

Maxwell 方程式における周期多重極法の Tall Cell 問題への拡張

EXTENSION OF THE PERIODIC FMM IN MAXWELL'S EQUATIONS TO TALL CELL PROBLEMS

大谷佳広¹⁾、西村直志²⁾

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, (現所属: (株)IHI))

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)

The periodic FMM for Maxwell's equations proposed by the present authors has so far been restricted to problems where the non-periodic length (height) of the unit cell is shorter than the longer periodic length. This paper removes this restriction and verifies the new approach in optical problems related to the structural colour of worms.

Key Words: Periodic Boundary Value Problems, Maxwell's Equations, FMM, Tall Cells

1. はじめに

近年、フォトニック結晶や左手系メタマテリアルといった、周期構造を有する新しい材料が注目され、周期構造の波動問題の数値解法の需要が増大している。一方、著者らは、高速多重極法⁽¹⁾で加速した境界積分方程式法⁽²⁾を3次元 Maxwell 方程式の等方2周期問題(散乱体が2次元周期構造を有し直交2方向の周期長が等しい場合)に拡張し(periodic FMM)⁽³⁾、これがフォトニック結晶等の有力な解析ツールになりうることを、数値実験により示した。さらに、periodic FMM を直交異方性周期問題に拡張した⁽⁴⁾。

しかし、これまでの研究では、周期構造の繰り返し単位(unit cell)を多重極法の level 0 の box (従来我々のグループでは多重極法で積分をまとめて評価する単位を cell と呼んでいたが、周期構造の単位である unit cell とは別概念であるので、通例⁽¹⁾に従って box という用語に変更した)としていたため、unit cell の非周期軸方向長さが周期長よりも長い問題を効率よく取り扱うことができなかった。この様な問題を tall cell 問題と呼ぶことにする。本論文では、モデル形状の非周期軸方向長さに関する制限を取り除くことを討する。具体的には、tall cell 問題の周期多重極法で用いる Green 関数及びその高階導関数の格子和を求めるために、格子和の算法⁽⁴⁾を修正する。さらに、数値実験により、本研究で提案する解法の効率性、数値解の妥当性を検討する。

2. 定式化

いま、解析モデルは x_2, x_3 方向に周期的であり、周期長がそれぞれ L_2, L_3 であるとする。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。

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

D は、Fig. 1 のように、 N 個の部分領域に分割され、各々の

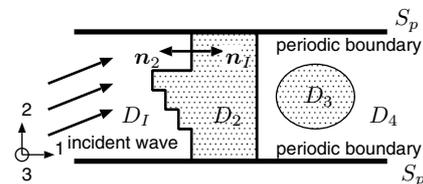


Fig. 1 Periodic boundary value problems

領域 D_d で、次の Maxwell 方程式が満たされるものとする。

$$\nabla \times \mathbf{E} = i\omega\mu^d \mathbf{H}, \quad \nabla \times \mathbf{H} = -i\omega\epsilon^d \mathbf{E} \quad \text{in } D_d$$

ここに、 \mathbf{E}, \mathbf{H} はそれぞれ電場、磁場であり、 ω は周波数、 ϵ^d, μ^d はそれぞれ領域 D_d の誘電率、透磁率であって、波数 k_d は $k_d = \omega\sqrt{\epsilon^d\mu^d}$ となる。また、変数 d は部分領域の番号である。さらに、 \mathbf{E}, \mathbf{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。部分領域の中に無限遠 $x_1 \rightarrow -\infty$ を含むものが一つあり、これを D_I とする。 D_I では、次の入射波を考える。

$$\mathbf{E}^{\text{inc}} = \mathbf{a}^{\text{inc}} e^{ik_I^{\text{inc}} \cdot \mathbf{x}}, \quad \mathbf{H}^{\text{inc}} = \mathbf{b}^{\text{inc}} e^{ik_I^{\text{inc}} \cdot \mathbf{x}}.$$

周期境界 $S_p = \{\mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in \partial D, |x_2| = L_2/2 \text{ or } |x_3| = L_3/2\}$ に

おいては、次の周期境界条件を課す。

$$\mathbf{E}(x_1, L_2/2, x_3) = e^{i\beta_2} \mathbf{E}(x_1, -L_2/2, x_3)$$

$$\mathbf{E}(x_1, x_2, L_3/2) = e^{i\beta_3} \mathbf{E}(x_1, x_2, -L_3/2)$$

$$\mathbf{H}(x_1, L_2/2, x_3) = e^{i\beta_2} \mathbf{H}(x_1, -L_2/2, x_3)$$

$$\mathbf{H}(x_1, x_2, L_3/2) = e^{i\beta_3} \mathbf{H}(x_1, x_2, -L_3/2)$$

ここに、 β_i は場の $x_i = -L_i/2$ と $x_i = L_i/2$ との間の位相差であって、入射波の波数から

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

で与えられ、周期境界条件を要求する各領域 D_d において

$$\pm k_d L_i \neq 2n\pi + \beta_i \quad n \in \mathbb{Z}, \quad i = 2, 3$$

を満たす。さらに、散乱波成分 $(\mathbf{E}^{\text{sca}}, \mathbf{H}^{\text{sca}}) = (\mathbf{E} - \mathbf{E}^{\text{inc}}, \mathbf{H} - \mathbf{H}^{\text{inc}})$ は、 $x_1 \rightarrow \pm\infty$ において放射条件を満たすものとする。

