac{\partial}{\partial y_s}\tilde{I}_n^m(\boldsymbol{y})m_p(y)+i\omega\mu e_{pqj}\frac{\partial}{\partial y_q}\tilde{I}_n^m(\boldsymbol{y})j_p(y)\right)dS_y$$

局所展開，M2L，M2M，L2L 公式は，下の展開式を用いれば求まる．（ただし，$|\overrightarrow{OO'}|>|\overrightarrow{O'x}|$）．

$$I_n^m(\overrightarrow{Ox})=\sum_{n'=0}^{\infty}\sum_{m'=-n'}^{n'}(2n'+1)U_{n,n'}^{m,m'}(\overrightarrow{OO'})I_{n'}^{m'}(\overrightarrow{O'x})\quad(6)$$

$$O_n^m(\overrightarrow{Ox})=\sum_{n'=0}^{\infty}\sum_{m'=-n'}^{n'}(2n'+1)T_{n,n'}^{m,m'}(\overrightarrow{OO'})I_{n'}^{m'}(\overrightarrow{O'x})\quad(7)$$

$$U_{n,n'}^{m,m'}(\overrightarrow{OO'})=\sum_{n''=0}^{\infty}\sum_{m''=-n''}^{n''}(2n''+1)I_{n''}^{m''}(\overrightarrow{OO'})u_{n,n',n''}^{m,m',m''}$$

$$T_{n,n'}^{m,m'}(\overrightarrow{OO'})=\sum_{n''=0}^{\infty}\sum_{m''=-n''}^{n''}(2n''+1)O_{n''}^{m''}(\overrightarrow{OO'})u_{n,n',n''}^{m,m',m''}$$

$$u_{n,n',n''}^{m,m',m''}=\frac{i^{-n+n'+n''}}{4\pi}\int_{|\hat{\boldsymbol{k}}|=1}Y_n^m(\hat{\boldsymbol{k}})\overline{Y}_{n'}^{m'}(\hat{\boldsymbol{k}})\overline{Y}_{n''}^{m''}(\hat{\boldsymbol{k}})dS_{\hat{\boldsymbol{k}}}$$

ただし，$u_{n,n',n''}^{m,m',m''}$ は，$m-m'-m''=0$，$n+n'+n''$: even，$n+n'\ge n''$，$n'+n''\ge n$，$n''+n\ge n'$ の全てが満たされる場合以外は零である．

上の展開式を用いると，$\boldsymbol{E}$，$\boldsymbol{H}$ の局所展開は以下のように導かれる．

$$E_i(x)=-\frac{i}{4\pi k}\sum_n\sum_m(2n+1)L_{j,n,m}(O')e_{ikj}\frac{\partial}{\partial x_k}I_n^m(\overrightarrow{O'x})$$

$$H_i(x)=-\frac{1}{4\pi\omega\mu k}\times\sum_n\sum_m(2n+1)L_{j,n,m}(O')e_{iuv}e_{vkj}\frac{\partial}{\partial x_u}\frac{\partial}{\partial x_k}I_n^m(\overrightarrow{O'x})$$

ここに，$L_{j,n,m}(O')$ は，展開中心 O' についての局所展開係数であり，式 (7) を用いると，次の M2L 公式によって計算されることが分かる．

$$L_{j,n,m}(O')=\sum_{n'=0}^{\infty}\sum_{m'=-n'}^{n'}(2n'+1)T_{n',n}^{m',m}(\overrightarrow{O'O})M_{j,n',m'}(O)$$

多重極モーメントの展開中心の移動公式 (M2M) は，式 (6) を用いると，次のように導かれる．

$$M_{j,n,m}(O')=\sum_{n'=0}^{\infty}\sum_{m'=-n'}^{n'}(2n'+1)U_{n',n}^{m',m}(\overrightarrow{OO'})M_{j,n',m'}(O)$$

同様に，局所展開係数の展開中心の移動公式 (L2L) は次のように導かれる．

$$L_{j,n,m}(x_1)=\sum_{n'=0}^{\infty}\sum_{m'=-n'}^{n'}(2n'+1)U_{n',n}^{m',m}(\overrightarrow{x_0x_1})L_{j,n',m'}(x_0)$$

