

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

An FMM for Periodic Boundary Value Problems for Maxwell's equations in 3D

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科学研究科 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科学研究科 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 for Maxwell's equations in 3D. The periodic Green function and its derivatives, which are essential to the present method, are derived with Fourier analysis. We verify the proposed method by comparing the obtained numerical results with analytic solutions for models of the multi-layered dielectric slab. We then apply the proposed method to scattering problems for periodic two dimensional arrays of dielectric spheres and compare the obtained energy transmittances with those in the previous studies. We observe good agreements.

Key Words : BIEM, Fast Multipole Method (FMM), periodic problems, Maxwell's equations, photonic crystals

1. はじめに

波動問題における周期境界値問題は、近年ますます重要になっている問題の一つである。本研究では 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の定式化を行い、数値解析を行う。

動的問題における周期境界値問題は、導波路や回折格子の設計等において現れる重要な問題であり、特に電磁界解析の分野で盛んに研究されてきた。近年、フォトニック結晶¹⁾と呼ばれる周期構造が注目を集めたことにより、周期境界値問題の重要性がますます高まってきた。フォトニック結晶とは光の波長程度の周期構造を有する誘電体であり、このような構造に起因して様々な興味深い挙動を示す。例えば、ストップバンドと呼ばれる、波が透過しない周波数帯を作ることができる。また、周期構造の一部に乱れを導入することにより、非常に狭い周波数帯の波のみが透過する、局在モードを作ることにもできる。これらの性質を用いると、光を導いたり、貯めたりといった制御が自由自在に行えるようになり、将来の光技術に革新をもたらす可能性があると期待されている。現在、零閾値レーザー、大規模光集積回路といった、既存の技術では作ることができなかった光デバイスの開発が、精力的に行われている。

さらに、近年、メタマテリアルと呼ばれる構造体が注目されている²⁾。メタマテリアルとは、自然界にはない新奇な物性を示す複合材料のことであり、多くの場合では、誘電体中に光の波長よりも小さい周期で金属が配列された構造をしている。メタマテリアルは、こ

のような構造に起因して、全体として自然界の物質とは全く異なる特性を示す。例えば、巨視的に負の屈折率を持つことが可能であるとされており、このような性質を用いると、例えば正の屈折率を持つ物質では得られない高い解像度を有するスーパーレンズの製作が可能になると言われている。

上で述べたような物質を対象に数値計算を行う場合、数値解法としては FDTD 法、有限要素法、境界要素法、平面波展開法等が挙げられる。ただ、これまでは、純粋に学問的な立場から周期構造を有する構造体の性質を解明することが興味を中心であったために、比較的単純な形状のモデルが扱われることが多かった。しかし、今後は本格的な工学的応用を見据えて、より複雑な形状のモデルが扱われるものと考えられる。そのような場合、領域の境界のみを離散化する境界要素法が特に有利であると考えられる。

境界要素法は偏微分方程式の数値解法の一つであり、放射条件を自然に扱えることから波動問題に適していると言われている。ここ十数年の間に急速に開発の進んだ高速多重極法^{3),4)}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。

従来、高速多重極境界要素法の研究では、比較的単純な問題について、より大きな問題をより速く解くといったベンチマーク的な研究が多かった。しかし、近年では高速多重極境界要素法をより工学的に有用な問題に適用する試みが多くなされている。しかし、特に 3 次元の波動問題における周期境界値問題は工学的に重要であるにも関わらず、これを厳密に扱った研究は

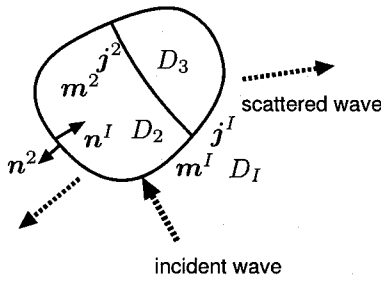


図-1 無限領域における散乱問題

稀である。そこで、本研究では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の定式化を行い、数値解析を行った。

高速多重極法を用いて Laplace 方程式の周期境界値問題を扱うための基本的なアイデアは Greengard ら³⁾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と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。そこで、2次元静弾性問題については大谷ら⁵⁾が、3次元静弾性問題については Otani ら⁶⁾が数学的に厳密な定式化を示し数値解析を行った。波動問題については2次元 Helmholtz 方程式において Otani ら⁸⁾が定式化を行い、数値解析を行った。しかし、3次元波動問題ではほとんど先行研究がない。そこで、本研究では Maxwell 方程式における3次元2周期問題を扱った。なお3次元2周期問題とは、3次元空間において、ある2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 $\mathbb{R}^3$ における非周期境界値問題の定式化

最初に、周期境界条件を課さず、無限空間における散乱問題の定式化を行う。なお、Maxwell 方程式とその解の積分表現については文献⁹⁾を参照されたい。

(1) 問題設定

考える問題は次のようである。いま、図-1で示されるように、 $\mathbb{R}^3$ を N 個の部分領域 D_i に分解する。すなわち、 $\mathbb{R}^3 = D_1 \cup D_2 \cup \dots \cup D_N$ 、 $D_i \cap D_j = \emptyset$ ($i \neq j$) とする。各々の部分領域において、次の3次元 Maxwell 方程式が成り立つものとする。

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

$$\nabla \times \mathbf{H} = -i\omega\epsilon^i \mathbf{E} \quad \text{in } D_i \quad (2)$$

ここに、 $(\mathbf{E}, \mathbf{H})$ は (電場, 磁場)、 ω は周波数であり、 ϵ^i 、 μ^i はそれぞれ領域 D_i の誘電率、透磁率である。

次に、境界条件を示す。いま、 $x^a \in D_a$ 、 $x^b \in D_b$

とするとき、 $x^0 \in (\partial D_a \cap \partial D_b)$ における境界条件は次式で与えられる。

$$\lim_{x^a \rightarrow x^0} \mathbf{E}(x^a) \cdot \mathbf{T}(x^0) = \lim_{x^b \rightarrow x^0} \mathbf{E}(x^b) \cdot \mathbf{T}(x^0) \quad (3)$$

$$\lim_{x^a \rightarrow x^0} \mathbf{H}(x^a) \cdot \mathbf{T}(x^0) = \lim_{x^b \rightarrow x^0} \mathbf{H}(x^b) \cdot \mathbf{T}(x^0) \quad (4)$$

ここに、 $\mathbf{T}$ は x^0 における任意の接線ベクトルである。

また、 ∂D_i は領域 D_i の境界である。

更に、 $\mathbb{R}^3$ を構成する N 個の部分領域のうち領域 D_I のみ無限遠を含み、入射波 $\mathbf{E}^{\text{inc}}$ 、 $\mathbf{H}^{\text{inc}}$ が存在するものとする。領域 D_I における $\mathbf{E}$ 、 $\mathbf{H}$ の散乱成分 $\mathbf{E}^{\text{sca}} = \mathbf{E} - \mathbf{E}^{\text{inc}}$ 、 $\mathbf{H}^{\text{sca}} = \mathbf{H} - \mathbf{H}^{\text{inc}}$ は $|x| \rightarrow \infty$ において、次の放射条件を満たすものとする。

$$\left| \sqrt{\epsilon^I} \mathbf{E}^{\text{sca}} - \sqrt{\mu^I} \mathbf{H}^{\text{sca}} \times \frac{\mathbf{x}}{|\mathbf{x}|} \right| \leq \frac{c}{|\mathbf{x}|^2}$$

$$\left| \sqrt{\epsilon^I} \mathbf{E}^{\text{sca}} \times \frac{\mathbf{x}}{|\mathbf{x}|} + \sqrt{\mu^I} \mathbf{H}^{\text{sca}} \right| \leq \frac{c}{|\mathbf{x}|^2}$$

ここに、 c は定数である。

(2) 境界積分方程式

3次元 Maxwell 方程式の基本解 Γ_{ip} は次式

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

を満たし、次式のように与えられる。

$$\Gamma_{ip} = \left(\frac{1}{k^2} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_p} + \delta_{ip} \right) G$$

ここに、 k は波数であり、 $k = \omega \sqrt{\epsilon \mu}$ である。また、 G は3次元 Helmholtz 方程式の基本解であり、次のように与えられる。

$$G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \frac{e^{ik|\mathbf{x} - \mathbf{y}|}}{4\pi|\mathbf{x} - \mathbf{y}|}$$