3. 境界積分方程式

部分領域同士の境界面における \mathbf{E} 、 \mathbf{H} の接線成分の連続性を用いると、 \mathbf{E} 、 \mathbf{H} それぞれについて、次のような境界積分方程式が得られる⁽³⁾。

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

ここに、 $\mathbf{j} = \mathbf{n}^d \times \mathbf{H}$ 、 $\mathbf{m} = \mathbf{E} \times \mathbf{n}^d$ であり、 δ_{dI} は Kronecker の delta、 \mathbf{n}^d は領域 D_d の外向き法線ベクトル、 \mathbf{t}^d は試験 (接) ベクトルである。さらに、 G_d^{P} は領域 D_d における、3次元 Helmholtz 方程式の周期 Green 関数であり、 $\Delta G_d^{\text{P}} + k_d^2 G_d^{\text{P}} = -\delta(x)$ 及び周期境界条件を満たす。 G_d^{P} は次の格子和表現を有する。

$$G_d^{\text{P}}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \sum_{\omega \in \mathcal{L}} \frac{e^{ik_d|\mathbf{x}-\mathbf{y}-\omega|}}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{y}-\omega|} e^{ik^{\text{inc}} \cdot \omega} \quad (1)$$

$$\mathcal{L} = \{(0, \omega_2, \omega_3) \mid \omega_2 = pL_2, \omega_3 = qL_3, p, q \in \mathbb{Z}\}$$

ここに、 ω は格子ベクトルである。

4. periodic FMM の tall cell 問題への拡張

以下では、周期境界条件を要求する部分領域 D_a に着目する。いま、 D_a の境界は、辺が x_1 、 x_2 、 x_3 軸に平行で、各方向の辺長が L_1 、 L_2 、 L_3 であるような直方体に含まれる

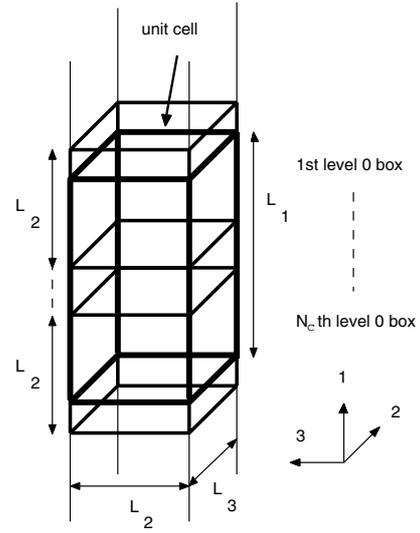


Fig. 2 Unit cell and level 0 boxes

と仮定する。この直方体を unit cell と呼ぶ。従来の periodic FMM⁽⁴⁾ の研究では、簡単のために、扱う問題を $L_1 \leq L_2$ の場合限定していた。このため、 $L_1 > L_2$ の場合には仮想境界を用いて領域を分割する必要があり、計算効率の上で改善の余地があった。そこで、本節では、 $L_1 > L_2$ の場合 (tall cell) にも対応できるように、periodic FMM を拡張する。

まず、unit cell を、Fig. 2 に示すように、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で覆い、これらを FMM の木構造の level 0 box とする。このようにすると、level 0 box の数は $\lfloor L_1/L_2 \rfloor + 1$ 個であり、一般に 1 個ではないことに注意する。以下各 box の辺長を $1/2$ とすることにより、box の木構造を作る。

さらに、 G^{P} の格子和表現式 (1) より、周期境界値問題を unit cell のレプリカが 3次元空間に無限に繰り返し配置されている問題とみなすことが出来る。(Fig. 3)

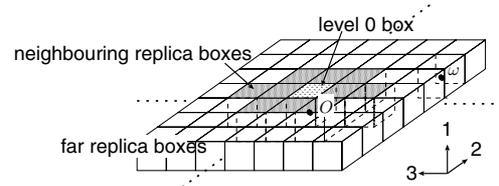


Fig. 3 Replica boxes

いま、Fig. 2 に示すように、level 0 box を、 x_1 座標が大きい方から順に、1 番目の level 0 box、2 番目の level 0 box ... N_c 番目の level 0 box と名づける。ここに N_c は level 0 box の総数である。考える周期問題に現れる多重極法の box はこれらの level 0 box とそのレプリカ、およびそれらの子孫である。これらの box に遠近の定義を行い、interaction list⁽¹⁾⁽²⁾ が無限個の box を含んでいるときの M2L 公式⁽²⁾ を導けば周期多重極法を定式化することが出来る。

