

2次元 Helmholtz 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

An FMM for Periodic Boundary Value Problems in Helmholtz' Equation in 2D

大谷佳広*・西村直志**

Yoshihiro OTANI and Naoshi NISHIMURA

*学生会員 京都大学大学院情報学研究科 複雑系科学専攻 日本学術振興会特別研究員 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町)
**正会員 工博 京都大学大学院情報学研究科 複雑系科学専攻 教授 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町)

This paper presents an FMM for periodic boundary value problems in Helmholtz' equation in 2D. The periodic Green function, which is the basis for the formulation, is derived with Fourier analysis. We validate the proposed method by comparing numerical results obtained with the proposed method with those obtained with the traditional method. We then apply the proposed method to scattering problems for periodic array of cracks and plot the energy transmittances versus wave numbers. The stop-band is observed clearly.

Key Words : BIEM, FMM, periodic problems, Helmholtz' equation, stopband

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、無限遠を含む波動問題やクラック問題等が得意であるとされている。ここ十数年の間に急速に開発の進んだ高速多重極法と組み合わせて使用することにより、かなり大規模な問題の解析が可能になり、実用的な解法へと発展しつつある。

近年では、より速く、より大きな規模の問題を解こうとする努力に加えて、工学的に有用なさまざまな問題に高速多重極境界要素法^{1),2)}を適用しようとする試みもなされている。そのような例として、周期境界値問題が挙げられる。周期境界値問題は、微視的構造を有するような複合材料の挙動を解析する場合や、周期的に配置されたデバイスにおける波動場の解析等、工学分野の様々な場面で現れる。

特に近年関心が集まっている事柄として、フォトニック結晶と呼ばれる構造体にまつわる種々の現象の解析が挙げられる。フォトニック結晶は、ある種の周期構造からなり、ある周波数帯の光を透過させない性質を持つことが大きな特徴である。このような周波数帯をフォトニックバンドギャップと呼ぶ。この性質をうまく利用して光導波路の設計を行うことにより、光を自在に導くことが可能になる。また、結晶内に欠陥(乱れ)を導入することにより、バンドギャップ内に局在モードと呼ばれる孤立した透過帯を作り出すことができる。局在モードを利用すると、レーザー光のような単一周波数に近い光線を発することができるといえる。

このように、周期境界値問題は工学的に重要であるにも関わらず、波動問題における周期境界値問題の高速多重極境界要素法を厳密に扱った研究は稀である。高

速多重極法を用いて周期境界値問題を扱うための基本的なアイデアは Greengard ら¹⁾が既に示しており、その内容は、繰り返し周期となるユニットセルのレプリカセルをユニットセルの周囲に無限個配置するというものである。しかし、彼らの方法は発散級数和を物理的考察によって求めているために数学的曖昧さが残されており、また動的問題への適用方法も明らかでない。2次元静弾性問題については大谷ら³⁾が、3次元静弾性問題については Otani ら⁴⁾が数学的に厳密な定式化を示し数値解析を行ったが、動的問題についてはほとんど先行研究がない。そこで、本研究では周期境界値問題における高速多重極法(periodic FMM)の開発における第一段階として、Helmholtz 方程式における2次元1周期問題を扱った。なお2次元1周期問題とは、2次元平面において、ある1方向にのみ周期境界条件を課す問題のことである。

2. 定式化

2.1 対象とする問題

本研究では、Helmholtz 方程式

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

における2次元1周期問題を扱う。ここに、 u は未知関数、 k は波数である。

これ以降、解くべき領域を $D = (\mathbb{R} \times [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}])$ とし、 u は2軸方向に長さ1の間隔で周期的であると仮定する。適当な無次元化を行うことにより、この仮定は一般性を失わないことに注意する。

なお、ここでの「周期的」の意味には、1周期進むと位相差 β が生じるような場合も含むことにする。つま

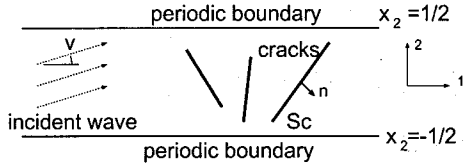


図-1 対象とする問題

り、 $x_2 = \pm 1/2$ において以下のような周期境界値条件を考える。

$$u\left(*, \frac{1}{2}\right) = e^{i\beta} u\left(*, -\frac{1}{2}\right) \quad (2)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x_2}\left(*, \frac{1}{2}\right) = e^{i\beta} \frac{\partial u}{\partial x_2}\left(*, -\frac{1}{2}\right) \quad (3)$$

ここで、 β は後述の入射波の入射角に由来するものであり、入射角を v とすると、

$$k \sin v = \beta \quad (4)$$

の関係がある。図-1 に示すように、解析領域中にはクラック S_c が存在し、クラック表面において、

$$\frac{\partial u}{\partial n} = 0 \quad \text{on } S_c \quad (5)$$

が満たされるものとする。ここで、 $\frac{\partial}{\partial n}$ はクラック表面における法線微分を表す。また、入射波 u^I は

$$u^I(x) = C_{\text{int}} e^{ikv \cdot x} \quad (6)$$

と表される平面波とする。ここに、 $v = (\cos v, \sin v)$ である。

次節で定義する周期境界値問題の Green 関数 G^p を用いると、次のような境界積分方程式が得られる。

$$0 = \frac{\partial u^I}{\partial n_x}(x) + \oint_{S_c} \frac{\partial^2 G^p}{\partial n_x \partial n_y}(x-y) \phi(y) dS_y \quad (7)$$

ここに、右辺第 2 項の積分は有限部分の意味で解釈する。また、 $x \in S_c$ 、 ϕ はクラックの開口変位である。

2.2 周期境界値問題における Green 関数

本研究では、Fourier 解析を用いて Green 関数を導出する。周期境界値問題の Green 関数を導出する方法としては Ewald の方法⁵⁾が知られているが、多重極法への適用方法が明らかでないため、本研究では用いなかった。

2次元 Helmholtz 方程式における周期境界値問題の Green 関数を G^p とすると、 G^p は次の支配方程式を満たす。

$$\Delta_x G^p(x-y) + k^2 G^p(x-y) = -\delta(x-y) \quad (8)$$

さらに、次の周期境界値条件を満足する。

$$G^p\left(x_1, \frac{1}{2}\right) = e^{i\beta} G^p\left(x_1, -\frac{1}{2}\right) \quad (9)$$

$$\frac{\partial G^p}{\partial x_2}\left(x_1, \frac{1}{2}\right) = e^{i\beta} \frac{\partial G^p}{\partial x_2}\left(x_1, -\frac{1}{2}\right) \quad (10)$$

いま、 G^p の x_1 についての Fourier 変換を $\tilde{G}^p(\xi, x_2)$ とすると、

$$\tilde{G}^p(\xi, x_2) = \int_{-\infty}^{\infty} G^p(x_1, x_2) e^{-ix_1 \xi} dx_1 \quad (11)$$