ただし，上で記述した公式における無限級数を p 項で打ち切ったとすると，仮に $U_{n,n'}^{m,m'}$，$T_{n,n'}^{m,m'}$ をあらかじめ計算して記憶したとしても，計算量は $O(p^4)$ となる．そこで，本手法では回転変換を用いて $U_{n,n'}^{m,m'}=T_{n,n'}^{m,m'}=0$ $(m\ne m')$ とし，計算量を $O(p^3)$ に抑えている．また，$U_{n,n'}^{m,m}$，$T_{n,n'}^{m,m}$ は，漸化式を用いることにより $O(p^3)$ の計算量で計算している [5]．

3. 周期高速多重極法

ここでは，ある部分領域 D_a に着目して考える．いま，D_a は，辺が x_1，x_2，x_3 軸に平行で，それぞれの方向について辺長が L_2，L_2，L_3 であるような直方体に含まれると仮定する．この直方体をユニットセルと呼び，FMM 木構造の level 0 セルとする．このため，異方周期の場合（$L_2>L_3$）にはセルは非立方体（直方体）となる．

Γ^{P} の格子和表現式 (1) より，周期境界値問題はユニットセルと全く同じレプリカセルが 3 次元空間に無限に繰り返し配置されている問題と等価であることが分かる（Fig. 2）．

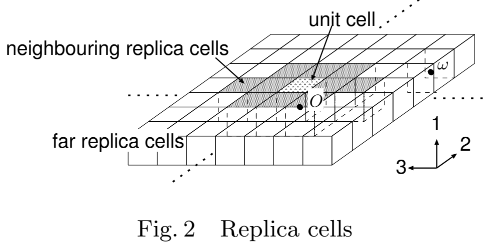

Fig. 2　Replica cells

いま，Fig. 2 のように，無限個のレプリカセルを，ユニットセルの近傍にあるセル C_N と，遠方にあるセル C_F に分ける．ただし，異方周期の場合にはセルが立方体でないため，遠方・近傍の定義が通常の多重極法とは異なる．これについ

ては次節で述べる．レプリカセルを C_N と C_F に分けたことに対応して，$\Gamma^{\mathrm{P}}_{ij} = \Gamma^{\mathrm{PF}}_{ij} + \Gamma^{\mathrm{PN}}_{ij}$ と分解する．ここに，

$$\Gamma^{\mathrm{PF}}_{ij}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) = \sum_{\boldsymbol{\omega}\in\mathcal{L}'} \Gamma_{ij}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}-\boldsymbol{\omega}) e^{i\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\omega}}$$

$$\Gamma^{\mathrm{PN}}_{ij}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) = \sum_{\boldsymbol{\omega}\in\mathcal{L}''} \Gamma_{ij}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}-\boldsymbol{\omega}) e^{i\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\omega}}$$

である．$\mathcal{L}'$ は C_F のセル中心の集合であり，$\mathcal{L}'' = \mathcal{L}\backslash\mathcal{L}'$ である．$\mathcal{L}'$ を次のように定義する．

$$\mathcal{L}' = \{(0,\omega_2,\omega_3)|\ \omega_2 = pL_2,\ \omega_3 = qL_3,\ p,q\in\mathbb{Z},$$
$$\sqrt{(pL_2)^2+(qL_3)^2} \geq C\frac{\sqrt{2(L_2)^2+(L_3)^2}}{2}\}$$

C はセルの遠近を定義するためのパラメータであり，次節で説明する．周期 Green 関数の評価において，Γ^{PN} からの寄与は，通常の多重極法に若干の変更を加えるだけで計算できる．すなわち，まず，ユニットセル内部の各セルの M2L interaction list の定義を変更し，近傍レプリカセル内部のセルも含むこととする [2]．そうした上で，ユニットセルにおいて通常の upward pass，downward pass を最深レベルから level 0 までの間で実行すれば良い．

Γ^{PF} からの寄与を計算するためには，level 0 において，無限個の遠方レプリカセルからの寄与を計算する公式 (periodised M2L 公式）を用いる．periodised M2L 公式は次のように与えられる．

$$L_{j,n,m}(O) = \sum_{n'=0}^{\infty}\sum_{m'=-n'}^{n'}(2n'+1)\acute{T}^{m',m}_{n',n}M_{j,n',m'}(O)$$