今、 $x \in D_i$ とする。すると、 x において、 $\mathbf{E}$ 、 $\mathbf{H}$ は次のように積分形で表示される。

$$\mathbf{E}(x) = \delta_{iI} \mathbf{E}^{\text{inc}}(x) + \int_{\partial D_i} \left(\mathbf{m}^i \times (\nabla_y G_i) - i\omega\mu^i \mathbf{j}^i G_i + \frac{i}{\omega\epsilon} \nabla_y G_i \text{div}_S \mathbf{j}^i \right) dS_y \quad (5)$$

$$\mathbf{H}(x) = \delta_{iI} \mathbf{H}^{\text{inc}}(x) + \int_{\partial D_i} \left(-\mathbf{j}^i \times (\nabla_y G_i) - i\omega\epsilon^i \mathbf{m}^i G_i + \frac{i}{\omega\mu^i} \nabla_y G_i \text{div}_S \mathbf{m}^i \right) dS_y \quad (6)$$

ここに、 G の下付添字は領域番号をあらわす。また、 $\mathbf{m}^i$ 、 $\mathbf{j}^i$ はそれぞれ領域 i についての表面磁流、表面電流ベクトルであり、以下のように定義される。

$$\mathbf{m}^i(y) = \mathbf{E}(y) \times \mathbf{n}^i(y), \quad \mathbf{j}^i(y) = \mathbf{n}^i(y) \times \mathbf{H}(y)$$

ここに、 $\mathbf{n}^i$ は領域 D_i の外向き単位法線ベクトルである。 div_S は面発散であり、次式で定義される。

$$\text{div}_S \phi = -(\nabla \times (\phi \times \mathbf{n})) \cdot \mathbf{n}$$

境界条件 (3)、(4) を考慮し、式 (5)、(6) に試験ベクトル $t(x)$ を掛けて x について積分すると、次の境界積分

方程式が得られる。

$$\begin{aligned}
& -(\delta_{aI} - \delta_{bI}) \int_{S_t} \mathbf{t}(x) \cdot \mathbf{E}^{\text{inc}}(x) dS_x \\
& = \int_{S_t} \int_{\partial D_a(x)} \{ \mathbf{t}(x) \cdot (\mathbf{m}^a(y) \times \nabla_y G_a(x-y)) \\
& - i\omega\mu^a \mathbf{t}(x) \cdot \mathbf{j}^a(y) G_a(x-y) \\
& + \frac{i}{\omega\epsilon^a} \text{div}_S \mathbf{t}(x) \text{div}_S \mathbf{j}^a(y) G_a(x-y) \} dS_y dS_x \\
& - \int_{S_t} \int_{\partial D_b(x)} \{ \mathbf{t}(x) \cdot (\mathbf{m}^b(y) \times \nabla_y G_b(x-y)) \\
& - i\omega\mu^b \mathbf{t}(x) \cdot \mathbf{j}^b(y) G_b(x-y) \\
& + \frac{i}{\omega\epsilon^b} \text{div}_S \mathbf{t}(x) \text{div}_S \mathbf{j}^b(y) G_b(x-y) \} dS_y dS_x \quad (7) \\
& - (\delta_{aI} - \delta_{bI}) \int_{S_t} \mathbf{t}(x) \cdot \mathbf{H}^{\text{inc}}(x) dS_x \\
& = \int_{S_t} \int_{\partial D_a(x)} \{ -\mathbf{t}(x) \cdot (\mathbf{j}^a(y) \times \nabla_y G_a(x-y)) \\
& - i\omega\epsilon^a \mathbf{t}(x) \cdot \mathbf{m}^a(y) G_a(x-y) \\
& + \frac{i}{\omega\mu^a} \text{div}_S \mathbf{t}(x) \text{div}_S \mathbf{m}^a(y) G_a(x-y) \} dS_y dS_x \\
& - \int_{S_t} \int_{\partial D_b(x)} \{ -\mathbf{t}(x) \cdot (\mathbf{j}^b(y) \times \nabla_y G_b(x-y)) \\
& - i\omega\epsilon^b \mathbf{t}(x) \cdot \mathbf{m}^b(y) G_b(x-y) \\
& + \frac{i}{\omega\mu^b} \text{div}_S \mathbf{t}(x) \text{div}_S \mathbf{m}^b(y) G_b(x-y) \} dS_y dS_x \quad (8)
\end{aligned}$$

ここに、 $\mathbf{t}$ は $S = \partial D_1 \cup \dots \cup \partial D_N$ 上で定義された接ベクトルであり、 S_t は $\mathbf{t}$ の台である。また、領域 $D_a(x)$ 、 $D_b(x)$ は、点 $x \in S_t$ において互いに接する領域である。さらに、 $S_\kappa = S_t \cap \partial D_\kappa \neq \emptyset$ であるとき、 S_κ において

$$\mathbf{t}'(x) = \begin{cases} +\mathbf{t}(x) \times \mathbf{n}^\kappa & (D_a(x) = D_\kappa) \\ -\mathbf{t}(x) \times \mathbf{n}^\kappa & (D_b(x) = D_\kappa) \end{cases}$$

は区分的に連続であって、不連続線上でも接線成分が連続であるとする。

(3) 高速多重極法

本項では、高速多重極法に必要な諸式を示す。

周波数域波動問題における高速多重極法においては、基本解の展開方法が2種類存在し、それぞれ

- ・級数展開型多重極法 (低周波域に用いる)
- ・diagonal form (高周波域で用いる⁷⁾)

と呼ばれる。本手法では、大谷¹³⁾が提案した切替えアルゴリズムを用いることにより、多重極法のツリーのレベル毎に、上記の2つの展開方法のうち適切な方を選択して計算する。

まず最初に、級数展開型多重極法の定式化を行う。定式化の準備として、3次元 Helmholtz 方程式の基本解 G の多重極展開に関連する諸式を示す。

G は次のように多重極展開される。

$$\begin{aligned}
G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) &= \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \\
&= \frac{ik}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n (2n+1) \tilde{I}_n^m(\vec{Oy}) O_n^m(\vec{Ox}) \quad (9)
\end{aligned}$$

ただし、 $|\vec{Ox}| > |\vec{Oy}|$ である。また、 O_n^m 、 $\tilde{I}_n^m$ は以下で定義される。

$$\begin{aligned}
O_n^m(\vec{Ox}) &= h_n^{(1)}(k|\vec{Ox}|) Y_n^m \left(\frac{\vec{Ox}}{|\vec{Ox}|} \right) \\
\tilde{I}_n^m(\vec{Ox}) &= j_n(k|\vec{Ox}|) \bar{Y}_n^m \left(\frac{\vec{Ox}}{|\vec{Ox}|} \right)
\end{aligned}$$

ここに、 $h_n^{(1)}$ は n 次の第1種球 Hankel 関数であり、 j_n は n 次の球 Bessel 関数である。また、 Y_n^m は球面調和関数である。

O_n^m 、 $\tilde{I}_n^m$ は次のように展開できる。

$$\begin{aligned}
\tilde{I}_n^m(\vec{O'y}) &= \sum_{n'=0}^{\infty} \sum_{m'=-n'}^{n'} \sum_{l \in \mathcal{W}(n,n',m,m')} (2n'+1) \\
&\times (-1)^{m'} W_{n,n',m,m',l} \tilde{I}_{n'}^{m'}(\vec{O'y}) I_l^{-m-m'}(\vec{O'O}) \quad (10)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
O_n^m(\vec{Ox}) &= \sum_{n'=0}^{\infty} \sum_{m'=-n'}^{n'} \sum_{l \in \mathcal{W}(n,n',m,m')} (2n'+1) \\
&\times (-1)^{m+n'} W_{n,n',m,m',l} I_{n'}^{m'}(\vec{x\bar{x}_0}) O_l^{m+m'}(\vec{Ox_0}) \quad (11)
\end{aligned}$$

ただし、 $|\vec{x\bar{x}_0}| < |\vec{Ox_0}|$ である。 I_n^m は次のように定義される関数である。

$$I_n^m(\vec{Ox}) = j_n(k|\vec{Ox}|) Y_n^m \left(\frac{\vec{Ox}}{|\vec{Ox}|} \right)$$

また、 $W_{n,n',m,m',l}$ は次のように Wigner 3-j symbol¹⁵⁾ に関連付けられる係数である。

$$\begin{aligned}
W_{n,n',m,m',l} &= (2l+1) i^{n'-n+l} \\
&\times \begin{pmatrix} n & n' & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n & n' & l \\ m & m' & -m-m' \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

ここに、集合 $\mathcal{W}(n,n',m,m')$ は次式で定義される。

$$\begin{aligned}
\mathcal{W}(n,n',m,m') &= \{l \mid l \in \mathbb{Z}, n+n'+l: \text{even}, \\
&\max\{|m+m'|, |n-n'|\} \leq l \leq n+n'\}
\end{aligned}$$

