

周期構造を有する散乱体による散乱問題の一解析

東北大学 工学部 ○ 学生員 山田 将紀
東北大学 工学研究科 正 員 北原 道弘

1. はじめに

散乱体が平面アレー的に周期分布した場合、ユニットセルに対する基本解は二重級数和の型となり、通常の基本解をもとに積分方程式を定式化すると、基本解の収束性が問題となる。本論文では、三次元ヘルムホルツ方程式で支配される波動問題に対して、通常の基本解を指数関数的に距離減衰する関数の積分として表現することにより、二重級数和の収束性を高速化し、高速化基本解を利用した積分方程式の収束性について数値解析的に検討し、二重周期構造系に対する有用性を示す。

周期構造系による散乱問題に対する基本解はEwald¹⁾により提示されている。本論文では、Ewaldの方法の出発点となった基本解の無限積分表現を直接利用することで、より簡単な基本解の表現によって、数値解析的に十分な収束性と精度が得られることを数値例で示す。

2. 周期構造系における散乱問題

解析対象とする二重無限周期構造系を図-1に示す。ここでは、半径 a の球が x_1-x_2 平面上に中心を有し、 x_1 軸に沿う各球の中心間距離が b 、 x_2 軸に沿う中心間距離が c で周期的に存在している場合を考えている。

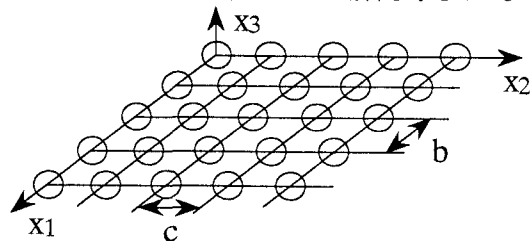


図-1 二重周期構造散乱体の配置

本論文では、この構造系に対し、スカラー場に関する三次元波動問題を考える。このとき、波動場 u は k を波数として次のヘルムホルツ方程式を満足する。

$$\Delta u + k^2 u = 0 \quad (1)$$

各球面上の境界条件として、ディリクレ条件 ($u = 0$) あるいはノイマン条件 ($\partial u / \partial n = 0$) が与えられているものとする。また、入射波として x_3 軸方向に伝播する平面波を考える。

3. 高速収束型基本解の導入

3.1 高速収束型基本解の表現

散乱体一個の三次元ヘルムホルツ方程式に対する散乱体表面 S 上の積分方程式は次のようになる。

$$\begin{aligned} c(\mathbf{x})u(\mathbf{x}) &= \int_S U(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \frac{\partial u(\mathbf{y})}{\partial n_y} dS_y \\ &\quad - \int_S \frac{\partial U(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial n_y} u(\mathbf{y}) dS_y + u^I(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (2)$$

上式において、 $U(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ は次のような基本解である。

$$U(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{e^{ikr}}{4\pi r}, \quad r = |\mathbf{x} - \mathbf{y}| \quad (3)$$

この基本解 $U(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ は二点間の距離に関する基本因子 $1/r$ のため、二重無限周期構造に拡張し無限和を取る際に、収束性が問題になることが予想される。このため、二重無限和に適した基本解の表現に変換する。いま、次の恒等式^{1),2)}に着目する。

$$\frac{1}{r} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty e^{-r^2 \rho^2} d\rho \quad (4)$$

このとき、式(3)に示した基本解 $U(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ は、式(4)より次のように書ける。

$$U(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{2\pi\sqrt{\pi}} \int_0^\infty e^{ikr} e^{-r^2 \rho^2} d\rho \quad (5)$$

3.2 境界要素上の積分

未知量を要素内一定と近似する場合を考える。このとき、ある一つの表面要素を S_e とすると、 S_e 上の基本解(5)の積分は次のようになる。

$$\begin{aligned} \int_{S_e} U(\mathbf{x}, \mathbf{y}) dS_y \\ = \frac{1}{2\pi\sqrt{\pi}} \int_0^\infty d\rho \int_{S_e} e^{ikr} e^{-r^2 \rho^2} dS_y \end{aligned} \quad (6)$$

これを二重周期構造系の各要素上の積分の場合に拡張する。入射波は二重周期構造系に直交する方向 (x_3 軸方向) に進行しているので二重周期構造系に対する積分方程式の各要素上の積分は、散乱体一個の要素上の積分に直接格子和を考慮すればよいことになり結果は次のようになる。

$$\begin{aligned} \int_{S_e} \sum_l U(\mathbf{x}, \mathbf{y} + \mathbf{l}) dS_y \\ = \frac{1}{2\pi\sqrt{\pi}} \int_0^\infty d\rho \int_{S_e} \sum_l e^{ikr} e^{-r^2 \rho^2} dS_y \end{aligned} \quad (7)$$

ここで $r = |\mathbf{x} - \mathbf{y} - \mathbf{l}|$ である。

恒等式(4)を用いたことにより、式(7)における格子和は次のように変換されていることに注意する。

$$\sum_l f e^{-r^2 \rho^2} \quad (8)$$

式(8)の表現の和は急速に収束する。

4. 無限積分型基本解に関する数値的検討

4.1 被積分関数の性質

式(4)に示した基本解中の基本量 $1/r$ の積分表現を次のように近似する。

$$\frac{1}{r} \approx \int_0^b \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-r^2 \rho^2} d\rho = \int_{-1}^1 f_1\{\rho(\xi)\} \frac{b}{2} d\xi \quad (9)$$