まず、box の遠近の定義は前報⁽⁴⁾ に倣う。すなわち、同

レベルの2つの box の辺長を $\hat{L}_2, \hat{L}_2, \hat{L}_3$ 、中心間距離を $s\hat{L}_2, p\hat{L}_2, q\hat{L}_3$ ($s, p, q \in \mathbb{Z}$) するとき、

$$\sqrt{(s\hat{L}_2)^2 + (p\hat{L}_2)^2 + (q\hat{L}_3)^2} \geq C \frac{\sqrt{2(\hat{L}_2)^2 + (\hat{L}_3)^2}}{2}$$

が満たされるならば、これらの box は互いに遠方にあるとする。ここに C はパラメータであり、立方体 box の場合との整合性より $C = \frac{4}{\sqrt{3}}$ と取る⁽⁴⁾。そうすると、 i 番目の level 0 box の場合、遠方 box の集合 C^F は中心が \mathcal{L}' に属するもの、近傍の box の集合 C^N は中心が \mathcal{L}'' に属するものとなる。ここに、原点を i 番目の level 0 box の原点にシフトすると、

$$\mathcal{L}' = \mathcal{L}'(i - N_c) \cup \mathcal{L}'(i - N_c + 1) \cup \dots \cup \mathcal{L}'(i - 1) \quad (2)$$

$$\mathcal{L}'(s) = \{(\omega_1, \omega_2, \omega_3) \mid \omega_1 = sL_2, \omega_2 = pL_2, \omega_3 = qL_3, p, q \in \mathbb{Z},$$

$$\sqrt{(sL_2)^2 + (pL_2)^2 + (qL_3)^2} \geq C \frac{\sqrt{2(L_2)^2 + (L_3)^2}}{2}\} \quad (3)$$

$$\mathcal{L}'' = \mathcal{L}^{all} \setminus \mathcal{L}',$$

$$\mathcal{L}^{all} = \{(\omega_1, \omega_2, \omega_3) \mid \omega_1 = sL_2, \omega_2 = pL_2, \omega_3 = qL_3, p, q \in \mathbb{Z},$$

$$i - N_c \leq s \leq i - 1\}$$

である。この定義に応じて、 G^P も $G^P = G^{PF} + G^{PN}$ と分解する。ここに、 G^{PF}, G^{PN} は次式で定義される。

$$G_{ij}^{PF}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \sum_{s=i-N_c}^{i-1} \sum_{\omega \in \mathcal{L}'(s)} G_{ij}(\mathbf{x} - \mathbf{y} - \omega) e^{i\beta \cdot \omega}$$

$$G_{ij}^{PN}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \sum_{\omega \in \mathcal{L}''} G_{ij}(\mathbf{x} - \mathbf{y} - \omega) e^{i\beta \cdot \omega}$$

以上の遠近の定義に基づいて周期多重極法を定式化する場合、局所展開の係数が無限個の box の影響を含むのは level 0 においてのみである。以下ではこの際に現れる周期 F2H、M2L 公式を導く。

いま、 G^{PF} を次のように平面波展開する。

$$G^{PF} = -\frac{ik}{(4\pi)^2} \int_{|\hat{\mathbf{k}}|=1} e^{ik\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x}} \sum_{s=i-N_c}^{i-1} \Xi_s(\hat{\mathbf{k}}) e^{-ik\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{y}} dS_{\hat{\mathbf{k}}}$$

$$\Xi_s(\hat{\mathbf{k}}) = \sum_n \sum_m i^n (2n+1) \bar{Y}_n^m(\hat{\mathbf{k}}) \left(\sum_{\omega \in \mathcal{L}'(s)} O_n^m(-\omega) e^{i\beta \cdot \omega} \right)$$

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

上式において、 Ξ_s が無限個のレプリカ box からの影響を i 番目の level 0 box に伝達する関数であり、これを用いると level 0 における周期 F2H 公式、周期 M2L 公式を導くことができる。 Ξ_s には O_n^m の格子和が現れるが、 $|O_n^m(-\omega)| \sim O(\frac{1}{|\omega|})$ であり、和の収束は遅い。このため、Fourier 解析を用いて和の計算を加速する。 $\sum_{\omega \in \mathcal{L}'(s)}$ の計算には、 $s=0$ の和(面内和)と $s \neq 0$ の和(面外和)があるが、面内和は前報⁽⁴⁾で求めた。面外和の算法は後述する。

さて、 G^{PF} の平面波展開を用いると、周期 F2H 公式⁽⁴⁾は以下のように導かれる。

$$\tilde{H}_j(\hat{\mathbf{k}}, O_i) = \sum_{s=i-N_c}^{i-1} \Xi_s(\hat{\mathbf{k}}) \tilde{F}_j(\hat{\mathbf{k}}, O_{i-s}), \quad (4)$$