次に、 $\mathbf{E}$ 、 $\mathbf{H}$ の積分表示を示す。観測点 x が ∂D_i 上にないとき、 $\mathbf{E}$ 、 $\mathbf{H}$ は以下のような、 G の多重 curl を

用いた形で表現される。

$$E_i(x) = \frac{1}{k^2} \int_{\partial D_i} \left(-e_{pqr} e_{rsj} e_{jki} \frac{\partial}{\partial y_s} \frac{\partial}{\partial y_q} \frac{\partial}{\partial x_k} G(x-y) m_p(y) + i\omega \mu e_{pqj} e_{jki} \frac{\partial}{\partial y_q} \frac{\partial}{\partial x_k} G(x-y) j_p(y) \right) dS_y \quad (12)$$

$$H_i(x) = \frac{1}{k^2} \int_{\partial D_i} \left(e_{pqr} e_{rsj} e_{jki} \frac{\partial}{\partial y_s} \frac{\partial}{\partial y_q} \frac{\partial}{\partial x_k} G(x-y) j_p(y) + i\omega \epsilon e_{pqj} e_{jki} \frac{\partial}{\partial y_q} \frac{\partial}{\partial x_k} G(x-y) m_p(y) \right) dS_y \quad (13)$$

以上で準備された諸式を用いて、以下では級数展開型多重極法の定式化を行う。積分表示式 (12)、(13) と、 G の多重極展開式 (9) から、展開中心 O に関する多重極モーメント $M_{j,n,m}^{\{E,H\}}(O)$ を次のように定義すれば良いことが分かる。

$$M_{j,n,m}^E(O) = \int \left(-k^2 \tilde{I}_n^m(y) m_j(y) - \frac{\partial}{\partial y_p} \frac{\partial}{\partial y_j} \tilde{I}_n^m(y) m_p(y) + i\omega \mu e_{pqj} \frac{\partial}{\partial y_q} \tilde{I}_n^m(y) j_p(y) \right) dS_y \quad (14)$$

$$M_{j,n,m}^H(O) = \int \left(k^2 \tilde{I}_n^m(y) j_j(y) + \frac{\partial}{\partial y_p} \frac{\partial}{\partial y_j} \tilde{I}_n^m(y) j_p(y) + i\omega \epsilon e_{pqj} \frac{\partial}{\partial y_q} \tilde{I}_n^m(y) m_p(y) \right) dS_y \quad (15)$$

多重極モーメントの展開中心の移動公式 (M2M 公式) は、式 (10) を用いると、次のように与えられる。

$$M_{j,n,m}^{\{E,H\}}(O') = \sum_{n'=0}^{\infty} \sum_{m'=-n'}^{n'} \sum_{l \in \mathcal{W}(n',n,m,m')} (2n'+1) (-1)^{m'} W_{n',n',m',m',l} \tilde{I}_l^{-m-m'}(\vec{O'O}) M_{j,n',-m'}^{\{E,H\}}(O) \quad (16)$$

さらに、多重極モーメントから局所展開係数への変換公式 (M2L 公式) は、式 (11) を用いると次のように与えられる。

$$L_{j,n,m}^{\{E,H\}}(x_0) = \sum_{n'=0}^{\infty} \sum_{m'=-n'}^{n'} \sum_{l \in \mathcal{W}(n',n,m,m')} (2n'+1) W_{n',n',m',m',l} \tilde{O}_l^{-m-m'}(\vec{Ox_0}) M_{j,n',-m'}^{\{E,H\}}(O) \quad (17)$$

なお、上式において無限和を p 項で打ち切った場合、上式をそのまま用いると、計算量は $O(p^5)$ になる。しかし、実際の数値計算においては、座標の回転移動と漸化式を用いることにより、計算量を $O(p^3)$ に抑えている¹⁶⁾。

局所展開係数の展開中心の移動公式 (L2L) は、式

(10) を用いると、次のように与えられる。

$$L_{j,n,m}^{\{E,H\}}(x_1) = \sum_{n'=0}^{\infty} \sum_{m'=-n'}^{n'} \sum_{l \in \mathcal{W}(n',n,m',-m)} (2n'+1) (-1)^m W_{n',n,m',-m,l} \tilde{I}_l^{m-m'}(\vec{x_0x_1}) L_{j,n',m'}^{\{E,H\}}(x_0) \quad (18)$$

局所展開係数を用いて、 E 、 H は次のように計算される。

$$E_i(x) = \frac{i}{4\pi k} \sum_n \sum_m (2n+1) e_{ijk} L_{j,n,m}^E(O') \frac{\partial}{\partial x_k} \tilde{I}_n^m(\vec{O'x}) \quad (19)$$

$$H_i(x) = \frac{i}{4\pi k} \sum_n \sum_m (2n+1) e_{ijk} L_{j,n,m}^H(O') \frac{\partial}{\partial x_k} \tilde{I}_n^m(\vec{O'x}) \quad (20)$$

次に、diagonal form の定式化を行う。

最初に準備として、3 次元 Helmholtz 方程式の基本解 G の平面波展開に関連する諸式を示す。

G は次のように平面波展開される。

$$G(x-y) = \frac{ik}{(4\pi)^2} \int_{|\hat{k}=1} e^{i(x-X) \cdot k \hat{k}} e^{-i(y-Y) \cdot k \hat{k}} \times \left(\sum_n \sum_m i^n (2n+1) \overline{Y}_n^m(\hat{k}) O_n^m(X-Y) \right) dS_{\hat{k}} \quad (21)$$

ここに、 X 、 Y はそれぞれ x 、 y の近傍の展開中心であり、 $|X-Y| > |x-X+Y-y|$ 、 $|X-Y| > |x-X|$ 、 $|X-Y| > |y-Y|$ をみたすものとする。上式の右辺第 3 括弧内は次のように変形できる。

$$\sum_n i^n (2n+1) P_n \left(\hat{k} \cdot \frac{X-Y}{|X-Y|} \right) h_n^{(1)}(k|X-Y|) \quad (22)$$

ここに、 P_n は n 次の Legendre 多項式である。

また、 $e^{ix \cdot k \hat{k}}$ は次のような級数展開表示を持つ。

$$e^{ix \cdot k \hat{k}} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n i^n (2n+1) \tilde{I}_n^m(x) Y_n^m(\hat{k}) \quad (23)$$

以上で準備された式を用いて、diagonal form の定式化を行う。平面波展開式 (21) と $e^{ix \cdot k \hat{k}}$ の級数展開式 (23) を E 、 H の積分表示式 (12)、(13) に、代入する。さらに、 $\hat{k}$ の極座標を $\hat{k} = (1, \theta, \phi)$ と表す。すると、点 O に関する diagonal form の多重極モーメント $F_j^{\{E,H\}}(\theta, \phi, O)$ は $M_{j,n,m}^{\{E,H\}}(O)$ から次のようにして計算できることが分かる。(M2F 公式)

$$F_j^{\{E,H\}}(\theta, \phi, O) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n i^{-n} (2n+1) Y_n^m(\theta, \phi) M_{j,n,m}^{\{E,H\}}(O) \quad (24)$$

さらに、平面波展開式 (21) を用いると、diagonal form のモーメントの展開中心の移動公式 (F2F 公式) が次

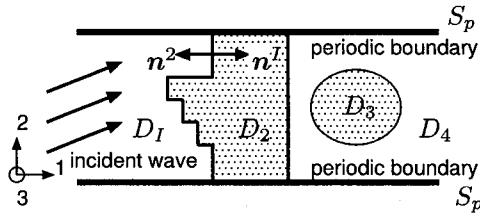


図-2 周期境界値問題

のように与えられることが分かる。

$$F_j^{\{E,H\}}(\theta, \phi, y_1) = F_j^{\{E,H\}}(\theta, \phi, y_0) e^{-ik\hat{k} \cdot \vec{y}_1 \vec{y}_0} \quad (25)$$

次に、式 (21)、(22) より、diagonal form のモーメントから局所展開係数への移動公式 (F2H 公式) は次のように得られる。

$$H_j^{\{E,H\}}(\theta, \phi, x_0) = F_j^{\{E,H\}}(\theta, \phi, O) \sum_{n=0}^{\infty} i^n (2n+1) \times P_n \left(\hat{k} \cdot \frac{\vec{Ox}_0}{|Ox_0|} \right) h_n^{(1)} \left(k |Ox_0| \right) \quad (26)$$