である。 $\tilde{G}^p$ は次の常微分方程式を満たす。

$$\frac{d^2}{dx_2^2} \tilde{G}^p(\xi, x_2) + (k^2 - \xi^2) \tilde{G}^p(\xi, x_2) = -\delta(x_2 - y_2) e^{-i\xi y_1} \quad (12)$$

ここで、次のことに注意する。すなわち、 $x = a$ において傾きが不連続に変化する関数 f の、超関数の意味での 2 階微分は次のように書ける。

$$\frac{d^2 f}{dx^2}(x) = \left\{ \frac{d^2 f}{dx^2}(x) \right\} + \left[\frac{df}{dx}(a) \right] \delta(x-a) \quad (13)$$

ここに、右辺第 1 項は古典的な意味の微分を表し、第 2 項は 1 階微分の不連続量を表す。このことを考慮に入れると、 $\tilde{G}^p$ は次の（古典的な意味の）常微分方程式を満たすことがわかる。

$$\frac{d^2}{dx_2^2} \tilde{G}^p(\xi, x_2) + (k^2 - \xi^2) \tilde{G}^p(\xi, x_2) = 0 \quad x_2 \neq y_2 \quad (14)$$

また、境界条件は以下のように与えられる。

$$\tilde{G}^p\left(\xi, \frac{1}{2}\right) = e^{i\beta} \tilde{G}^p\left(\xi, -\frac{1}{2}\right) \quad (15)$$

$$\frac{\partial \tilde{G}^p}{\partial x_2}\left(\xi, \frac{1}{2}\right) = e^{i\beta} \frac{\partial \tilde{G}^p}{\partial x_2}\left(\xi, -\frac{1}{2}\right) \quad (16)$$

$$\tilde{G}^p(\xi, y_2^+) = \tilde{G}^p(\xi, y_2^-) \quad (17)$$

$$\frac{\partial \tilde{G}^p}{\partial x_2}(\xi, y_2^+) - \frac{\partial \tilde{G}^p}{\partial x_2}(\xi, y_2^-) = -e^{-i\xi y_1} \quad (18)$$

ここに、 $y_2^\pm = \lim_{\epsilon \downarrow 0} (y_2 \pm \epsilon)$ である。これらを解くと、以下を得る。

$$\begin{aligned} \tilde{G}^p = & \frac{e^{iy_1 \xi - |x_2 - y_2| \sqrt{\xi^2 - k^2}}}{2\sqrt{\xi^2 - k^2}} + \frac{e^{i\beta - iy_1 \xi - (y_2 - x_2 + 1) \sqrt{\xi^2 - k^2}}}{2\sqrt{\xi^2 - k^2} (1 - e^{i\beta - \sqrt{\xi^2 - k^2}})} \\ & + \frac{e^{-i\beta - iy_1 \xi - (x_2 - y_2 + 1) \sqrt{\xi^2 - k^2}}}{2\sqrt{\xi^2 - k^2} (1 - e^{-i\beta - \sqrt{\xi^2 - k^2}})} \end{aligned} \quad (19)$$

これを ξ について Fourier 逆変換すると、結局

$$G^p(x-y) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\beta n} G(x-y - ne_2) \quad (20)$$

と書けることが分かる。ただし、 $e_2 = (0, 1)$ であり、 G は 2次元 Helmholtz 方程式の基本解である。具体的に逆変換を書き下すことにより次のような G^p の積分

表現を得る。

$$G^p(x-y) = \sum_{n=-a+1}^{a-1} G(x-y-ne_2) + \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{e^{ia\beta+i(x_1-y_1)\xi-(y_2-x_2+a)\sqrt{\xi^2-k^2}}}{2\sqrt{\xi^2-k^2}(1-e^{i\beta-\sqrt{\xi^2-k^2}})} + \frac{e^{-ia\beta+i(x_1-y_1)\xi-(x_2-y_2+a)\sqrt{\xi^2-k^2}}}{2\sqrt{\xi^2-k^2}(1-e^{-i\beta-\sqrt{\xi^2-k^2}})} \right) d\xi \quad (21)$$

ここに、 a は任意の自然数である。

2.3 高速多重極法

本節では、周期境界条件を一旦外し、通常の高多重極法の定式化について述べる。ここでは、高速多重極法に必要な諸式の導出に限りて述べ、アルゴリズムの詳細については割愛する。高速多重極法については Nishimura²⁾を参照されたい。

いま、2次元 Helmholtz 方程式の基本解は次のように与えられる。

$$G(x-y) = \frac{i}{4} H_0^{(1)}(k|x-y|) \quad (22)$$

ここに、 $H_n^{(1)}$ は n 次の第1種 Hankel 関数である。 G は次のように多重極展開される。

$$G(x-y) = \frac{i}{4} \sum_{n=-\infty}^{\infty} O^n(\vec{Ox}) I^{-n}(\vec{Oy}) \quad (23)$$

ここに、 O^n 、 I^n は次のように定義される関数である。

$$O^n(\vec{Ox}) = i^n H_n^{(1)}(kr) e^{in\theta} \quad (24)$$

$$I^n(\vec{Ox}) = (-i)^n J_n(kr) e^{in\theta} \quad (25)$$

ここに、 J_n は n 次の Bessel 関数である。また、 (r, θ) は x の極座標である。いま、境界 S の部分集合 S_0 を考える。ただし、任意の $y \in S_0$ に対し、 $|\vec{Ox}| > |\vec{Oy}|$ が成り立つものとする。すると、式 (7) における右辺第2項、つまり2重層ポテンシャルの法線微分は次のように計算される。

$$\int_{S_0} \frac{\partial^2}{\partial n_x \partial n_y} G(x-y) \phi(y) dS_y = \frac{i}{4} \frac{\partial}{\partial n_x} \sum_{n=-\infty}^{\infty} O^n(\vec{Ox}) M_{-n}(O) \quad (26)$$

ここに、 M_n は多重極モーメントであり、次のように定義される。

$$M_n(O) = \int_{S_0} \frac{\partial I^n(\vec{Oy})}{\partial n_y} \phi(y) dS_y \quad (27)$$

さらに、 x の近傍に展開中心 O' をとると、次のような局所展開を得る。

$$\int_{S_0} \frac{\partial^2}{\partial n_x \partial n_y} G(x-y) \phi(y) dS_y = \frac{i}{4} \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n \frac{\partial I^n(\vec{O'x})}{\partial n_x} L_{-n}(O') \quad (28)$$