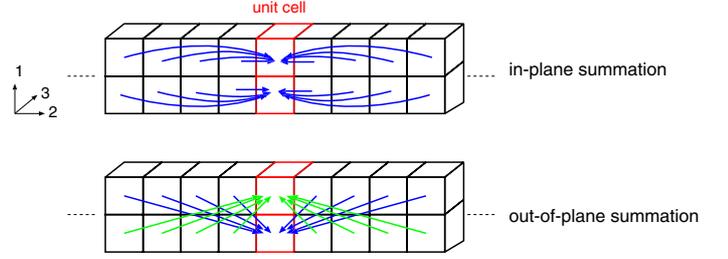


Fig. 4 In-plane and out-of-plane lattice sums

ここに、 $\tilde{F}_j(\hat{\mathbf{k}}, O_i)$ は、 i 番目の level 0 box の diagonal form の多重極モーメントであり、 $\tilde{H}_j(\hat{\mathbf{k}}, O_i)$ は、 i 番目の level 0 box の diagonal form の局所展開係数である。また、周期 M2L 公式は以下のように導かれる。

$$L_{j,n,m}(O_i) = \sum_{s=i-N_c}^{i-1} \sum_{n'=0}^{\infty} \sum_{m'=-n'}^{n'} (2n'+1) \hat{T}_{n',n}^{m',m}(s) M_{j,n',m'}(O_{i-s})$$

ここに、 $L_{j,n,m}(O_i)$ は i 番目の level 0 box の局所展開係数であり、 $M_{j,n,m}(O_i)$ は i 番目の level 0 box の多重極モーメントである。 $\hat{T}_{n',n}^{m',m}(s)$ は、

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

を初期値とした漸化式によって求めることができる。そのアルゴリズムは、Otani and Nishimura⁽⁴⁾ に述べられている $\hat{T}_{n,n'}^{m,m'}$ を

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

を初期値として求めるアルゴリズムと同じである。

なお、通常の方法ではセルを立方体にとることが多いが、異方周期の場合、すなわち $L_2 > L_3$ の場合にはすべてのセルが直方体になる。その際、既に述べた遠方・近傍セルの定義に加えて、級数展開項数の決定にも修正が必要である。詳細については、Otani and Nishimura⁽⁴⁾ を参照されたい。

5. 格子和

既に述べたように、周期 M2L 公式には、格子和 $\sum_{\omega \in \mathcal{L}'} O_n^m(-\omega)$ が含まれる。このうち、面内格子和 $\sum_{\omega \in \mathcal{L}'(0)} O_n^m(-\omega)$ の算法は既に Otani and Nishimura⁽⁴⁾ に示されているため、ここでは、面外格子和 $\sum_{\omega \in \mathcal{L}'(s)} O_n^m(-\omega)$ ($s \neq 0$) の算法について述べる (Fig4 参照)

まず、 O_n^m は次の漸化式を満たす事に注意する。

$$O_{n+1}^m = \frac{1}{\sqrt{(n+m+1)(n-m+1)}} \times \left(\sqrt{(n-m)(n+m)} O_{n-1}^m - \frac{2n+1}{k} \frac{\partial}{\partial x_3} O_n^m \right),$$

$$O_{n+1}^{m+1} = \frac{1}{\sqrt{(n+m+1)(n+m+2)}} \times \left(-\sqrt{(n-m)(n-m-1)} O_{n-1}^{m+1} - \frac{2n+1}{k} 2 \frac{\partial}{\partial \bar{z}} O_n^m \right),$$

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、格子和 $\sum_{\omega \in \mathcal{L}'(s)} O_n^m(-\omega)$ を求めることは、次で定義される $S_{lm}(s)$ を求めることに帰着される。

$$S_{lm}(s) = \sum_{\omega \in \mathcal{L}(s)} \left(L_3 \frac{\partial}{\partial x_3} \right)^l \left(2L_2 \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \right)^m O_0^0(x - \omega) e^{i\beta \cdot \omega} \Big|_{x=0}$$

いま、原点から x_1 軸方向に s 段ずれた面外格子点の集合を $\mathcal{L}(s)$ と定義する。すなわち、

$$\mathcal{L}(s) = \{(\omega_1, \omega_2, \omega_3) \mid \omega_1 = sL_2, \omega_2 = pL_2, \omega_3 = qL_3, p, q \in \mathbb{Z}\}$$

である。このとき、 $\mathcal{L}(s)$ ($|s| \geq 2$) は式 (3) の遠方条件を自動的に満足するので、 $\mathcal{L}'(s) = \mathcal{L}(s)$ ($|s| \geq 2$) である。このことに注意し、 $|s| = 1$ の場合と、 $|s| \geq 2$ の場合に分けて $S_{lm}(s)$ の算法を構成する。