ここに，$M_{j,n',m'}(O)$ はレベル 0 のセルの多重極モーメント，$L_{j,n,m}(O)$ はレベル 0 のセルの局所展開係数である．$\acute{T}^{m',m}_{n',n}$ は periodised M2L 公式の係数であり，

$$\acute{T}^{m,m'}_{n,n'} = \sum_{\boldsymbol{\omega}\in\mathcal{L}'} T^{m,m'}_{n,n'}(-\boldsymbol{\omega})e^{i\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\omega}}$$

と定義される．$\acute{T}^{m,m'}_{n,n'}$ は，

$$\hat{T}^{0,m'}_{0,n'} = (-1)^{n'+m'}\left(\sum_{\omega\in\mathcal{L}'} O^{-m'}_{n'}(-\boldsymbol{\omega})e^{i\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\omega}}\right) \tag{8}$$

を初期値とした漸化式によって求めることができる．

上記の公式において，格子和 $\sum_{\boldsymbol{\omega}\in\mathcal{L}'} O^m_n(-\boldsymbol{\omega})e^{i\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\omega}}$ の評価が必要となる．$O^m_n(-\boldsymbol{\omega})$ の $|\omega| \to \infty$ の漸近オーダーは $O(\frac{1}{|\boldsymbol{\omega}|})$ であるため，上の格子和の収束は大変遅く，直接的な方法で和を取ることは実用的でない．このため，後に述べるように，フーリエ解析によって格子和の積分・級数表示を導くことにより，効率的に和の値を評価する．

4. 直方体セル同士の遠近判定

本節では，異方周期の場合（$L_2 > L_3$）における，直方体セル同士の遠方・近傍の判定方法について述べる．

立方体セルを用いる通常の多重極法においては，互いに遠方に位置していると判定されたセル同士で M2L 演算を行う．ここで，遠方と判定する条件は，二つのセル同士に最低でも

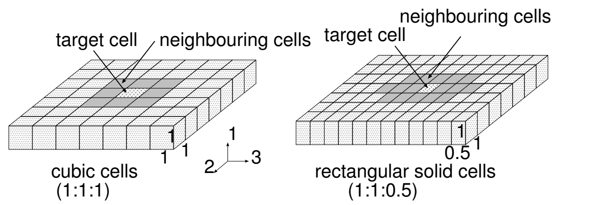

Fig. 3　Interaction Lists (Left: $(L_2 : L_3) = (1:1)$, Right: $(L_2 : L_3) = (1:0.5)$)

1 セル以上挟まっていることとしている．このとき，セルの半対角長を r，セルの中心間距離を R とすると，R/r の最小値は $4/\sqrt{3}$ である．そこで，セルが非立方体の場合においても，ある二つのセルにおいて $R/r < C$ $(C = 4/\sqrt{3})$ が成り立つとき，それらのセルは互いに近傍であると定める．ここに，r は非立方体セルの半対角長である．$(L_2 : L_3) = (1 : 0.5)$ の場合の例を，Fig. 3 に示す．

さらに，次のようにしてパラメータ b_N，c_N を導入する．すなわち，b_N は，中心を $(0,0,b_rL_3)$ とするセルが中心を $(0,0,0)$ とするセルの近傍とならないような，b_r の最小値であるとする．また，c_N は，中心を $(0,\pm L_2, c_rL_3)$ とするセルが中心を $(0,0,0)$ とするセルの近傍とならないような，c_r の最小値であるとする．Fig. 3 に示した $L_3/L_2 = 0.5$ の場合では，$b_N = 4$，$c_N = 3$ である．

5. 格子和の算法

本節では，periodised M2L 公式で用いる漸化式の初期値（式 (8)）に現れる格子和 $\sum_{\boldsymbol{\omega}\in\mathcal{L}'} O^m_n(-\boldsymbol{\omega})$ の算法を述べる．