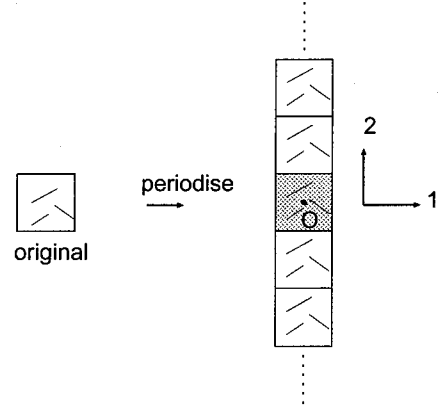


図-2 レプリカセル

ここに、 L_n は局所展開係数であり、多重極モーメントから次のように計算される。

$$L_n(O') = \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} O^{n-\nu}(\vec{OO'}) M_{\nu}(O) \quad (29)$$

多重極展開の展開中心を移動すると、新しい展開中心まわりの多重極モーメントは次のように計算される。

$$M_n(O) = \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} I^{n-\nu}(\vec{OO'}) M_{\nu}(O') \quad (30)$$

また、局所展開の展開中心を移動すると、新しい展開中心まわりの局所展開係数は次のように計算される。

$$L_n(O') = \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} I^{n-\nu}(\vec{O'O}) L_{\nu}(O) \quad (31)$$

なお、多重極展開の展開項数 p は次式⁶⁾によって決めた。

$$p = \max(kD + 6 \log(kD + \pi), 40) \quad (32)$$

ここに、 D はセルの対角線の長さである。

2.4 周期境界値問題における多重極法

periodic FMM の計算手順については、大谷ら³⁾が2次元静弾性問題、Otani ら⁴⁾が3次元静弾性問題において示しているが、2次元 Helmholtz 方程式においても基本的には同じである。図-2に示すような $(\pm 1/2, \pm 1/2)$ を頂点とする正方形領域を繰り返し単位すなわちユニットセルとし、これを多重極法の level 0 のセルとする。いま、ユニットセルの境界において、 x_2 軸方向についてのみ周期境界条件が課されていることに注意する。すると、式 (20) から分かるように、オリジナルのユニットセルのレプリカが x_2 方向に無限個並んでいると考えて多重極法を実行すると、周期境界条件を満たす解を得ることができることが分かる。

なお、ここでは簡単のために1周期中の全てのクラックが1つのユニットセルに含まれる場合を考えているが、そうでない場合も扱うことが可能である。

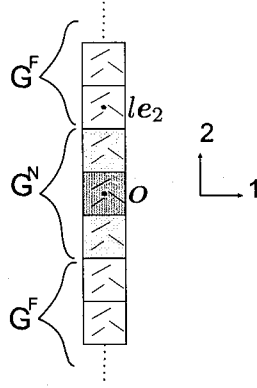


図-3 レプリカセルの近傍と遠方

periodic FMM では、周期境界値問題における Green 関数 G^p を次のように、ユニットセルの近傍からの影響を表す G^N と、ユニットセルの遠方からの影響を表す G^F に分けて考える。

$$G^p(x-y) = G^N(x-y) + G^F(x-y) \quad (33)$$

$$G^N(x-y) = \sum_{l=-1}^1 G(x-y-le_2) \quad (34)$$

$$G^F(x-y) = \left(\sum_{l=-\infty}^{-2} + \sum_{l=2}^{\infty} \right) G(x-y-le_2) \quad (35)$$

図-3 で示されているように、 G^N はユニットセル自身とユニットセルに隣接するレプリカセルからの影響に対応し、 G^F は、ユニットセルに隣接しないレプリカセルからの影響に対応する。

G^N に関しては、前節で述べた道具を用いて多重極法を適用することが可能である。すなわち、直接計算ならびに M2L の対象を、ユニットセルに隣接するレプリカに含まれるセルにまで広げて、通常の高重極法を実行すればよい。このように、 G^N に関しては既存の手法で計算可能であるからここではこれ以上触れないこととし、これ以降では G^F に関する算法について詳しく述べることにする。

G^F は次のように多重極展開される。

$$G^F(x-y) = \frac{i}{4} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\sum_{l=-\infty}^{-2} + \sum_{l=2}^{\infty} \right) \left\{ e^{i\beta l} O^n(\vec{Ox} - le_2) \right\} I^{-n}(\vec{Oy}) \quad (36)$$

これを用いると、式 (7) の右辺第 2 項である 2 重層ポテンシャルの法線微分は、前節と同様にして次のような局所展開の形で書ける。

$$\begin{aligned} & \int_S \frac{\partial^2}{\partial n_x \partial n_y} G^F(x-y) \phi(y) dS_y \\ &= \frac{i}{4} \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n \frac{\partial I^n(\vec{Ox})}{\partial n_x} L_{-n}^F(O) \end{aligned} \quad (37)$$

ここに、 L^F は局所展開係数であり、次のようにして計算される。

$$L_n^F(O) = \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} O^{F^{n-\nu}} M_{\nu}(O) \quad (38)$$

ここに、 M_n は多重極モーメントであり、前節で定義したものと同一である。また、 O^{F^n} は次式で定義される。

$$O^{F^n} = \left(\sum_{l=-\infty}^{-2} + \sum_{l=2}^{\infty} \right) \{ e^{i\beta l} O^n(le_2) \} \quad (39)$$

結局、この O^{F^n} が求まれば、 G^F からの寄与が計算できることになる。

一方、

$$O^n(\vec{Ox}) = \left[\frac{1}{ik} \left(\frac{\partial}{\partial x_1} + i \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \right]^n H_0^{(1)}(\vec{Ox}) \quad (40)$$

$$O^{-n}(\vec{Ox}) = \left[\frac{1}{ik} \left(\frac{\partial}{\partial x_1} - i \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \right]^n H_0^{(1)}(\vec{Ox}) \quad (41)$$

であるから、 $O^{F^{\pm n}}$ は次のような積分表示を持つ。

$$\begin{aligned} O^{F^{\pm n}} &= \frac{1}{\pi i k^n} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-2i\beta-2p}(\xi \mp p)^n}{p(1-e^{-i\beta-p})} d\xi \right. \\ &\quad \left. + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{2i\beta-2p}(\xi \pm p)^n}{p(1-e^{i\beta-p})} d\xi \right] \end{aligned} \quad (42)$$