ここに、 $H_j^{\{E,H\}}(\theta, \phi, x_0)$ は、点 x_0 に関する、diagonal form の局所展開係数である。

Diagonal form の局所展開中心の移動公式 (H2H 公式) は次のように与えられる。

$$F_j^{\{E,H\}}(\theta, \phi, x_1) = F_j^{\{E,H\}}(\theta, \phi, x_0) e^{ik\hat{k} \cdot \vec{x}_0 \vec{x}_1} \quad (27)$$

Diagonal form の局所展開係数から級数展開型多重極法の局所展開係数への変換公式 (H2L 公式) は次式で与えられる。

$$L_{j,n,m}^{\{E,H\}}(x_0) = \frac{i^n}{4\pi} \int_{|\hat{k}|=1} H_j^{\{E,H\}}(\theta, \phi, x_0) Y_n^m(\hat{k}) dS_{\hat{k}} \quad (28)$$

2.2 周期境界値問題の定式化

次に、周期境界条件を課す場合の定式化を行う。

(1) 問題設定

いま、解析領域を

$$D = ((-\infty, \infty), [-L/2, L/2], [-L/2, L/2])$$

とし、図-2 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 Maxwell 方程式 (1)、(2) が満たされるものとする。

無限遠 $x_1 \rightarrow -\infty$ を含む領域を D_I とし、 D_I では平面入射波

$$E^{\text{inc}} = a^{\text{inc}} e^{ik^{\text{inc}} \cdot x}$$

$$H^{\text{inc}} = b^{\text{inc}} e^{ik^{\text{inc}} \cdot x}$$

が存在するものとする。ここに、 a^{inc} 、 b^{inc} は入射波の振幅であり、 k^{inc} は入射波の波数ベクトルである。

また、周期境界 $S_p = \{x | x \in \partial D, |x_2| = L/2 \text{ or } |x_3| = L/2\}$ では以下のような周期境界条件

を課されているとする。

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

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

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

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

ここに、 β_i は $x_i = -L/2$ と $x_i = L/2$ の間の位相差であり、

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

と表される。

(2) 周期 Green 関数

3次元 Maxwell 方程式における、周期境界値条件を満たす Green 関数 (周期 Green 関数) を Γ_{ip}^P とする。 Γ_{ip}^P は次の支配方程式と周期境界条件を満たす。

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

$$\Gamma_{ip}^P(x_1, L/2, x_3) = e^{i\beta_2} \Gamma_{ip}^P(x_1, -L/2, x_3) \quad (29)$$

$$\Gamma_{ip}^P(x_1, x_2, L/2) = e^{i\beta_3} \Gamma_{ip}^P(x_1, x_2, -L/2) \quad (30)$$

$$\frac{\partial \Gamma_{ip}^P}{\partial x_2}(x_1, L/2, x_3) = e^{i\beta_2} \frac{\partial \Gamma_{ip}^P}{\partial x_2}(x_1, -L/2, x_3) \quad (31)$$

$$\frac{\partial \Gamma_{ip}^P}{\partial x_3}(x_1, x_2, L/2) = e^{i\beta_3} \frac{\partial \Gamma_{ip}^P}{\partial x_3}(x_1, x_2, -L/2) \quad (32)$$

Γ_{ip}^P は次のような格子和で表現される。

$$\Gamma_{ip}^P(x-y) = \sum_{\omega \in \mathcal{L}} \Gamma_{ip}(x-y-\omega) e^{i\beta \cdot \omega} \quad (33)$$

ここに、 $\mathcal{L} = \{(0, \omega_2, \omega_3) | \omega_2 = sL, \omega_3 = tL, s, t \in \mathbb{Z}\}$ である。

G^P を 3次元 Helmholtz 方程式における、周期境界条件を満たす Green 関数とすると、 Γ_{ip}^P は G^P を用いて、次式で与えられる。

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

ここに、 G^P は次の支配方程式

$$\Delta G^P(x-y) + k^2 G^P(x-y) = -\delta(x-y) \quad \text{in } \mathbb{R}^3$$

及び、式 (29)-(32) において Γ_{ip}^P を G^P で置き換えた周期境界条件を満たす。 G^P は次のような格子和表現を有する。

$$G^P(x-y) = \sum_{\omega \in \mathcal{L}} e^{i\beta \cdot \omega} \frac{e^{ik|x-y-\omega|}}{4\pi|x-y-\omega|}$$

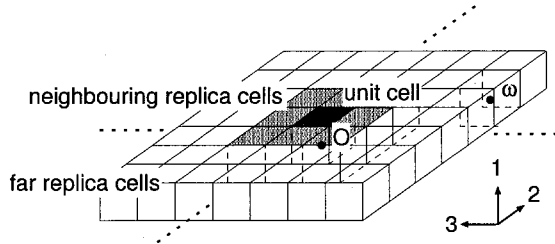


図-3 レプリカセル

(3) 境界積分方程式

前項で計算された G^P を用いると、 $S \setminus S_p$ において次の境界積分方程式が得られる。

$$\begin{aligned}
 & -(\delta_{aI} - \delta_{bI}) \int_{S_t} \mathbf{t}(x) \cdot \mathbf{E}^{\text{inc}}(x) dS_x \\
 & = \int_{S_t} \int_{\partial D_a(x) \setminus S_p} \{ \mathbf{t}(x) \cdot (\mathbf{m}^a(y) \times \nabla_y G_a^P(x-y)) \\
 & - i\omega \mu^a \mathbf{t}(x) \cdot \mathbf{j}^a(y) G_a^P(x-y) \\
 & + \frac{i}{\omega \epsilon^a} \text{div}_S \mathbf{t}(x) \text{div}_S \mathbf{j}^a(y) G_a^P(x-y) \} dS_y dS_x \\
 & - \int_{S_t} \int_{\partial D_b(x) \setminus S_p} \{ \mathbf{t}(x) \cdot (\mathbf{m}^b(y) \times \nabla_y G_b^P(x-y)) \\
 & - i\omega \mu^b \mathbf{t}(x) \cdot \mathbf{j}^b(y) G_b^P(x-y) \\
 & + \frac{i}{\omega \epsilon^b} \text{div}_S \mathbf{t}(x) \text{div}_S \mathbf{j}^b(y) G_b^P(x-y) \} dS_y dS_x \quad (34)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -(\delta_{aI} - \delta_{bI}) \int_{S_t} \mathbf{t}(x) \cdot \mathbf{H}^{\text{inc}}(x) dS_x \\
 & = \int_{S_t} \int_{\partial D_a(x) \setminus S_p} \{ -\mathbf{t}(x) \cdot (\mathbf{j}^a(y) \times \nabla_y G_a^P(x-y)) \\
 & - i\omega \epsilon^a \mathbf{t}(x) \cdot \mathbf{m}^a(y) G_a^P(x-y) \\
 & + \frac{i}{\omega \mu^a} \text{div}_S \mathbf{t}(x) \text{div}_S \mathbf{m}^a(y) G_a^P(x-y) \} dS_y dS_x \\
 & - \int_{S_t} \int_{\partial D_b(x) \setminus S_p} \{ -\mathbf{t}(x) \cdot (\mathbf{j}^b(y) \times \nabla_y G_b^P(x-y)) \\
 & - i\omega \epsilon^b \mathbf{t}(x) \cdot \mathbf{m}^b(y) G_b^P(x-y) \\
 & + \frac{i}{\omega \mu^b} \text{div}_S \mathbf{t}(x) \text{div}_S \mathbf{m}^b(y) G_b^P(x-y) \} dS_y dS_x \quad (35)
 \end{aligned}$$

ここに $\mathbf{t}$ は試験ベクトルであり、 $S \setminus S_p$ 上で定義された接ベクトルである。また、 $S_t \subset (S \setminus S_p)$ は $\mathbf{t}$ の台である。さらに、領域 $D_a(x)$ 、 $D_b(x)$ は、点 $x \in S_t$ において互いに接する領域である。加えて、 $\mathbf{t}$ は式(7)、(8)の下で述べた連続条件を満たす。

上の積分方程式は異なる領域の界面上のみで解けば良く、周期境界 S_p 上では積分方程式を解く必要がないことに注意する。

(4) 周期多重極法

Γ_{ij}^P の格子和表現式(33)から、図-3のように、繰り返し単位(ユニットセル)と全く同じ構造のレプリカセルが $x_2 - x_3$ 平面に無限個繰り返していると解釈す