O^m_n は次の漸化式を満たす．

$$O^m_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{(n+m+1)(n-m+1)}}$$
$$\times\left(\sqrt{(n-m)(n+m)}O^m_{n-1} - \frac{2n+1}{k}\frac{\partial}{\partial x_3}O^m_n\right)$$
$$O^{m+1}_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{(n+m+1)(n+m+2)}}$$
$$\times\left(-\sqrt{(n-m)(n-m-1)}O^{m+1}_{n-1} - \frac{2n+1}{k}2\frac{\partial}{\partial\bar{z}}O^m_n\right)$$

ここに，$2\frac{\partial}{\partial\bar{z}} = \frac{\partial}{\partial x_1} + i\frac{\partial}{\partial x_2}$ である．従って，$\sum_{\boldsymbol{\omega}\in\mathcal{L}'} O^m_n(-\boldsymbol{\omega})$ を評価することは，次の S_{lm} を評価することに帰着される．

$$S_{lm} = \sum_{\boldsymbol{\omega}\in\mathcal{L}'}\left(L_3\frac{\partial}{\partial x_3}\right)^l\left(2L_2\frac{\partial}{\partial\bar{z}}\right)^m O^0_0(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\omega})e^{i\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\omega}}\Big|_{\boldsymbol{x}=0}$$

まず，格子点の集合 $\mathcal{L}'$ を，以下の ${\mathcal{L}'}_i (i = 1,\ldots,4)$ で表される 4 つの集合に分ける（Fig. 4 参照）．

$${\mathcal{L}'}_1 = \{(0,\omega_2,\omega_3)|\ \omega_2 = pL_2,\ \omega_3 = qL_3,\ p,q\in\mathbb{Z},\ a\leq|p|\}$$
$${\mathcal{L}'}_2 = \{(0,\omega_2,\omega_3)|\ \omega_2 = pL_2,\ \omega_3 = qL_3,\ p,q\in\mathbb{Z},$$
$$2\leq|p|\leq a-1\}$$
$${\mathcal{L}'}_3 = \{(0,\omega_2,\omega_3)|\ \omega_2 = 0,\ \omega_3 = qL_3,\ q\in\mathbb{Z},\ b_N\leq|q|\}$$
$${\mathcal{L}'}_4 = \{(0,\omega_2,\omega_3)|\ \omega_2 = \pm L_2,\ \omega_3 = qL_3,\ q\in\mathbb{Z},\ c_N\leq|q|\}$$

ここに，$a>2$ は自然数，b_N，c_N は4節で定義されたパラメータである．上の分割に対応して，S_{lm} も $S_{lm}=S^1_{lm}+S^2_{lm}+S^3_{lm}+S^4_{lm}$ と分ける．S^i_{lm} は次のように定義される．

$$S^i_{lm}=\sum_{\boldsymbol{\omega}\in\mathcal{L}'_i}\left(L_3\frac{\partial}{\partial x_3}\right)^l\left(2L_2\frac{\partial}{\partial\bar{z}}\right)^m O^0_0(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\omega})e^{i\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\omega}}\bigg|_{\boldsymbol{x}=0}$$

等方周期の場合のように [2]，S^i_{lm} をフーリエ積分・級数の形で計算する．以下，結果のみ示す．

$$S^1_{lm}=\frac{i^{l+m-1}}{kL_3}\sum_{j=\infty}^{\infty}\xi_3^l\left(\int_{-\infty}^{\infty}(\xi_1+P)^m\frac{e^{a(i\beta_2-P)}}{P(1-e^{i\beta_2-P})}d\xi_1\right.$$
$$\left.+\int_{-\infty}^{\infty}(\xi_1-P)^m\frac{e^{a(-i\beta_2-P)}}{P(1-e^{-i\beta_2-P})}d\xi_1\right)$$

ここに，$P=\sqrt{\xi_1^2+(\frac{L_2}{L_3}\xi_3)^2-(kL_2)^2}$，$\xi_3=2j\pi+\beta_3$ である．

$$S^2_{ml}=i^{l+m}\frac{\pi}{kL_3}\sum_{2\le l_2\le a-1}\left(e^{i\beta_2 l_2}+(-1)^m e^{-i\beta_2 l_2}\right)\sum_{j=-\infty}^{\infty}\xi_3^l$$
$$\times\left(\sqrt{(kL_2)^2-\left(\frac{L_2}{L_3}\xi_3\right)^2}\right)^m H^{(1)}_m\left(\sqrt{(kL_2)^2-\left(\frac{L_2}{L_3}\xi_3\right)^2}\,l_2\right)$$