ここに、 $p = \sqrt{\xi^2 - k^2}$ である。上式を数値積分することにより、 $O^{F^{\pm n}}$ を求める。

2.5 O^F の積分方法

式 (42) の被積分関数は、実軸上に極を持つため、積分経路を複素平面上に振る。本研究では、積分経路として e^{-p} の最急降下路

$$\xi = \pm \sqrt{t^2 - 2ikt}, \quad t > 0 \quad (43)$$

を積分経路とした。式 (42) において n が大きい場合、被積分関数の収束は遅くなる。被積分関数は積分経路上で振動するため、被積分関数の収束が遅い場合には、数値積分の精度を損なう可能性がある。これを防ぐためには、式 (21) を参照して式 (42) を次のように修正する。

$$\begin{aligned} O^{F^{\pm n}} &= \left(\sum_{l=-a+1}^{-2} + \sum_{l=2}^{a-1} \right) \{ e^{i\beta l} O^n(le_2) \} \\ &\quad + \frac{1}{\pi i k^n} \left[\int_C \frac{e^{-a i \beta - a p}(\xi \mp p)^n}{p(1-e^{-i\beta-p})} d\xi \right. \\ &\quad \left. + \int_C \frac{e^{a i \beta - a p}(\xi \pm p)^n}{p(1-e^{i\beta-p})} d\xi \right] \end{aligned} \quad (44)$$

a を大きく取ると収束性が改善するが、右辺の級数と部分の計算コストは増大する。

2.6 遠方場の計算

一般的に、波動散乱問題においては、散乱体から十分遠方の波動場、すなわち遠方場を求めることが工学的に重要とされている。それに加えて、本問題では、周

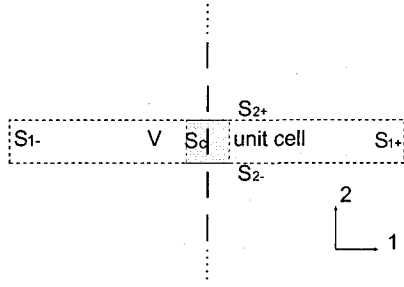


図-4 遠方場計算のための領域ならびに境界

期境界値問題特有の興味深い現象が遠方場において観察される。これらの事柄から、本研究において遠方場を構成する方法を考察することは十分意義がある。そこで、本節では遠方場の構成方法について述べることにする。

2次元1周期問題においては、散乱体から十分遠方に離れると、波動場は平面波の重ね合わせによって表現される。このことは、周期境界値問題における Green 関数 G^P の積分表現である式 (21) において、 $|x_1| \rightarrow \infty$ とすれば分かる。このとき、遠方場を構成する平面波の方向は式 (51) のように離散的に存在するため、高々有限個の平面波についてその各々の振幅を求めれば、遠方場は完全に求まる。そこで本節では、遠方場における平面波の振幅を求める方法について考察する。さらに、ある検査面についてのエネルギー透過量の求め方を示す。

今、関数 $u, \tilde{u}$ はそれぞれ Helmholtz 方程式を満たすとする。さらに、

$$u(x_1, x_2 + n) = u(x_1, x_2) e^{in\beta} \quad (45)$$

$$\tilde{u}(x_1, x_2 + n) = \tilde{u}(x_1, x_2) e^{-in\beta} \quad (46)$$

を満たすとする。ここで、 $u_1 = u e^{-i\beta x_2}$ 、 $u_2 = \tilde{u} e^{i\beta x_2}$ は x_2 軸方向について周期関数である。加えて、 u_2 はクラックを跨いで滑らかであるとし、 u_1 はクラック上に境界条件

$$\frac{\partial u_1}{\partial n} = 0, \quad \text{on } S_c \quad (47)$$

を満たすものとする。いま、領域 V ならびにその境界 $S = S_{1-} + S_{1+} + S_{2-} + S_{2+} + S_c$ を図-4 のように取る。すると、 u_1, u_2 は以下の Green 公式を満足する。

$$\int_{S_1+S_c} \left(\frac{\partial u_1}{\partial n} u_2 - \frac{\partial u_2}{\partial n} u_1 \right) dS - 2i\beta \int_{S_c} \phi u_2 n_2 dS = 0 \quad (48)$$

ここに、 $S_1 = S_{1+} + S_{1-}$ である。また、 ϕ はクラックにおける u_1 の開口変位である。 S_{1+}, S_{1-} はクラックから十分遠方にあるとする。上式の導出にあたっては、

以下の関係式

$$\Delta u_1 + (k^2 - \beta^2) u_1 + 2i\beta \frac{\partial u_1}{\partial x_2} = 0 \quad (49)$$

$$\Delta u_2 + (k^2 - \beta^2) u_2 - 2i\beta \frac{\partial u_2}{\partial x_2} = 0 \quad (50)$$

ならびに、 S_2 における周期境界条件を用いた。

さて、 u は、散乱体から十分遠方において、次のように平面波の重ね合わせで表現される。

$$u = \begin{cases} \sum_n C_n^+ e^{ikp_n^+ \cdot x}, & x_1 > 0 \\ \sum_n C_n^- e^{ikp_n^- \cdot x}, & x_1 < 0 \end{cases} \quad (51)$$

上式は各々透過波、反射波を表す。ここで、周期境界値条件を考慮すると、 $p_n^\pm$ には以下のような条件が課されることが分かる。

$$\sin p_n = \frac{2n\pi}{k} + \sin v, \quad -\frac{\pi}{2} < p_n < \frac{\pi}{2} \quad (52)$$

ここに、 $p_n^\pm = (\pm \cos p_n, \sin p_n)$ 、 $k \sin v = \beta$ である。上式を満たす有限個の n に対して振幅 $C_n^\pm$ が求まれば、 u の遠方場が完全に求まる。いま、 $\tilde{u}$ として

$$\tilde{u}_m^\pm = e^{-ikp_m^\pm \cdot x} \quad (53)$$

ととり、 $u_2 = \tilde{u}_m^\pm e^{i\beta x_2}$ とすると、

$$\int_{S_1} \left(\frac{\partial u_1}{\partial n} u_2 - \frac{\partial u_2}{\partial n} u_1 \right) dS = 2ik C_m^\pm \cos p_m \quad (54)$$

であるので、結局、遠方場を構成する平面波の振幅は

$$C_m^\pm = \frac{1}{2ik \cos p_m} \times \int_{S_c} \phi e^{-i\beta x_2} \left(-\frac{\partial u_{2,m}^\pm}{\partial n} + 2i\beta u_{2,m}^\pm n_2 \right) dS \quad (55)$$

で与えられる。

次に、ある検査面に関するエネルギー透過量の計算方法ならびにエネルギー透過率について述べる。いま、2次元 Helmholtz 方程式の解 u に対し、 $\hat{u} = u e^{-i\omega t}$ とすると、 $\hat{u}$ は次の波動方程式を満たす。

$$\frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial t^2} = c^2 \Delta \hat{u} \quad (56)$$

ただし、 $c = \omega/k$ である。ここで、ある検査面を S_e を考え、ある時刻においてこの検査面を透過するエネルギー量 P_{S_e} を次式で定義する。

$$P_{S_e} = \int_{S_e} c \Re \left[\frac{\partial \hat{u}}{\partial n} \right] \Re [\dot{\hat{u}}] dS \quad (57)$$