ることができる。

そこで、ユニットセルを多重極法のレベル0のセルに取り、レプリカセルをユニットセルに隣接しているものと、隣接していないものに分類する。これに対応して、 Γ^P を次のように隣接したレプリカセルとユニットセル自身からの影響を表す Γ^{PN} と、隣接していないレプリカセルからの影響 Γ^{PF} の和に分ける。

$$\Gamma_{ij}^P = \Gamma_{ij}^{\text{PF}} + \Gamma_{ij}^{\text{PN}}$$

ここに、

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

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

であり、 $\mathcal{L}' = \{(0, \omega_2, \omega_3) \mid \omega_2 = sL, \omega_3 = tL, s, t \in \mathbb{Z}, |s| \geq 2 \text{ or } |t| \geq 2\}$ 、 $\mathcal{L}'' = \mathcal{L} \setminus \mathcal{L}'$ である。

$\Gamma_{ij}^{\text{PN}}(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ に関する計算は通常の実多重極法を用いて実行することができるため、ここでは $\Gamma_{ij}^{\text{PF}}(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ の評価法について述べる。

今、基本解 Γ_{ip} は次のように平面波展開される。

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{ij}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) & = -\frac{1}{k^2} e_{jpk} e_{kqi} \frac{\partial}{\partial x_p} \frac{\partial}{\partial y_q} G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \\
 & = -\frac{ik}{(4\pi)^2} \int_{|\mathbf{k}|=1} \left(e_{jpk} \frac{\partial}{\partial x_p} e^{i(\mathbf{x}-\mathbf{X}) \cdot \mathbf{k}} \right) \\
 & \quad \times \left(e_{kqi} \frac{\partial}{\partial y_q} e^{-i(\mathbf{y}-\mathbf{Y}) \cdot \mathbf{k}} \right) \\
 & \quad \times \left(\sum_n \sum_m i^n (2n+1) \overline{Y}_n^m(\hat{\mathbf{k}}) O_n^m(\mathbf{X} - \mathbf{Y}) \right) dS_{\hat{\mathbf{k}}} \\
 & \quad \text{F2H formula}
 \end{aligned}$$

上式の、右辺第3括弧内がF2H公式に相当する部分である。上式を式(33)に代入することにより、次のような Γ_{ij}^{PF} の平面波展開式を得る。

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{ij}^{\text{PF}}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) & = -\frac{ik}{(4\pi)^2} \int_{|\mathbf{k}|=1} \left(e_{jpk} \frac{\partial}{\partial x_p} e^{i\mathbf{x} \cdot \mathbf{k}} \right) \left(e_{kqi} \frac{\partial}{\partial y_q} e^{-i\mathbf{y} \cdot \mathbf{k}} \right) \\
 & \quad \times \left(\sum_n \sum_m i^n (2n+1) \overline{Y}_n^m(\hat{\mathbf{k}}) \left(\sum_{\omega \in \mathcal{L}'} O_n^m(-\omega) e^{i\beta \cdot \omega} \right) \right) dS_{\hat{\mathbf{k}}} \\
 & \quad \text{periodic F2H formula}
 \end{aligned}$$

$dS_{\hat{\mathbf{k}}}$

上式から、隣接していないレプリカセルからの影響は、次の周期化されたF2H公式で計算できることが分かる。

$$\begin{aligned}
 H_j^{\{E, H\}}(\theta, \phi, O) & = F_j^{\{E, H\}}(\theta, \phi, O) \\
 & \quad \times \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n i^n (2n+1) \overline{Y}_n^m(\hat{\mathbf{k}}) \left(\sum_{\omega \in \mathcal{L}'} O_n^m(-\omega) e^{i\beta \cdot \omega} \right) \quad (36)
 \end{aligned}$$

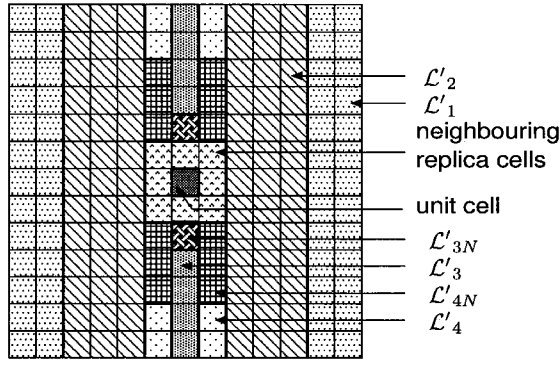


図-4 レプリカセルの分類

ここに、 $F_j^{[E,H]}(\theta, \phi, O)$ はレベル0のセル（つまりユニットセル）の多重極モーメントであり、 $H_j^{[E,H]}(\theta, \phi, O)$ はレベル0のセルの局所展開係数である。

同様に、級数展開型多重極法における周期化された M2L 公式は次式で与えられることが分かる。

$$L_{j,n,m}(O) = \sum_{n'=0}^{\infty} \sum_{m'=-n'}^{n'} \sum_{l \in W(n', n, m', m)} (2n' + 1) \times W_{n', n, m', m, l} M_{j, n', m'}(O) \left(\sum_{\omega \in \mathcal{L}'} \tilde{O}_l^{-m-m'}(-\omega) e^{i\beta \cdot \omega} \right) \quad (37)$$

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であり、 $L_{j,n,m}(O)$ はレベル0のセルの局所展開係数である。

式 (36)、(37) において

$$\sum_{\omega \in \mathcal{L}'} \tilde{O}_n^m(-\omega) e^{i\beta \cdot \omega}$$

の評価が本質的である。これについて次項で述べる。

2.3 $\sum_{\omega \in \mathcal{L}'} O_n^m(-\omega)$ の計算

本項では $\sum_{\omega \in \mathcal{L}'} O_n^m(-\omega)$ の算法について述べる。

O_n^m は次のような関係式を満たす。

$$O_{n+1}^m = \frac{1}{\sqrt{(n+m+1)(n-m+1)}} \times \left(\sqrt{(n-m)(n+m)} O_{n-1}^m - \frac{2n+1}{k} \frac{\partial}{\partial x_3} O_n^m \right) \\ O_{n+1}^{m+1} = \frac{1}{\sqrt{(n+m+1)(n+m+2)}} \times \left(-\sqrt{(n-m)(n-m-1)} O_{n-1}^{m+1} - \frac{2n+1}{k} 2 \frac{\partial}{\partial \bar{z}} O_n^m \right) \\ \text{ここに、} 2 \frac{\partial}{\partial \bar{z}} = \frac{\partial}{\partial x_1} + i \frac{\partial}{\partial x_2} \text{ である。従って、} \\ \sum_{\omega \in \mathcal{L}'} O_n^m(-\omega) \text{ を評価することは、}$$

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

を求めることに帰着される。

いま、図-4 で示すように $\mathcal{L}'$ を分類する。

$$\mathcal{L}' = \mathcal{L}'_1 + \mathcal{L}'_2 + \mathcal{L}'_3 + \mathcal{L}'_4$$

ここに、 $\mathcal{L}'_1, \mathcal{L}'_2, \mathcal{L}'_3, \mathcal{L}'_4$ は次のように定義される。

$$\mathcal{L}'_1 = \{(0, \omega_2, \omega_3) \mid |\omega_2| = sL, \omega_3 = tL, \\ s, t \in \mathbb{Z}, a \leq |s|\}$$

$$\mathcal{L}'_2 = \{(0, \omega_2, \omega_3) \mid |\omega_2| = sL, \omega_3 = tL, \\ s, t \in \mathbb{Z}, 2 \leq |s| \leq a-1\}$$

$$\mathcal{L}'_3 = \{(0, \omega_2, \omega_3) \mid \omega_2 = 0, \omega_3 = tL, \\ t \in \mathbb{Z}, 2 \leq |t|\}$$

$$\mathcal{L}'_4 = \{(0, \omega_2, \omega_3) \mid \omega_2 = \pm L, \omega_3 = tL, \\ t \in \mathbb{Z}, 2 \leq |t|\}$$

これに対応して、 S_{lm} を次のように分ける。

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

ここに、 S_{lm}^i は次のように定義される。

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

S_{lm}^i は、2次元の場合⁸⁾と同様に、Fourier 解析を用いて計算される。以下では、計算結果のみを示す。

$$S_{lm}^1 = \frac{i^{l+m-1}}{kL} \sum_{j=0}^{\infty} \xi_3^j \left(\int_{-\infty}^{\infty} (\xi_1 + p)^m \frac{e^{a(i\beta_2 - p)}}{p(1 - e^{i\beta_2 - p})} d\xi_1 \right. \\ \left. + \int_{-\infty}^{\infty} (\xi_1 - p)^m \frac{e^{a(-i\beta_2 - p)}}{p(1 - e^{-i\beta_2 - p})} d\xi_1 \right)$$