まず、 $S_{lm}(s)$ ($|s| = 1$) の算法について述べる。いま、 $\mathcal{L}'(s)$ を、以下に定義される 4 つの部分集合 $\mathcal{L}'_i(s)$ ($i = 1, \dots, 4$) に分ける (Fig. 5 参照)。

$$\mathcal{L}'_1(s) = \{(\omega_1, \omega_2, \omega_3) \mid \omega_1 = sL_2, \omega_2 = pL_2, \omega_3 = qL_3,$$

$$p, q \in \mathbb{Z}, \hat{a} \leq |p|\},$$

$$\mathcal{L}'_2(s) = \{(\omega_1, \omega_2, \omega_3) \mid \omega_1 = sL_2, \omega_2 = pL_2, \omega_3 = qL_3,$$

$$p, q \in \mathbb{Z}, 2 \leq |p| \leq \hat{a} - 1\},$$

$$\mathcal{L}'_3(s) = \{(\omega_1, \omega_2, \omega_3) \mid \omega_1 = sL_2, \omega_2 = 0, \omega_3 = qL_3,$$

$$q \in \mathbb{Z}, \hat{b}_N(s) \leq |q|\},$$

$$\mathcal{L}'_4(s) = \{(\omega_1, \omega_2, \omega_3) \mid \omega_1 = sL_2, \omega_2 = \pm L_2, \omega_3 = qL_3,$$

$$q \in \mathbb{Z}, \hat{c}_N(s) \leq |q|\},$$

ここに、 $\hat{a} > 2$ は自然数である。また、 $\hat{b}_N(s)$ 、 $\hat{c}_N(s)$ は、各々、原点中心の box から見て $\mathcal{L}'_{3,4}(s)$ が遠方になるように選んだパラメータで、例えば Fig. 5 の場合、 $\hat{b}_N(1) = 4$ 、 $\hat{c}_N(1) = 3$ である。さらに、格子点の分類に対応して、格子和 $S_{lm}(s)$ を次のように分ける。

$$S_{lm}(s) = S_{lm}^1(s) + S_{lm}^2(s) + S_{lm}^3(s) + S_{lm}^4(s)$$

ここに、 $S_{lm}^i(s)$ は次のように定義される。

$$S_{lm}^i(s) = \sum_{\omega \in \mathcal{L}'_i(s)} \left(L_3 \frac{\partial}{\partial x_3} \right)^l \left(2L_2 \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \right)^m O_0^0(x - \omega) e^{i\beta \cdot \omega} \Big|_{x=0}.$$

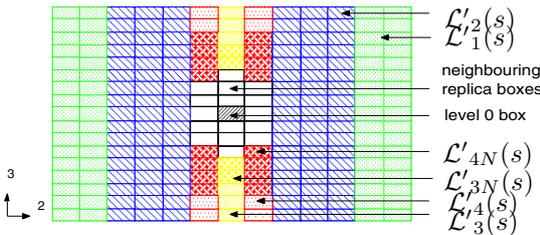


Fig. 5 Grouping of the replica boxes ($|s| = 1$).

面内格子和の場合⁽⁴⁾と同様に、 $S_{lm}^i(s)$ を、Fourier 積分と Poisson の和公式を用いて次のように評価する。

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

ここに、 $P = \sqrt{\xi_1^2 + \left(\frac{L_2}{L_3}\xi_3\right)^2 - (kL_2)^2}$ 、 $\xi_3 = 2j\pi + \beta_3$ 。

$$S_{lm}^2(s) = i^l (-1)^m \frac{\pi}{kL_3} \sum_{2 \leq l_2 \leq \hat{a}-1} \left(e^{i\beta_2 l_2 + im\phi} + e^{-i\beta_2 l_2 - im\phi} \right) \\ \sum_{j=-\infty}^{\infty} \xi_3^j \left(\sqrt{(kL_2)^2 - \left(\frac{L_2}{L_3}\xi_3\right)^2} \right)^m \\ H_m^{(1)} \left(\sqrt{(kL_2)^2 - \left(\frac{L_2}{L_3}\xi_3\right)^2} \sqrt{l_2^2 + s^2} \right),$$

ここに、 $\xi_3 = 2j\pi + \beta_3$ 、 $\phi = \arg(-\omega_1 - iL_2 l_2)$ 。

$$S_{lm}^3(s) = \frac{\text{sgn } s}{ikL_3} \left(\frac{L_2}{L_3} \right)^m \\ \int_0^{\infty} \left(\sqrt{r^2 - (kL_3)^2} \right)^{l-1} e^{-\hat{b}\sqrt{r^2 - (kL_3)^2}} r^{m+1} J_m \left(\frac{r|\omega_1|}{L_3} \right) \\ \left(\frac{e^{i\hat{b}\beta_3}}{1 - e^{i\beta_3 - \sqrt{r^2 - (kL_3)^2}}} + (-1)^l \frac{e^{-i\hat{b}\beta_3}}{1 - e^{-i\beta_3 - \sqrt{r^2 - (kL_3)^2}}} \right) dr \\ + \sum_{\omega \in \mathcal{L}'_{3N}(s)} \left(L_3 \frac{\partial}{\partial x_3} \right)^l \left(2L_2 \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \right)^m O_0^0(x - \omega) e^{i\beta \cdot \omega} \Big|_{x=0},$$