また、単位時間当たりのエネルギー透過量を次式で定義する。

$$\langle P_{S_e} \rangle = \frac{1}{T} \int_t^{t+T} P_{S_e} dt \quad (58)$$

ここに、 T は時間周期の長さであり、 $T = \frac{2\pi}{\omega}$ である。いま、検査面 S_e がある領域を囲む閉曲面であったとすると、 $\hat{u}$ が時間調和であることと Gauss の公式により、 $\langle P_{S_e} \rangle = 0$ となることが分かる。

本研究では、検査面として図-4に示すように無限遠方に S_{1-} 、 S_{1+} を取り、その法線ベクトルは外側を向いているとする。いま、周期境界条件を考慮すると

$$\langle P_{S_{2-}} \rangle + \langle P_{S_{2+}} \rangle = 0 \quad (59)$$

であることが示されるので、

$$\langle P_{S_{1-}} \rangle + \langle P_{S_{1+}} \rangle = 0 \quad (60)$$

が成り立つ。

さて、いま2次元 Helmholtz 方程式の解として平面波 $u = Ae^{ikx}$ を考えると、 $\hat{u}$ は次のようになる。

$$\hat{u} = Ae^{ik(x \cdot q - ct)} \quad (61)$$

これを式 (57)、(58) に代入すると、単位時間当たりの平面波のエネルギー透過量 $\langle P_{S_e}(A, q) \rangle$ は次のように計算される。

$$\langle P_{S_e}(A, q) \rangle = -\frac{k^2 c^3 |A|^2 |S_e|}{2} q \cdot n \quad (62)$$

ここに、 $|S_e|$ は検査面 S_e の面積であり、 n は検査面の法線ベクトルである。

本問題では、遠方場は入射波、透過波ならびに反射波からなり、それらは全て平面波の重ね合わせで表現されている。一般には、場が複数の平面波の重ね合わせで構成される場合、検査面を透過するエネルギーの総量と、個々の平面波のエネルギー透過量の総和は異なる。しかし、本問題における遠方場に関しては、遠方場を構成する各々の平面波が式 (52) を満たしており、このことを用いると検査面を透過するエネルギー量が、個々の平面波のエネルギー透過量の総和に等しいことが示される。従って、式 (60) を考慮すると

$$\begin{aligned} & \langle P_{S_{1-}}(C_{\text{int}}, v) \rangle \\ &= -\sum_n \langle P_{S_{1-}}(C_n^+, p_n^+) \rangle - \sum_n \langle P_{S_{1+}}(C_n^+, p_n^+) \rangle \end{aligned} \quad (63)$$

が成り立つ。ここに、 $v = (\cos v, \sin v)$ 、 C_{int} は入射波の振幅である。また、 $S_{1\pm}$ の法線ベクトルは、外向きであるとしている。そこで、エネルギー透過率を次式で定義する。

$$\frac{-\sum_n \langle P_{S_{1+}}(C_n^+, p_n^+) \rangle}{\langle P_{S_{1-}}(C_{\text{int}}, v) \rangle} = \frac{-\sum_n |C_n^+|^2 p_n^+ \cdot n^+}{|C_{\text{int}}|^2 v \cdot n^-} \quad (64)$$

ここに、 $n^\pm$ はそれぞれ $S_{1\pm}$ の外向き法線ベクトルである。また、遠方場を構成する各々の平面波のエネルギーフラックスを

$$\frac{k^2 c^3 |C_n^\pm|^2}{2} \quad (65)$$

で定義する。これを入射波のエネルギーフラックスで正規化すると、

$$\frac{|C_n^\pm|^2}{|C_{\text{int}}|^2} \quad (66)$$

となる。

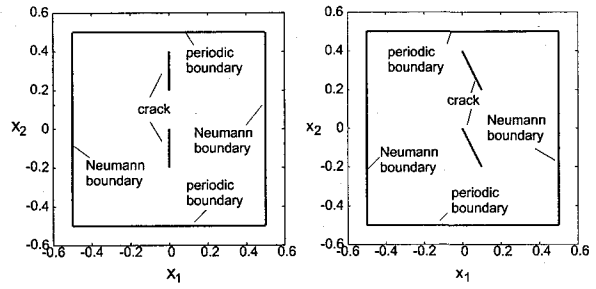


図-5 テスト問題 (case1, case2)

3. 数値計算

3.1 高速多重極法の精度検証

本節では、本論文で提案する periodic FMM について、精度の検証を行う。最初に、周期境界値問題における Green の多重極展開について精度検証を行った。具体的には、式 (35) において、 $(\pm 1/2, \pm 1/2)$ を頂点とするユニットセルの内部にソース点 y 、セル境界上に観測点 x を設け、セル境界上で周期性が満たされているかを検証した。その際、 G^N は直接法によって計算し、 G^F は2.4で述べた方法によって計算した。ソース点、観測点の座標はそれぞれ、

$$\begin{aligned} x &= \left(\frac{i}{(N_x - 1)} - \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right), \\ i &= 0 \dots N_x - 1 \end{aligned} \quad (67)$$

$$\begin{aligned} y &= \left(\frac{(1 - \epsilon)i}{2(N_y - 1)}, \frac{(1 - \epsilon)j}{2(N_y - 1)} \right), \\ i &= 0 \dots N_y - 1, j = 0 \dots N_y - 1 \end{aligned} \quad (68)$$

$$N_x = 30, N_y = 5, \epsilon = 10^{-6} \quad (69)$$

で与えた。これらのソース点、観測点の全ての組合せに対し、相対誤差

$$\frac{|G^p(x_1, 1/2) - G^p(x_1, -1/2)e^{i\beta}|}{|G^p(x_1, 1/2)|} \quad (70)$$

の最大値を E_{max} とし、これ以降の数値計算例で現れる全ての波数 k 、ならびに β について E_{max} を求めたが、全ての場合で 10^{-11} 以下であった。これにより、周期境界値問題における Green 関数の展開精度は十分であると考えられる。

次に、図-5で示されるような、クラック、Neumann 境界、周期境界からなる内部問題を periodic FMM と従来法で解き、数値解を比較した。本問題ではクラック上で境界条件

$$\frac{\partial u}{\partial n} = -\frac{\partial e^{ikv \cdot x}}{\partial n} \quad (71)$$

を課し、Neumann 境界上では境界条件として

$$\frac{\partial u}{\partial n} = 0 \quad (72)$$

を課した。ここに、 $v = (\cos v, \sin v)$ であり、 $k \sin v = \beta$ である。テスト問題に内部問題を用いたのは、従来法

表-1 periodic FMM と従来法との差

case	k	β	差
1	10	0	6.75×10^{-4}
1	10	6	1.92×10^{-4}
2	10	6	1.48×10^{-4}

では無限遠を含む周期境界値問題を扱うことができないからである。従来法では、周期境界上にメッシュを配置し、直接的に周期境界条件を与えた。それに対し、今回提案した periodic FMM では、周期境界上のメッシュは不要である。