ここに、 $p = \sqrt{\xi_1^2 + \xi_3^2 - (kL)^2}$ 、 $\xi_3 = 2j\pi + \beta_3$ である。

$$S_{ml}^2 = i^{l+m} \frac{\pi}{kL} \sum_{\omega_2 = sL, 2 \leq s \leq a-1} (e^{i\beta_2 \omega_2} + (-1)^m e^{-i\beta_2 \omega_2}) \\ \times \sum_{j=-\infty}^{\infty} \xi_3^j \left(\sqrt{(kL)^2 - \xi_3^2} \right)^m H_m^{(1)} \left(\sqrt{(kL)^2 - \xi_3^2} \omega_2 \right)$$

ここに、 $\xi_3 = 2j\pi + \beta_3$ である。

$$S_{ml}^3 = \delta_{m0} \frac{1}{ikL} \left(e^{ib\beta_3} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{r^2 - (kL)^2}^{l-1} e^{-b\sqrt{r^2 - (kL)^2}}}{1 - e^{i\beta_3 - \sqrt{r^2 - (kL)^2}}} r dr \right. \\ \left. + (-1)^l e^{-ib\beta_3} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{r^2 - (kL)^2}^{l-1} e^{-b\sqrt{r^2 - (kL)^2}}}{1 - e^{-i\beta_3 - \sqrt{r^2 - (kL)^2}}} r dr \right) \\ + \sum_{\omega \in \mathcal{L}'_{3N}} O_0^0(-\omega) e^{i\beta \cdot \omega}$$

ここに、

$$\mathcal{L}'_{3N} = \{(0, \omega_2, \omega_3) \mid \omega_2 = 0, \omega_3 = tL, \\ t \in \mathbb{Z}, 2 \leq |t| \leq |b-1|\}$$

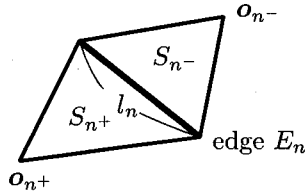


図-5 Rao-Wilton-Glisson 基底の台

$$\begin{aligned}
 S_{lm}^4 = & \frac{i^{m-1}}{kL} (e^{i\beta_2} + (-1)^m e^{-i\beta_2}) \\
 & \times \left(e^{ic\beta_3} \int_0^\infty \frac{\sqrt{r^2 - (kL)^2}^{l-1} e^{-c\sqrt{r^2 - (kL)^2}}}{1 - e^{i\beta_3 - \sqrt{r^2 - (kL)^2}}} r^{m+1} J_m(r) dr \right. \\
 & + (-1)^l e^{-ic\beta_3} \\
 & \times \left. \int_0^\infty \frac{\sqrt{r^2 - (kL)^2}^{l-1} e^{-c\sqrt{r^2 - (kL)^2}}}{1 - e^{-i\beta_3 - \sqrt{r^2 - (kL)^2}}} r^{m+1} J_m(r) dr \right) \\
 & + \sum_{\omega \in \mathcal{L}'_{4N}} O_0^0(-\omega) e^{i\beta \cdot \omega}
 \end{aligned}$$

ここに、

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}'_{4N} = & \{(0, \omega_2, \omega_3) \mid \omega_2 = \pm L, \omega_3 = tL, \\
 & t \in \mathbb{Z}, 2 \leq |t| \leq c-1\}
 \end{aligned}$$

$S_{lm}^1, S_{lm}^3, S_{lm}^4$ における積分は数値積分によって評価する。パラメータ a, b, c を大きくとるほど、これらの積分の収束が速くなるが、直接和の計算量が増えることに注意する。

2.4 基底関数

本研究での積分方程式の離散化は、Maxwell 方程式を扱う際の標準的な手法によった。すなわち、Galerkin 法を用い、積分方程式 (34)、(35) における m, j についての形状関数と、試験関数 $t(x)$ に Rao-Wilton-Glisson 基底¹⁴⁾を用いた。

以下、Rao-Wilton-Glisson 基底について説明する。いま、図-5 に示すように、ある辺 E_n に着目し、この辺の両側の三角形を S_{n+}, S_{n-} とする。これらの三角形の頂点のうち、辺 E_n の端点になっていない頂点の位置ベクトルを $\mathbf{o}_{n\pm}$ とする。このとき、辺 E_n に関する、三角形 S_{n+}, S_{n-} の内部での Rao-Wilton-Glisson 基底は、次のように与えられる。

$$f_n(x) = \begin{cases} \pm \frac{l_n}{2|S_{n\pm}|} (\mathbf{x} - \mathbf{o}_{n\pm}) & x \in S_{n\pm} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

ここに、 $|S_{n\pm}|$ は、三角形 $S_{n\pm}$ の面積であり、 l_n は辺 E_n の長さである。

Rao-Wilton-Glisson 基底を用いて表面ベクトル場 $\mathbf{m}, \mathbf{j}$ は次のように構成される。

$$\mathbf{m}(x) = \sum_{i=1}^{N_e} M_i \mathbf{f}_i(x), \quad \mathbf{j}(x) = \sum_{i=1}^{N_e} J_i \mathbf{f}_i(x)$$

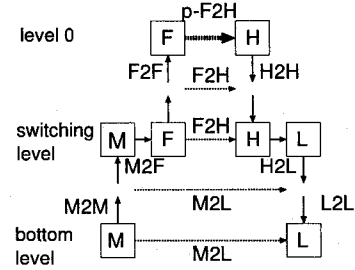


図-6 解析の手順 (diagonal form を用いる場合)

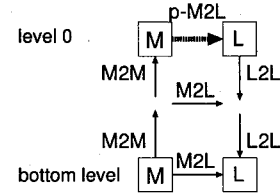


図-7 解析の手順 (級数展開型多重極法のみ用いる場合)

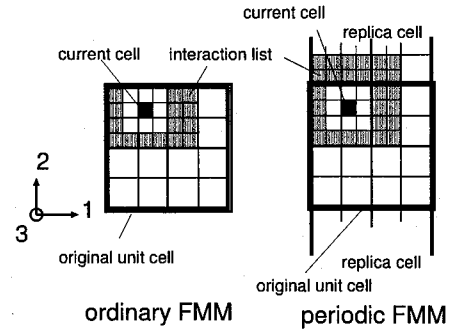


図-8 interaction list

ここに、 N_e は三角形要素の辺の総数であり、 i は各々の辺を表す指標である。

3. アルゴリズム

本手法では diagonal form の使用にあたって、大谷ら¹³⁾の切替えアルゴリズムを用いている。すなわち、レベル l におけるセルの辺の長さを d^l とするとき、 $kd^l \geq C_{\text{dia}}$ となるレベルでは diagonal form を用い、 $kd^l < C_{\text{dia}}$ となるレベルでは級数展開型多重極法を用いた。なお、 C_{dia} は切替えレベルを定めるパラメータである。本研究では、式 (21) を用いて計算した時の誤差が 10^{-5} を上回らないように、数値実験によって $C_{\text{dia}} = 28$ と定めた。なお、 $kd^0 < 28$ となる場合は、diagonal form を用いず、級数展開型多重極法のみ用いる。図-6 に diagonal form と級数展開型多重極法の両方を用いる場合の解析手順を、図-7 に級数展開型多重極法のみを用いる場合の解析手順を模式的に示す。

次に、周期多重極法における、レプリカセルからの影

響の算法について説明する。まず、レプリカセルを、ユニットセルに隣接するものとし、ないものに分ける。そして、隣接しないレプリカセルからの影響は、レベル0において周期 M2L 公式、あるいは周期 F2H 公式によって評価する。

一方、隣接するレプリカセルからの影響は、downward pass において計算する。隣接するレプリカセルからの影響を計算するには、M2L、F2H の interaction list を隣接するレプリカセルの内部に拡張すれば良い。図-8 に、通常多重極法の interaction list と、周期多重極法の拡張された interaction list を示す。