ここに、 $\omega_1 = sL_2$ であり、 $\mathcal{L}'_{3N}(s)$ は

$$\mathcal{L}'_{3N}(s) = \{(\omega_1, \omega_2, \omega_3) \mid \omega_1 = sL_2, \omega_2 = 0, \omega_3 = qL_3,$$

$$q \in \mathbb{Z}, \hat{b}_N(s) \leq |q| \leq \hat{b} - 1\}$$

と定義される集合、 $\hat{b} > \hat{b}_N(s)$ は自然数である。

$$S_{lm}^4(s) = \left(\frac{L_2}{L_3} \right)^m \frac{(-1)^m}{ikL_3} \left(e^{i\beta_2 + im\phi} + e^{-i\beta_2 - im\phi} \right) \\ \int_0^{\infty} \left(\sqrt{r^2 - (kL_3)^2} \right)^{l-1} e^{-\hat{c}\sqrt{r^2 - (kL_3)^2}} r^{m+1} \hat{J}_m \\ \left(\frac{e^{i\hat{c}\beta_3}}{1 - e^{i\beta_3 - \sqrt{r^2 - (kL_3)^2}}} + (-1)^l \frac{e^{-i\hat{c}\beta_3}}{1 - e^{-i\beta_3 - \sqrt{r^2 - (kL_3)^2}}} \right) dr \\ + \sum_{\omega \in \mathcal{L}'_{4N}(s)} \left(L_3 \frac{\partial}{\partial x_3} \right)^l \left(2L_2 \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \right)^m O_0^0(x - \omega) e^{i\beta \cdot \omega} \Big|_{x=0},$$

ここに、 $\omega_1 = sL_2$ 、 $\hat{J}_m = J_m \left(r\sqrt{(L_2/L_3)^2 + (\omega_1/L_3)^2} \right)$ である。また、

$$\mathcal{L}'_{4N}(s) = \{(\omega_1, \omega_2, \omega_3) \mid \omega_1 = \pm L_2, \omega_2 = \pm L_2, \omega_3 = qL_3,$$

$$q \in \mathbb{Z}, \hat{c}_N(s) \leq |q| \leq \hat{c} - 1\},$$

であり、 $\hat{c} > \hat{c}_N(s)$ は自然数である。 $S_{lm}^1(s)$ 、 $S_{lm}^3(s)$ 、 $S_{lm}^4(s)$ に表れる積分は、 $s = 0$ の場合の指数部の原点からの最急降下路において数値的に評価した。積分路上で被積分関数は振動しながら指数的に減衰するが、パラメータ \hat{a} 、 \hat{b} 、 \hat{c} を大きくとると減衰を早めることができ、振動に伴う精度悪化を避けることができる。本研究では、 $\hat{a} = \hat{b} = \hat{c} = 100$ と取った。

$S_{lm}(s)$ ($|s| \geq 2$) については、次式を用いて計算する。

$$S_{lm}(s) = \frac{2\pi}{ikL_3} \sum_{n_2=-\infty}^{\infty} \sum_{n_3=-\infty}^{\infty} (i(\beta_3 + 2\pi n_3))^l \cdot \frac{(\text{sgn } s \sqrt{(2\pi n_2 + \beta_2)^2 + (L_2/L_3)^2(2\pi n_3 + \beta_3)^2 - k^2 L_2^2} - (2\pi n_2 + \beta_2))^m}{e^{-|s| \sqrt{(2\pi n_2 + \beta_2)^2 + (L_2/L_3)^2(2\pi n_3 + \beta_3)^2 - k^2 L_2^2}} \sqrt{(2\pi n_2 + \beta_2)^2 + (L_2/L_3)^2(2\pi n_3 + \beta_3)^2 - k^2 L_2^2}}$$

上の関数は $|n_2| \rightarrow \infty$ 、 $|n_3| \rightarrow \infty$ のとき指数的に減衰する。従って、無限和を適切に打ち切って数値的に評価出来る。

6. 数値計算例

ミミズの表皮構造における光学現象を、3次元 Maxwell 方程式 2重周期問題としてモデル化し、その反射特性を解析した。本研究では、宮本・小作⁽⁵⁾⁽⁶⁾に倣い、ミミズの表皮構造を円筒形ガラスファイバーによる周期構造としてモデル化した (Fig. 6)。構造寸法の詳細を Fig. 7 に示す。水