解析領域は 1 辺の長さが 1 の正方形領域であり、波数 $k = 10$ である。case1 においては $\beta = 0$ 、 $\beta = 6$ の 2 通りを扱い、case2 においては $\beta = 6$ とした。要素分割は区分一定要素を用い、クラック 1 本当たり 200 要素、周期境界ならびに Neumann 境界上には 1 辺当たり 800 要素とした。

クラックの開口変位について、従来法と periodic FMM の差を表 1 に示す。なお、数値解の差は

$$\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n |\phi_{\text{FMM}}^i - \phi_{\text{traditional}}^i|^2}{\sum_{i=1}^n |\phi_{\text{FMM}}^i|^2}} \quad (73)$$

によって定義した。ここに、 n はクラック上の要素数、 ϕ_i^* は i 番目の要素の開口変位を表す。

表-1 から、従来法と periodic FMM の数値解はほぼ一致していることが分かる。また、表には掲載していないが、周期境界上ならびに Neumann 境界上のメッシュ分割を細かくするにつれ両者の差が縮まる傾向が観察された。以上のことから、今回提案した periodic FMM の妥当性についての検証がなされたといえる。

3.2 周期クラック群による散乱問題

本節では、前節までで述べてきた periodic FMM を用いて、周期的に配置されたクラック群に入射する平面波の散乱問題を扱う。解析は以下の手順で行った。

1. periodic FMM を用いてクラックの開口変位を求める
2. 遠方場を構成する平面波の振幅を求める
3. エネルギー透過率を計算する

(1) 一列のクラック群による散乱問題

ここでは、図-6 のようにクラックが周期的に配置されている場合の散乱問題を扱う。繰り返し単位のユニットセルとしては、図-7 のようなものを考える。区分一定要素を用い、クラックを 400 要素に分割した。

まず、 $\beta = 0$ と固定し、波数 k を変化させてエネルギー透過率を計算したところ、図-8 のようになった。実線で示したものがエネルギー透過率であり、破線で示したものは、遠方場を構成する各透過平面波の、入

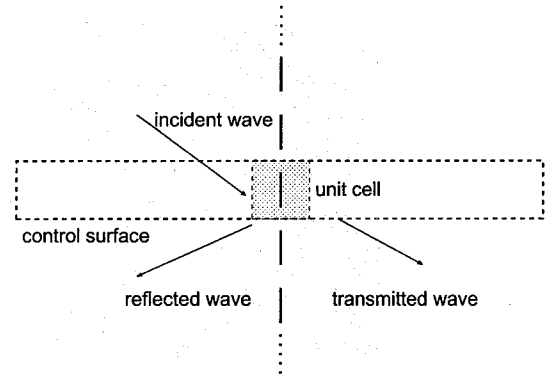


図-6 周期クラック群による散乱

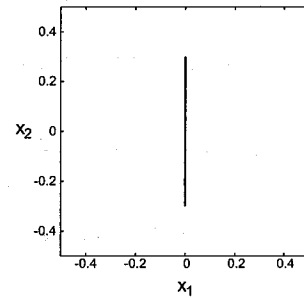


図-7 ユニットセル内のクラック配置（1 列の周期クラック群）

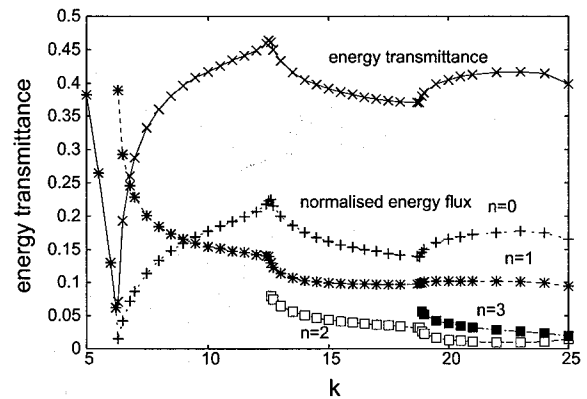


図-8 波数とエネルギー透過率の関係（1 列の周期クラック群による散乱）

射波で正規化されたエネルギーフラックスである。図-8 の中の n は、式 (51) の n に対応する。

式 (52) から分かるように、 $k = 2l\pi$ (l は自然数) で遠方場に新たな方向の平面波が加わるため、 $k = 2l\pi$ の前後において遠方場は急激に変化する。そのことは図-8 から見て取れるが、 $k = 2l\pi$ の前後における振幅の空間分布を描くと、遠方場の急激な変化はよりはっきりと観察できる。 $k = 2\pi$ 、 $k = 4\pi$ 、 $k = 6\pi$ の前後の波数での、透過波の振幅の空間分布を空間 2 周期分について描いたものが図-9-14 であるが、 $k = 2l\pi$ を跨