以下に、多重極法の計算手順を Fortran 擬コードで示す。

```
! upward pass
do level=最深レベル, 0, -1
  do icell=当該レベルの全てのセル
    if (icell がリーフ) then
      式 (14), (15), (24) を用いて多重極
      モーメントを計算
    else
      式 (16) or (25) を用いて、
      子セルの多重極モーメントを
      icell の多重極モーメントに加える
      (M2M, F2F)
    endif
  enddo
  if (level= 切替えレベル) then
    式 (24) を用いて級数展開型の多重極モーメント
    を diagonal form のモーメントに変換する。
    (M2F)
  endif
enddo

! level=0
式 (36) or (37) を用いて、レプリカセルからの
影響を局所展開係数に変換する。(周期 F2H, M2L)

! downward pass
do level=1, 最深レベル
  do icell=当該レベルの全てのセル
    ・ 式 (18) or (27) を用い、親セルの局所展開
    係数を icell の局所展開係数に変換
    (L2L, H2H)
    ・ 式 (17) or (26) を用い、
    拡張 interaction list 内のセルの
    モーメントを icell の局所展開係数に変換
    (M2L, F2H)
    if (icell がリーフ) then
      式 (19), (20), (28) を用いて
      ポテンシャルを計算
```

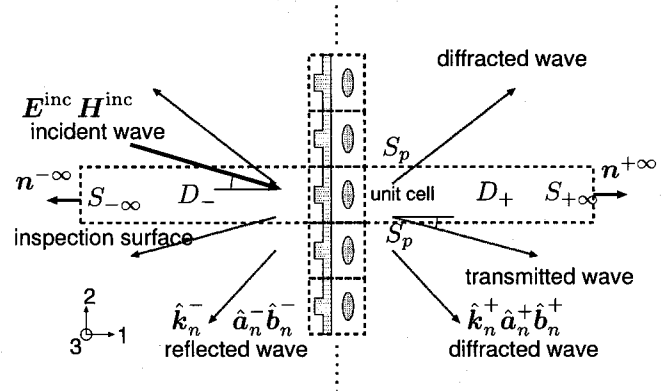


図-9 遠方場

```
endif
enddo
if (level = 切替えレベル) then
  式 (28) を用いて diagonal form の局所展開
  係数を級数展開型の局所展開係数に変換する。
  (H2L)
endif
enddo
```

4. 遠方場

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。そこで、本節では遠方場の構成方法について述べる。

$x_1 \rightarrow \pm\infty$ の極限では、 E 、 H は次のように平面波の重ね合わせで表現できる。

$$E^\pm = \sum_n \hat{a}_n^\pm e^{ik_n^\pm \cdot x} + \delta_\pm E^{\text{inc}} \quad (38)$$

$$H^\pm = \sum_n \hat{b}_n^\pm e^{ik_n^\pm \cdot x} + \delta_\pm H^{\text{inc}} \quad (39)$$

ここに、 n は多重指数であり、 $n = (n_2, n_3)$ である。また、 $\delta_+ = 0, \delta_- = 1$ である。さらに、 $k_n^\pm$ は次式で与えられる。

$$k_n^\pm = \begin{pmatrix} \pm \sqrt{k^2 - \frac{1}{L^2}(\beta_2 + 2n_2\pi)^2 - \frac{1}{L^2}(\beta_3 + 2n_3\pi)^2} \\ \frac{1}{L}(\beta_2 + 2n_2\pi) \\ \frac{1}{L}(\beta_3 + 2n_3\pi) \end{pmatrix}$$

n に関する和は $k_n^\pm$ の第 1 成分の根号内が正であるような $n = (n_2, n_3)$ に対して実行する。

遠方場の模式的図を図-9 に表す。

なお、 $\hat{a}_n^\pm$ と $\hat{b}_n^\pm$ の間には次の関係が成り立つことに注意する。

$$\hat{b}_n^\pm = \frac{1}{\omega\mu} k_n^\pm \times \hat{a}_n^\pm$$

いま、解析領域 D の部分領域の中で、無限遠 $x_1 \rightarrow \pm\infty$ を含む領域を $D_{\pm}$ とする。さらに、図-9 に点線で示されるような inspection surface を考え、 $D_{\pm}$ のうち inspection surface より内側の部分を $D'_{\pm}$ とする。このとき、次の Green 公式が成り立つ。

$$\int_{\partial D'_{\pm}} ((\nabla \times \mathbf{E}_{\pm}^1) \cdot (\mathbf{E}_{\pm}^2 \times \mathbf{n}) - (\nabla \times \mathbf{E}_{\pm}^2) \cdot (\mathbf{E}_{\pm}^1 \times \mathbf{n})) dS = 0$$

ここに、上の Green 公式に $\mathbf{E}^1$ に式 (38) の遠方場表現を代入し、 $\mathbf{E}^2$ には試験関数として以下の関数を代入する。

$$\mathbf{E}_{\pm}^2 = \tilde{\mathbf{a}}_m e^{-ik_m^{\pm} \cdot \mathbf{x}}$$

さらに、 $S_{\pm\infty}$ を無限遠へ極限移行する。すると、次式を得る。

$$\tilde{\mathbf{a}}_m^{\pm} \cdot \tilde{\mathbf{a}}_m^{\pm} = \frac{\omega\mu}{2L^2(k_m^{\pm})_1} \int_{\partial D'_{\pm} \setminus (S_p \cup S_{\pm\infty})} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{m}_2^{\pm} \times \mathbf{j}_1 - \mathbf{m}_1 \times \mathbf{j}_2^{\pm}) dS$$

ここに、 $\mathbf{m}_1$ 、 $\mathbf{j}_1$ は数値解析によって得られた $\mathbf{E}$ 、 $\mathbf{H}$ から計算される表面磁流、電流ベクトルであり、 $\mathbf{m}_2^{\pm}$ 、 $\mathbf{j}_2^{\pm}$ は次式で与えられる。

$$\mathbf{m}_2^{\pm} = (\tilde{\mathbf{a}}_m^{\pm} \times \mathbf{n}) e^{-ik_m^{\pm} \cdot \mathbf{x}}$$

$$\mathbf{j}_2^{\pm} = -\frac{1}{\omega\mu} \mathbf{n} \times (\mathbf{k}_m^{\pm} \times \tilde{\mathbf{a}}_m^{\pm}) e^{-ik_m^{\pm} \cdot \mathbf{x}}$$

$\tilde{\mathbf{a}}_m^{\pm}$ として $\mathbf{k}_m^{\pm}$ に直交する 2 つの基底をとり、それぞれに対して $\tilde{\mathbf{a}}_m^{\pm} \cdot \tilde{\mathbf{a}}_m^{\pm}$ を計算することにより、 $\tilde{\mathbf{a}}_m^{\pm}$ を求めることができる。

無限遠における平面 $S_{\pm\infty}$ を透過するエネルギーは次式で計算できる。

$$\begin{aligned} \text{Re} \int_{S_{\pm\infty}} (\mathbf{E}^{\pm} \times \bar{\mathbf{H}}^{\pm}) \cdot \mathbf{n}^{\pm\infty} dS \\ = L^2 \sum_n \text{Re} (\tilde{\mathbf{a}}_n^{\pm} \times \bar{\tilde{\mathbf{b}}}_n^{\pm}) \cdot \mathbf{n}^{\pm\infty} \end{aligned} \quad (40)$$

5. 数値計算

5.1 精度の検証

最初に本手法の計算精度を検証するため、数値計算結果を解析解と比較した。取り扱ったモデルは図-10 で示す誘電体平行層積層スラブである。繰り返し単位は図-11 に示す通りである。各層の誘電率、波数は図中に示す通りである。

解析の詳細について述べる。線形方程式の求解には反復解法 Flexible GMRES (FGMRES)¹⁰⁾ を用いた。FGMRES のアルゴリズムは GMRES と類似しているが、毎回反復毎に異なる前処理を行うことができることが特徴である。このため、前処理に反復解法を用いることができる。

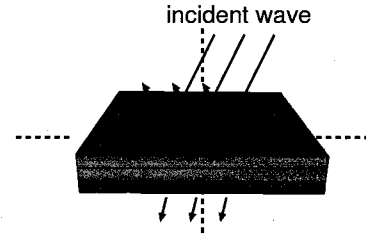


図-10 誘電体積層スラブ

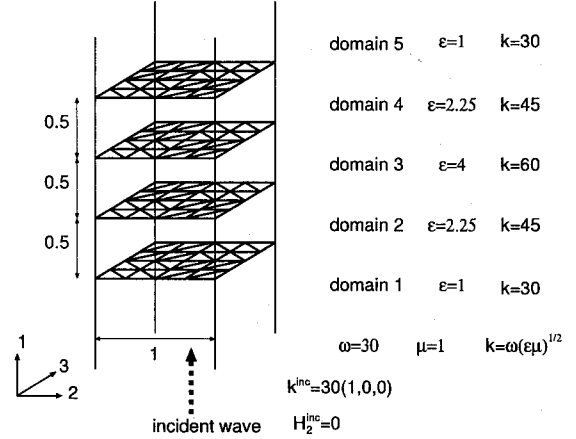


図-11 解析モデル

FGMRES の収束判定条件は 10^{-3} または 10^{-4} とした。前処理行列は多重極法の直接計算部分とし、前処理行列の逆行列を作用させる操作には GMRES を用いた。前処理用 GMRES の収束判定条件は 10^{-1} とし、収束条件をみたすか、あるいは反復回数が 100 回に達するかのいずれかの場合に反復計算を打ち切った。