ここに， $\xi_3=2j\pi+\beta_3$ である．

$$S^3_{ml}=$$
$$\delta_{m0}\frac{1}{ikL_3}\left(e^{ib\beta_3}\int_0^\infty\frac{\left(\sqrt{r^2-(kL_3)^2}\right)^{l-1}e^{-b\sqrt{r^2-(kL_3)^2}}}{1-e^{i\beta_3-\sqrt{r^2-(kL_3)^2}}}rdr\right.$$
$$\left.+(-1)^l e^{-ib\beta_3}\int_0^\infty\frac{\left(\sqrt{r^2-(kL_3)^2}\right)^{l-1}e^{-b\sqrt{r^2-(kL_3)^2}}}{1-e^{-i\beta_3-\sqrt{r^2-(kL_3)^2}}}rdr\right)$$
$$+\sum_{\boldsymbol{\omega}\in\mathcal{L}'_{3N}}\left(L_2\frac{\partial}{\partial x_3}\right)^l\left(2L_3\frac{\partial}{\partial\bar{z}}\right)^m O^0_0(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\omega})e^{i\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\omega}}\bigg|_{\boldsymbol{x}=0}$$

ここに，$\mathcal{L}'_{3N}=\{(0,\omega_2,\omega_3)|\ \omega_2=0,\ \omega_3=qL_3,\ q\in\mathbb{Z},\ b_N\le|q|\le b-1\}$ であり，$b>b_N$ は自然数である．

$$S^4_{lm}=\left(\frac{L_2}{L_3}\right)^l\frac{i^{m-1}}{kL_3}\left(e^{i\beta_2}+(-1)^m e^{-i\beta_2}\right)$$
$$\times\left(e^{ic\beta_3}\int_0^\infty\frac{\left(\sqrt{r^2-(kL_3)^2}\right)^{l-1}e^{-c\sqrt{r^2-(kL_3)^2}}}{1-e^{i\beta_3-\sqrt{r^2-(kL_3)^2}}}\right.$$
$$\times r^{m+1}J_m\left(\frac{L_2}{L_3}r\right)dr$$
$$+(-1)^l e^{-ic\beta_3}\int_0^\infty\frac{\left(\sqrt{r^2-(kL_3)^2}\right)^{l-1}e^{-c\sqrt{r^2-(kL_3)^2}}}{1-e^{-i\beta_3-\sqrt{r^2-(kL_3)^2}}}$$
$$\left.\times r^{m+1}J_m\left(\frac{L_2}{L_3}r\right)dr\right)$$
$$+\sum_{\boldsymbol{\omega}\in\mathcal{L}'_{4N}}\left(L_3\frac{\partial}{\partial x_3}\right)^l\left(2L_2\frac{\partial}{\partial\bar{z}}\right)^m O^0_0(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\omega})e^{i\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\omega}}\bigg|_{\boldsymbol{x}=0}$$

ここに，$\mathcal{L}'_{4N}=\{(0,\omega_2,\omega_3)|\ \omega_2=\pm L_2,\ \omega_3=qL_3,\ q\in\mathbb{Z},\ c_N\le|q|\le c-1\}$ であり，$c>c_N$ は自然数である．S^1_{lm}，S^3_{lm}，S^4_{lm} における積分は，積分路を被積分関数の指数部に対する最急降下路とした上で，数値的に評価する．被積分関数の収束は，パラメータ a，b，c を大きく取ることによって加速できる．本研究では $a=b=c=100$ と取った．

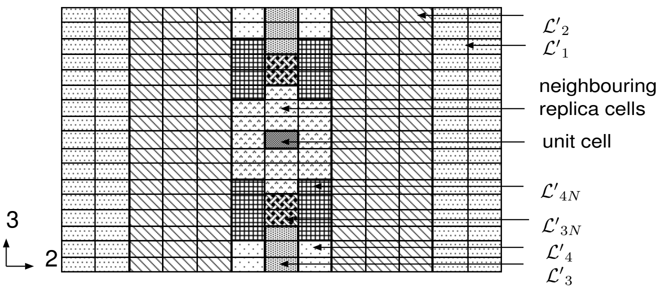

Fig. 4 Grouping of the replica cells.