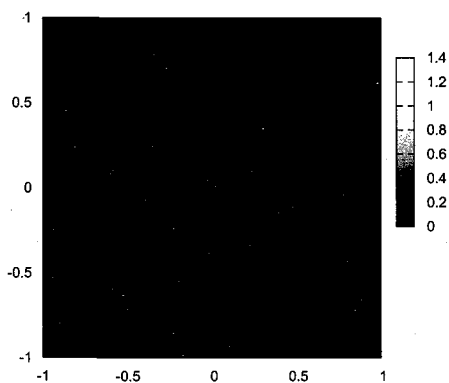


図-9 遠方場の振幅 $k = 6.2, \beta = 0.0$

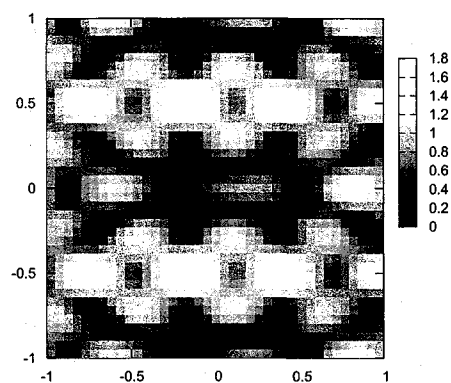


図-12 遠方場の振幅 $k = 12.6, \beta = 0.0$

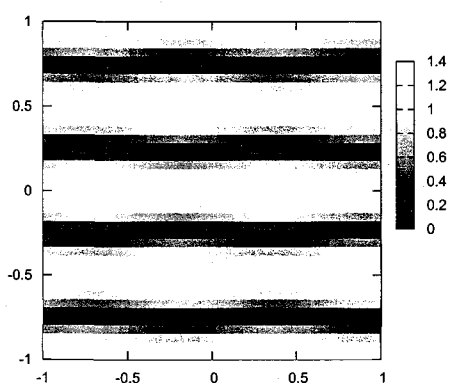


図-10 遠方場の振幅 $k = 6.3, \beta = 0.0$

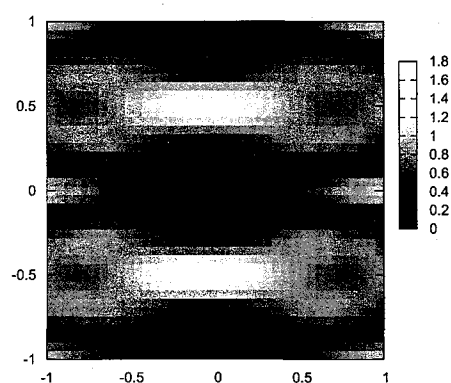


図-13 遠方場の振幅 $k = 18.8, \beta = 0.0$

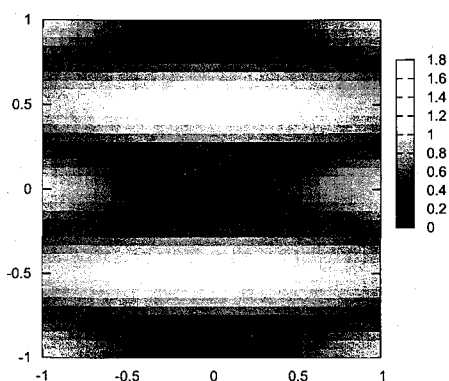


図-11 遠方場の振幅 $k = 12.5, \beta = 0.0$

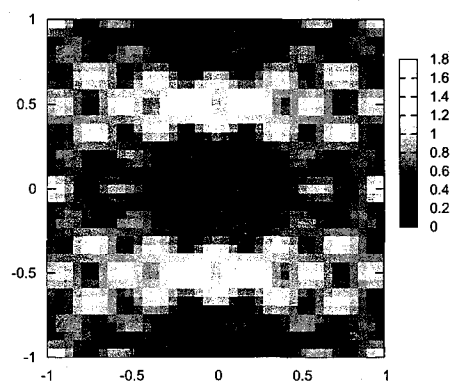


図-14 遠方場の振幅 $k = 18.9, \beta = 0.0$

いだ時に波動場が不連続に変化する現象が顕著に現れている。

次に、波数を $k = 10$ で固定し、入射角を $0 \sim \pi/2$ で振るとき、すなわち β を 0 からおよそ 10 まで変化した時のエネルギー透過率を図-15 に示す。破線は透過遠方場を構成する各々の平面波の、正規化されたエネルギーフラックスである。先の例と同様に、平面波の数が変わる点を境にエネルギー透過率の勾配が不連続に変化している。

(2) 複数列のクラック群による散乱問題

ここでは、図-16 で示されるように、層状に配置されたクラック群による散乱問題を扱う。ユニットセル内には、図-17 に示した通り 64 本のクラックを配した。前項の場合と同様に、区分一定要素を用いてクラック 1 本当たり 400 要素に分割したので、総要素数は 25600 である。

ここでは入射角 0 の場合、すなわち $\beta = 0$ の場合を取り扱う。5 から 30 までの波数 k に対し、エネルギー

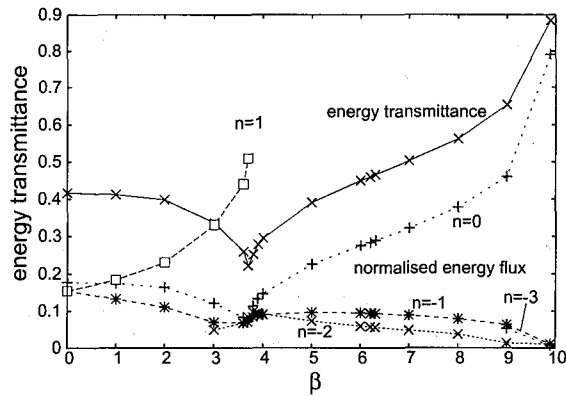


図-15 β とエネルギー透過率の関係 (1 列の周期クラック群による散乱)

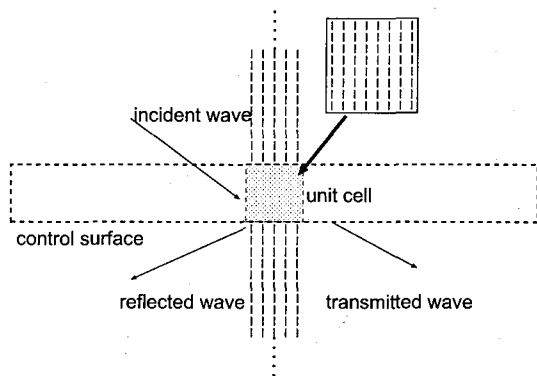


図-16 周期クラック群

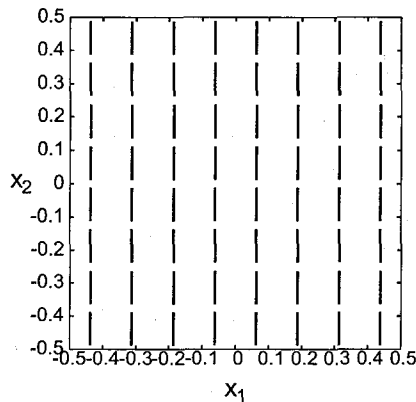


図-17 ユニットセル内のクラック配置 (ユニットセル内に 8×8 本)

透過率をプロットしたのが図-18である。なお、このケースの場合、実質的な繰り返し周期は $1/8$ であるから、与えられた波数の範囲では、遠方場を構成する平面波は式 (51) における $n = 0$ の波のみである。つまり、遠方場は反射波の場合も透過波の場合も、入射波に並行な平面波のみである。

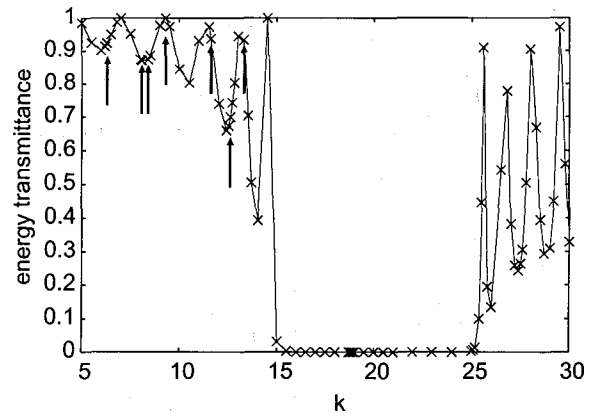


図-18 波数とエネルギー透過率の関係 (ユニットセル内にクラック 8×8 本)

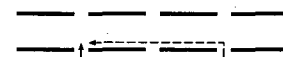


図-19 干渉パターン (1)

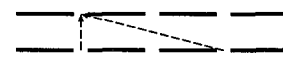


図-20 干渉パターン (2)