この被積分関数 $F1 = f_1\{\rho(\xi)\} b/2$ を図-2に示す。 $1/r$ の積分表現における積分区間 $[0, b]$ は、変数変換 $\rho = (b/2)\xi + (b/2)$ により、区間 $[-1, 1]$ に変換されており、被積分関数 $F1$ は滑らかで性質の良い関数であることがわかる。

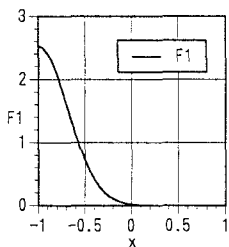


図-2 被積分関数 $F1$ ($r = 1.0, b = 4.472$)

4.2 無限積分の数値的確認

ガウス10点積分により、 $1/r$ の積分表現(9)を数値的に評価した結果を表-1に示す。距離 r が1に比べて小さい場合と大きい場合を考え、3つの異なる距離 $r = 10^{-5}, 1.0, 10^5$ について、 $1/r$ の積分表現に基づいた積分値をまとめてある。

表-1 ガウス10点積分

距離 r	積分区間 $[0, b]$	関数 $1/r$	$1/r$ の積分表現 (9)の数値積分値
$1.0E-5$	$[0, 4.4721E+5]$	$1.0E+5$	$1.0000E+5$
$1.0E+0$	$[0, 4.4721E+0]$	$1.0E+0$	$1.0000E+0$
$1.0E+5$	$[0, 4.4721E-5]$	$1.0E-5$	$1.0000E-5$

5. 数値解析例

5.1 境界要素

球形散乱体に対する境界要素分割例を図-3に示す。ここでは、形状は平面四角形要素で近似し、要素上の未知量は一定近似を採用している。球面上の θ 方向分割数は10、 φ 方向分割数は12である。

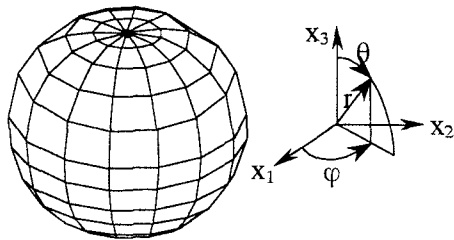


図-3 境界要素

5.2 一個の球状散乱体に対する解析結果

図-4に、本方法によって得た球状散乱体表面上の物理量を、解析解と比較した結果を示す。上の図は本方法によるディリクレ問題の解析結果であり、球表面上の $\partial u / \partial n$ の分布を示している。下の図は本方法によるノイマン問題の解析結果であり、球表面上の u の分布を示している。どちらも無次元化波数は $ak = 1.0$ で、図中、白抜きの四角がBEMによる結果、解析解が白抜きの丸である。どちらの境界条件でも本方法と解析解の結果に有意な差は無いことがわかる。

5.3 二重周期性を有する散乱体に対する解析結果

図-1に示したような二重周期構造系を考える。3節に示したように、基本解の積分表現の二重格子和からなる積分方程式を基に、二重周期構造系の解析を行った結果を図-5に示す。上の図がディリクレ条件に対する球面上の $\partial u / \partial n$ の分布、下の図がノイマン条

件に対する球面上の u の分布である。この場合も無次元化波数は $ak = 1.0$ 、また、 x_1 軸と x_2 軸に沿う球の中心間距離は共に同じで $b/a = c/a = 5.0$ である。図-4に示した一個の球形散乱体に対する解析結果と図-5の二重周期構造系に対する結果を比較すると、結果のパターンに大きな差は認められないが、値そのものに着目すると特に前方(図では上方)の値に二重周期構造系の影響が認められることがわかる。

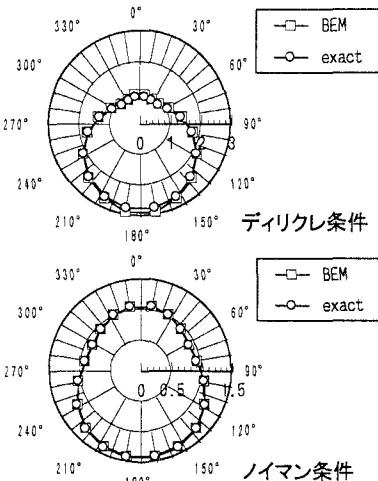


図-4 一個の球状散乱体に対する解析結果

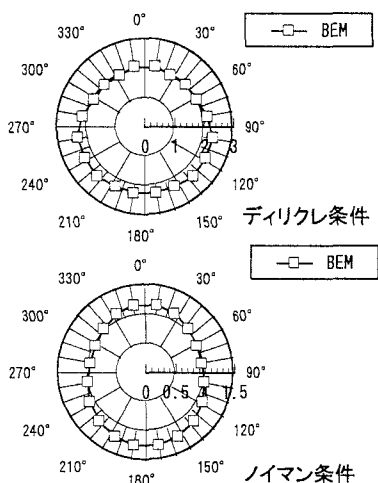


図-5 二重周期構造散乱体に対する解析結果
(二重周期構造系: 格子間隔 $b/a = c/a = 5.0$)

6. 結論

3節で述べた恒等式を使うことにより二重級数之和の収束性を高速化し、基本解の積分表現の評価法と二重周期構造系の解析から、この方法が二重周期構造系に対して有用であることが示された。

参考文献

- 1) Ewald, P.P.: Die Berechnung optischer und elektrostatischer getterpotentiale, *Annalen der Physik*, **64**(1921), pp.253-287.
- 2) Ziman, J. M. (山下次郎・長谷川彰 共訳): 固体物性論の基礎 第2版 (1976), 丸善.