6. 数値解析例

本節では数値実験により解法の妥当性，効率性を検証する．

6.1. 2次元的に配列された誘電体球列による散乱問題

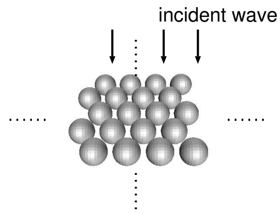

Fig. 5 two dimensional arrays of dielectric spheres

ここでは，Ohtaka ら [6] にならい，Fig. 5 に示されるような2次元球列に，平面波が垂直に入射する問題を扱った．本モデルは，面心立方格子の (111) 面を取り出したものであり，スラブフォトニック結晶の典型的な例である．

各球の中心は，連続する正三角形の頂点に位置している（Fig. 6 参照）ため，$L_2=\sqrt{3}$，$L_3=1$ と取った．また，球の半径を $0.3\sqrt{2}L_3$，比誘電率を 2.56 とした．なお，外部領域は真空である．要素分割は三角形平面要素によって行った．要素数は 18152 であり，全自由度は 54456 である．

数値解の妥当性を検討するため，数値解を Ohtaka らの結果と比較した．$\frac{kd}{2\pi}<1.34$ の波数に対して，エネルギー透過率をプロットしたものが Fig. 7 である．ここに，d は Fig. 6 に示される格子定数である．Fig. 7 において，実線が Ohtaka らによる結果を表し，$\times$ は本手法による結果を表す．両者は，透過率が鋭く変化する $\frac{kd}{2\pi}=1.2$ 近辺においても良く一致しており，本手法による数値結果は妥当なものと推論される．

なお，数値計算は京都大学学術情報メディアセンターの Fujitsu HX600 (AMD64, 2.3GHz) によって行った．計算コードは OpenMP によって並列化されており，16 コアを用いて計算した．級数展開項数 p は，展開精度が 10^{-3} となるように定めた．計算時間は，$\frac{kd}{2\pi}>0.3$ となる波数に対し，5 ∼ 15 分であった．

6.2. $L_3<L_2$ の場合の計算効率の検証

L_3/L_2 が1より小さくなるにつれ，セルの形状が偏平になり立方体からかけ離れた形状となる．すると，次の二つの理由で計算効率が悪化することが懸念される．まず一点目として，L_3/L_2 が小さくなるにつれ，セル対角長のセル体積に対する比が大きくなる点が挙げられる．多重極法の展開打ち切

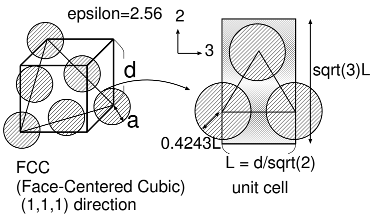

Fig. 6 (111) layer of FCC structure and unit cell for computation

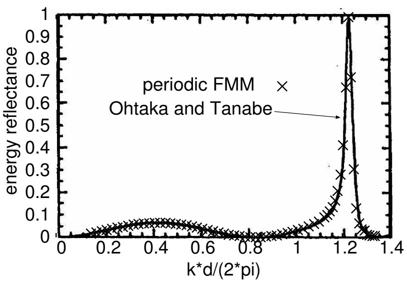

Fig. 7 Energy transmittance

り項数はセルの対角長に依存するため，L_3/L_2 が小さくなると体積あたりの級数展開の効率が悪くなると考えられる．次に二点目として，L_3/L_2 が小さくなると近傍セルの数が増加するので，1 つのセルの M2L interaction list に入る遠方セルの数も多くなってしまう点が挙げられる．そうすると，M2L 演算の回数が増して計算量が増大すると考えられる．そこで，本節では L_3/L_2 を変化させ，計算時間の変化を調べた．