図-18を見ると、 $5\pi \leq k \leq 8\pi$ の範囲で波がほとんど透過しないことが分かる。これはストップバンドと呼ばれる現象であると考えられる。ストップバンドが観察される波数帯の前後では、エネルギー透過率が波数の変化に伴って振動している。ここでは、 $k \leq 5\pi$ でエネルギー透過率が振動する原因を、以下のように考察した。すなわち、クラックを抜けた波同士が互いに干渉すると考え、干渉パターンとして図-19のようにクラックに沿うような経路と、図-20のようにクラック一つ分前進して干渉する経路を想定した。波の進行方向に垂直な方向に関しては、4つ隣の隙間を抜けた波まで相互干渉すると仮定した。このような仮定の元、波の行路差がちょうど半波長の整数倍となるような波数を求めた。このような波数を小さい順に並べると、表-2のようになる。これらの波数を図-18の中に矢印で示したが、これら干渉の起こる波数の周辺でエネルギー透過率は極大、あるいは極小となっていることが分かる。このことから、ここで仮定した干渉パターンがエネルギー透過率になんらかの影響を及ぼしていると推測される。

次に、図-17で示されるクラック配置から x_1 軸方向にクラックを1列取り除いた図-21のような配置を考える。

まず $\beta = 0$ として固定し、波数を5から30まで変化させた。波数に対し、エネルギー透過率ならびに遠方

表-2 干渉の起こる波数

No.	1	2	3	4	5	6	7
k	6.28	8.05	8.38	9.28	11.6	12.6	13.3

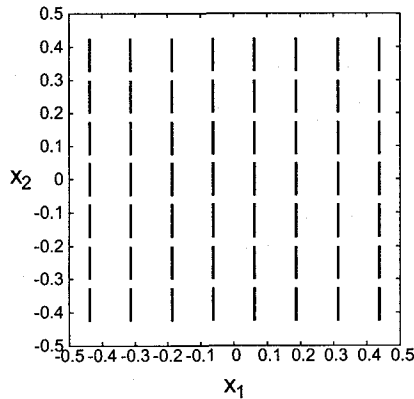


図-21 ユニットセル内のクラック配置 (ユニットセル内に 8×7 本)

場を構成する透過平面波の正規化されたエネルギーフラックスをプロットしたのが図-22 である。今回は先の例と異なり、遠方場において $n = 0$ 以外の平面波も存在する。さらに、図-22 を先の図-18 と比較すると、概ねの傾向は一致しているものの、

- ストップバンド内でも $n \neq 0$ の波がわずかながら透過している
- $k = 14$ 付近のピークが存在しない
- ストップバンド前後においてエネルギー透過率は振動するが、振動の山と谷が図-18 と図-22 では少しずれている。
- ストップバンド内に小さなピークが存在する

といった点異なる。周期構造の中に構造欠陥が存在する場合、ストップバンド内に局在モードが立つことが知られている。上に挙げた 4 番目の項目がこの現象に関連があるかどうかは、今後検討を要する。

次に、波数 k を 16 に固定し、 β を 0 からおよそ 16 まで変化させた。これはすなわち、入射波の入射角を 0 から約 $\pi/2$ まで振ったことに相当する。このときのエネルギー透過率、ならびに透過遠方場を構成する各々の平面波の正規化されたエネルギーフラックスを図-23 にプロットした。入射角を 0 で固定し、波数 k を変化させた場合には、卓越する透過平面波はストップバンド内を除いて $n = 0$ の波であったのに対し、入射角を変化させると、卓越する平面波は常に $n = 0$ の波とは限らず、次々に変化することが分かる。

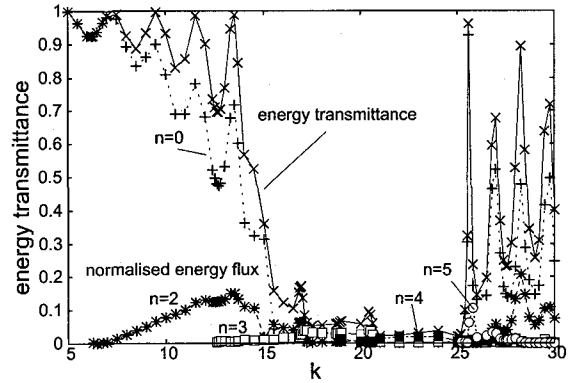


図-22 波数とエネルギー透過率の関係 (ユニットセル内にクラック 8×7 本)

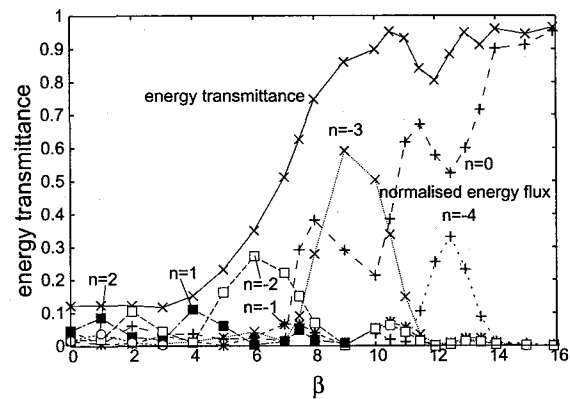


図-23 β とエネルギー透過率の関係 (ユニットセル内にクラック 8×7 本)

4. 終わりに

波動問題における周期境界値問題は工学的に非常に重要である。本論文では、2 次元 Helmholtz 方程式の 1 周期問題のための高速多重境界要素法を定式化し、クラック問題において、その精度と、有効性を検証した。更に、クラックが層状に周期的配置した場合の散乱問題を取り扱い、フォトニック結晶などの理論において知られているストップバンドに似た現象がある事を確認した。今後、3 次元問題や光学の問題への拡張を行なう予定である。

参考文献

- 1) L. Greengard and V. Rokhlin: A Fast Algorithm for Particle Simulations, Journal of Computational Physics, **73**(1987), pp.325-348.
- 2) N. Nishimura: Fast multipole accelerated boundary integral equation methods, Applied Mechanics Reviews, **55**(2002), pp.299-324.
- 3) 大谷佳広・西村直志: 2 次元静弾性クラック周期境界値問題における高速多重極法、境界要素法論文集、**21**(2004)、pp.71-76.

- 4) Y. Otani and N. Nishimura: A Fast Multipole Boundary Integral Equation Method for Periodic Boundary Value Problems in Three Dimensional Elastostatics and its Application to Homogenisation, IWA-COM2004 in International Journal for Multiscale Computational Engineering, to appear
- 5) A. Morelot, Etude d'une méthode numérique de simulation de la diffraction d'une onde électromagnétique par un réseau bi-périodique, Thèse, Ecole Polytechnique (1992)
- 6) Rokhlin, V.: Rapid solution of integral equations of scattering theory in two dimensions, Journal of Computational Physics, **86**(1990), pp.414-439.

(2006 年 4 月 13 日 受付)