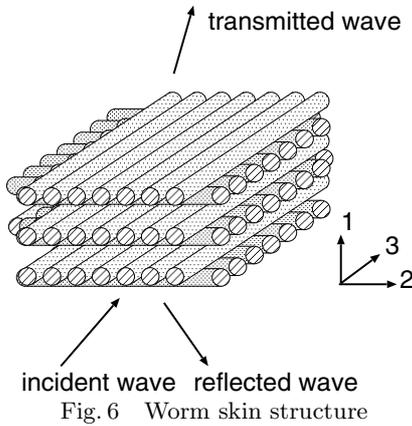


Fig. 6 Worm skin structure

中にガラスファイバーが6層積層しており、ファイバーの直径は165nm、ファイバーの x_1 方向間隔は185nm、周期長は $L_2 = L_3 = 225\text{nm}$ である。このような構造に平面波が入射する問題を考える。偏光の向きは Fig. 7 に示した。水、及びガラスファイバーの比誘電率は各々1.7689、2.4964とした。

本モデルでは、水領域での unit cell の x_1 辺長が $L_1 = 1050\text{nm}$ であり、本手法における level 0 box の数は5となる。

6.1. 従来手法との比較

本節では、 $L_1 > L_2$ の場合を扱うことのできない従来手法 (従来法) と本手法との性能比較を行う。

最初に、メッシュ分割について説明する。解析メッシュ形状は平面三角形であり、従来法、本手法とも、要素辺長がおよそ6.26nmとなるように作成した。従来法の場合、 x_1 軸方向に185nm間隔で、 $x_2 - x_3$ 平面と平行な仮想境界面を挿入することにより水領域を6領域に分割し、各々の領域で $L_1 < L_2$ が成り立つようにした (Fig. 8)。用いたメッシュの概要を Table 1 に示す。仮想境界を用いる従来法のメッシュ分割に比べ、仮想境界を必要としない本手法のメッシュ分割では、要素数、自由度とも約27%削減できることが分かる。なお、用いた基底関数は Rao-Wilton-Glisson 基底⁽⁷⁾である。

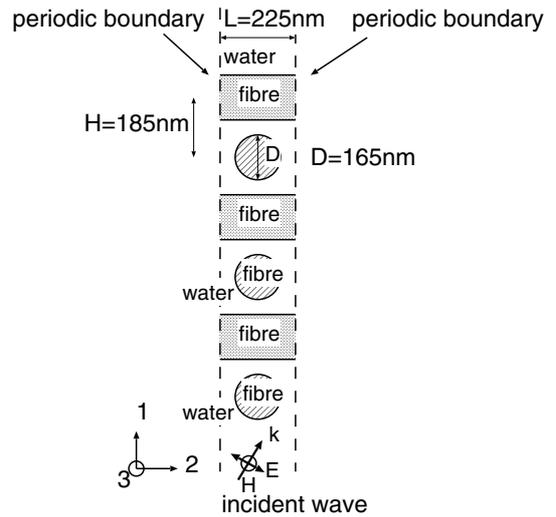


Fig. 7 Worm skin structure (cross section)

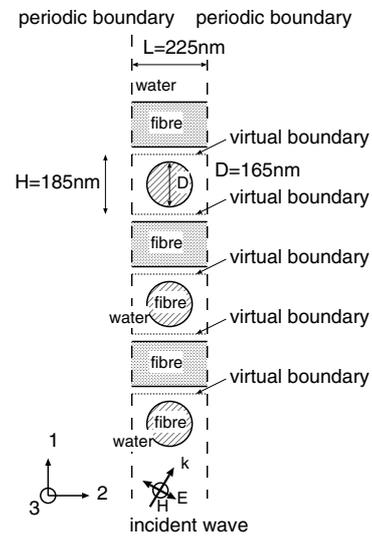


Fig. 8 Worm skin structure (cross section, with virtual boundary)

また、線形反復解法は Flexible GMRES を使い、相対誤差が 10^{-3} を下回ったとき反復計算を打ち切った。前処理行列は多重極法の直接計算部分に相当する行列とし、前処理行列の逆を作用させる操作は、GMRES を用いた反復計算によって近似的に行った。前処理用 GMRES の反復は、相対誤差が 10^{-1} を下回るか、反復が10回に達したときに打ち切った。

従来法、本手法における計算時間、反復回数を Table 2 に示す。本モデルでは、反復1回あたりの計算時間は従来法、本手法とも同程度であったが、反復回数が約16%減少し、計算時間も約13%減少している。このことから、仮想境界を取り除くことによって問題の性質が改善したことが分かる。

なお、反復1回あたりの計算時間が短縮しなかった原因は、前処理用 GMRES の反復計算に要する時間が増大したことによる。線形反復解法 FGMRES の第1回目の反復に要した計算時間の内訳を Table 3 に示すが、多重極法本体の計算時

Table 1 Mesh

| 手法 | 要素数(比率) | 自由度(比率) |
|-----------------|--------------|---------------|
| 従来法 (仮想境界あり) | 48816 (1) | 146448 (1) |
| 本手法 (仮想境界なし) | 35856 (0.73) | 107568 (0.73) |