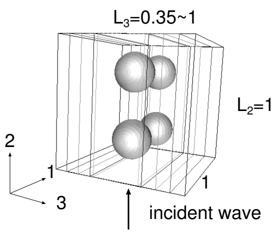

Fig. 8 Unit cells for anisotropic problems

ここでは，Fig. 8 に示す構造をユニットセルとするような誘電体球列モデルを扱い，平面波が垂直に入射する問題を考えた．$L_2 = 1$ と固定し，L_3 を $0.35 \sim 1$ の範囲で変化させた．ユニットセルの頂点の座標は $(\pm L_2/2, \pm L_2/2, \pm L_3/2)$ であり，内部に $(\pm 0.25, \pm 0.25, 0)$ を中心とする $2 \times 2 \times 1$ 個の誘電体球（半径 0.15）を配置した．誘電体球の比誘電率は $\epsilon = 2.25$ であり，外部領域は真空である．入射波数は $k^{\mathrm{inc}} = 30$ と固定した．

メッシュ分割は三角形平面要素によって行い，全要素数は 18000，自由度は 54000 である．級数展開項数 p は，展開精度が 10^{-5} となるように定めた．数値計算は京都大学学術情報メディアセンターの FUJITSU PRIMEPOWER HPC2500 (SPARC64V, 2.08GHz) にて 8CPU を用いて行った．

Fig. 9 に，全計算時間と，全計算時間を線形反復解法の反復回数で割った値 T_1 を示す．多重極法の計算効率を直接的に反映するのは，全計算時間よりも T_1 であると考えられる．

Fig. 9 によると，L_3 が 1 から減少するにつれ T_1 は一旦減少するものの，$L_3 \leq 0.5$ では再び増大している．ユニットセルの体積は L_3 に比例して減少するから，常識的には L_3 が減少するにつれ計算時間は小さくなると考えるのが自然で

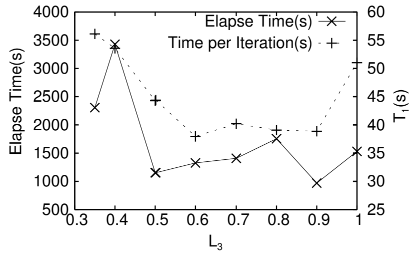

Fig. 9 Elapse time and time per iteration

ある．事実，領域型解法では体積に比例して計算時間は減少する．今回の数値実験において L_3 が小さいときに計算時間が増大したのは，本節の冒頭で述べた計算効率の悪化要因が $L_3 \leq 0.5$ において顕著であったからと考えられる．なお，参考のために $L_3 = 0.5$ の場合に，二つの直方体ユニットセルを結合して一つの立方体ユニットセルとみなし，解析を行ったが（自由度は 2 倍となる），T_1 はおよそ 2.9 倍に増大した．

なお，本解析では格子和をあらかじめ計算して記憶するため，その計算時間を Fig. 9 に含めていない．ただし，各々の L_3 に対する格子和計算に要する時間は最大で十数秒程度であり，全体の計算時間と比較すると無視できる程度である．

7. 結論

本研究では，3 次元 Maxwell 方程式直交異方周期散乱問題における高速多重極境界要素法を開発した．さらに，数値解析により，数値解の妥当性を確かめた．

今後の課題としては，直交 2 軸方向の周期長の比が大きい問題（すなわち L_3/L_2 が小さい問題）について，効率的な解法を開発することが挙げられる．

参考文献

(1) N. Nishimura: Fast multipole accelerated boundary integral equation methods, *Applied Mechanics Reviews*, **55**(2002), pp. 299–324.

(2) Y. Otani and 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**(2008), pp. 4630–4652.

(3) W.C. Chew, J.-M. Jin, E. Michielssen, J. Song (Eds), Fast and Efficient Algorithms in Computational Electromagnetics, (2001), Artech House.

(4) 大谷佳広，西村直志: 2 次元 Helmholtz 方程式における改良された多重極法と前処理について，応用力学論文集，**6**(2003)，pp. 283–292.

(5) N. A. Gumerov and R. Duraiswami: *Fast Multipole Methods for the Helmholtz Equation in Three Dimensions*, Elsevier, (2005), College Park, Maryland.

(6) K. Ohtaka and Y. Tanabe, Photonic bands using vector spherical waves. II. reflectivity, coherence and local field, *Journal of the Physical Society of Japan* **65**(1996), pp. 2276–2284.