Table 2 Number of iterations, CPU time

| 手法 | 反復回数(比率) | 計算時間(s)(比率) |
|-----|------------|-------------|
| 従来法 | 269 (1) | 4660 (1) |
| 本手法 | 226 (0.84) | 4054 (0.87) |

間が約 21%減少したのに対し、前処理反復に要する計算時間が約 22%増大している。前処理反復に要する時間は、多重極法の直接計算量にほぼ比例し、モデル形状と多重極法の box 分割に大きく依存する。今後、box 分割方法や前処理方法について、さらに検討を進める必要がある。

6.2. 入射角の変化に対するエネルギー透過率の挙動について

本節では、入射波長を 475nm に固定して、2 軸方向についての入射角を変化させ、エネルギー透過率を求めた。数値計算結果を Fig. 9 に示す。エネルギー透過率が入射角 30 度付近において小さくなっていることから、この入射角帯においてミミズ表皮の反射光に波長 475nm の成分が多く含まれることが推測される。小作・宮本⁽⁶⁾は、実験および多層膜模型を用いた簡便な計算によって、入射角 30 度において反射光の中心波長が 462nm となることを指摘しており、今回の数値計算結果もそれに矛盾しない。

なお、エネルギー透過率と反射率の和である全エネルギーもあわせて Fig. 9 に示す。入射角 31.7 度付近を除いてエネルギー保存則は満たされていることが分かる。入射角 31.7 度付近でエネルギー保存則の精度が低下した原因としては、Wood の anomaly が考えられる⁽⁸⁾。

7. 結言

本論文では、これまで提案してきた Maxwell 方程式の周期多重極法における unit cell の高さに関する制限を取り除き、その適用性を構造色の問題において検討した。その結果、計算効率に関する若干の改善の余地は残したものの、トータルの計算時間では従来法より短縮出来ることを示した。今後の課題としては、より大規模な問題に適用したときの格子和の評価法や Wood の anomaly への対応が挙げられる。

Table 3 Details of the CPU time for the first FGMRES iteration. (): ratio

| 手法 | 多重極法 本体 (s) | 前処理 反復 (s) | 合計 (s) |
|-----|----------------|---------------|--------------|
| 従来法 | 7.23 (1) | 9.12 (1) | 16.34 (1) |
| 本手法 | 5.74 (0.79) | 11.10 (1.22) | 16.84 (1.03) |

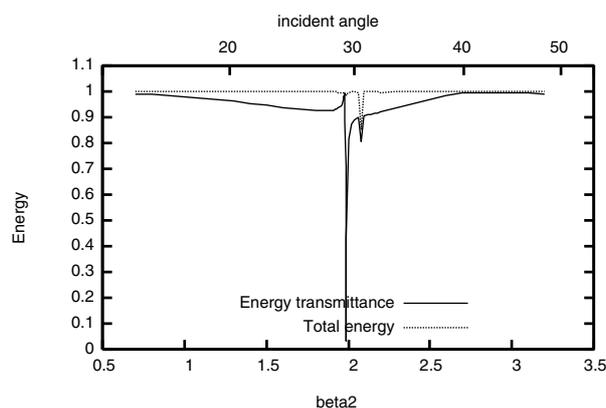


Fig. 9 Energy transmittance and total energy

最後に、ミミズの表皮問題をご紹介いただいた千葉大学総合メディアセンターの植田毅准教授に謝意を表す。

参考文献

- (1) L. Greengard, V. Rokhlin: A Fast Algorithm for Particle Simulations: *Journal of Computational Physics*, Vol.73, pp.325-348, 1987.
- (2) N. Nishimura: Fast Multipole Accelerated Boundary Integral Equation Methods, *Applied Mechanics Reviews*, Vol.55, pp.299-324, 2002.
- (3) 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*, Vol.227, pp.4630-4652, 2008.
- (4) Y. Otani, N. Nishimura: An FMM for orthotropic periodic boundary value problems for Maxwell's equations, *Waves in Random and Complex Media*, DOI:10.1080/17455030802616863, 2009.
- (5) 宮本潔、小作明則：ミミズ、ゴカイ（環形動物）を彩る表皮繊維構造、*形の科学会誌*, Vol.20, pp.167-168, 2005.
- (6) 小作明則、宮本潔：環形動物表皮に観察される構造色、*形の科学会誌*, Vol.17, pp.121-122, 2002.
- (7) S. M. Rao, D. R. Wilton, A. W. Glisson: Electromagnetic scattering by surfaces of arbitrary shape, *IEEE transactions on antenna and propagation*, Vol.30, pp.409-418, 1982
- (8) 大谷佳広、西村直志：Wood の異常回折周辺における周期高速多重極法の挙動について、*計算数理工学論文集*, Vol. 7, pp.303-308, 2008.