要素分割は平面三角形要素を用い、1 波長当たり約 12 要素を配置した。本モデルの全要素数は 83408 であり、全自由度は 250224 である。

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 にて行った。OpenMP を用いて並列化を行い、32CPU を用いた。

数値解析結果を表-1 に示す。表中の error は表面電流ベクトル $\mathbf{j}$ 、表面磁流ベクトル $\mathbf{m}$ の要素重心での値と解析解との相対誤差の平均値である。FGMRES の収束判定条件が 10^{-3} とした場合と 10^{-4} とした場合のいずれにおいても、誤差は 2% を下回っている。このことから、本手法は工学的に十分な精度を有していると結論できる。

FGMRES の収束状況を図-12 に示す。この図から、残差が 2.0×10^{-3} を下回ったあたりから FGMRES の収束が遅くなっていることが分かる。より効率的な前処理を開発することや、要求する数値解の精度に応じて FGMRES の収束判定基準を適切に定めることが今後の課題であると言えよう。

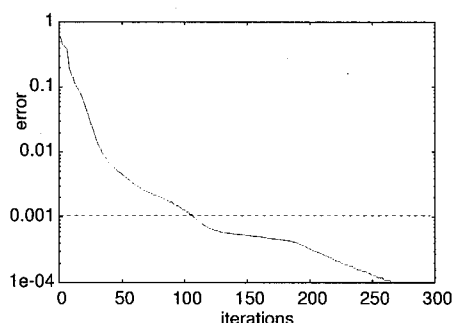


図-12 FGMRES 収束状況

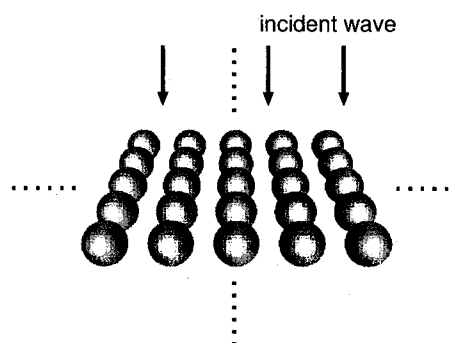


図-13 2次元的に配列された誘電体球群（垂直入射の問題）

表-1 数値解析結果				
FGMRES	Num. of	elapse	error (%)	
tol.	iter.	time	j	m
10^{-3}	108	7771	0.624	1.52
10^{-4}	267	18409	0.355	0.161

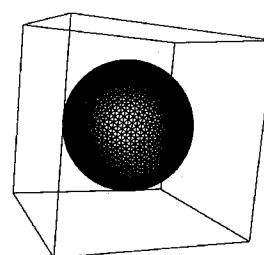


図-14 ユニットセル（垂直入射の問題）

5.2 2次元的に配列された誘電体球群による散乱問題

(1) 1層の球群の問題（垂直入射）

次に、図-13で示すような、2次元的に配列された誘電体球群による散乱問題を取り扱った。これは、いわゆるスラブフォトリック結晶をモデル化したものである。

本論文では、球群が1層であり、入射角が垂直である問題を取り扱った。ユニットセルは図-14に示す通りである。繰り返し周期は $L = 1$ であり、誘電体球の直径は $D = 0.7L$ である。誘電体の比誘電率は $\epsilon^{\text{sph}}/\epsilon^{\text{vacuum}} = (1.6)^2$ である。球の表面は 5120 の平面三角形要素に分割されている。全自由度は 15360 である。

このようなモデルに対し、式(40)を用いてエネルギー反射率を計算した。対象とする周波数は $\omega = 1.5 \sim 10$ である。計算されたエネルギー反射率を図-15に示す。図-15で実線で示されているのは、Stefanou ら¹²⁾の結果であり、×印で示されているのが本手法によって得られた結果である。非常に良く一致している。

なお、解析は 8CPU を用いて実行され、解析時間は 4～18 分であった。FGMRES の収束判定条件は 10^{-3} とした。

(2) 1層の球群の問題（斜め入射）

次に、図-16で示すように、1層の球群に入射波が 30 度の角度で入射する問題を扱った。偏光の向きは図-16で示すように、 $\mathbf{E}^{\text{inc}}$ が $x_2=x_3$ 平面（球群が存在する平面）に対して 30 度傾いており、 $\mathbf{H}^{\text{inc}}$ は x_2-x_3 平面に対して平行である。

本モデルでは、前項のモデルに比べ誘電体球の体積占有率を大きく取った。ユニットセルを図-17に示す。誘電体球の直径は $D = 0.99L$ であり、隣接する球との間隔は

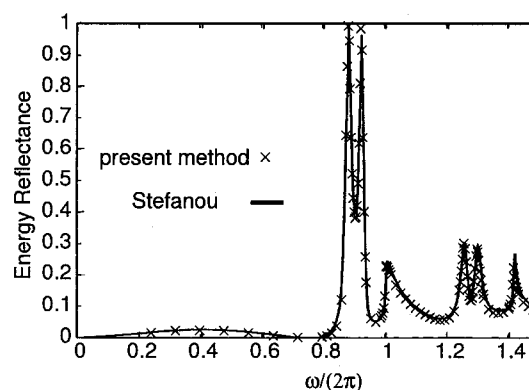


図-15 エネルギー反射率（垂直入射の問題）

非常に小さい。誘電体の比誘電率は $\epsilon^{\text{sph}}/\epsilon^{\text{vacuum}} = 8.67$ である。球面は 8000 の平面三角形要素に分割されている。なお、FGMRES の収束判定条件は 10^{-3} とした。

このようなモデルについて、 $k = 2.635 \sim 4.024$ の範囲の波数に対して、式(40)を用いてエネルギー透過率を計算し、図-18にプロットした。図-18に実線で示されているのは Ohtaka ら¹¹⁾の結果であり、×印で示されているのが本手法で得られた結果である。なお、Ohtaka らは $D = L$ の場合、つまり、誘電体同士が完全に接している問題を扱っているため、本研究で扱ったモデルとは若干異なる。両者の結果を比較すると、概ね一致しているものの、 $k = 3.5$ 付近で値がずれている他、 $k = 3.6 \sim 3.8$ においてスパイクの位置がややずれている。これは、モデルの違いに起因するものと考え

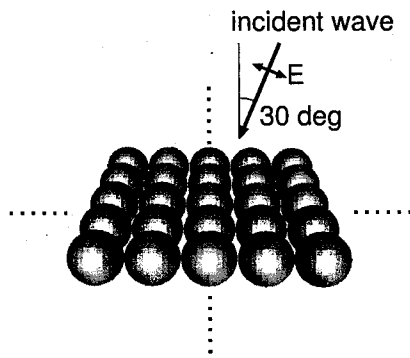


図-16 2次元的に配列された誘電体球群（斜め入射の問題）

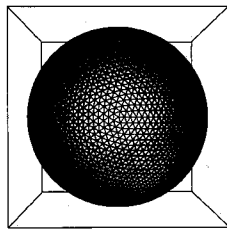


図-17 ユニットセル（斜め入射の問題）

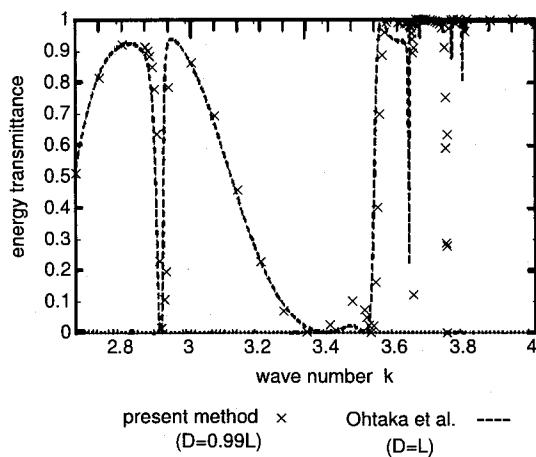


図-18 エネルギー透過率（斜め入射の問題）

えられる。なお、スパイクの幅が大変小さいことから、いずれの解析においてもスパイクの深さは正確に捉え切れていない可能性がある。

6. 結論

本研究では、Maxwell 方程式における 3 次元 2 周期問題における高速多重極境界要素法の定式化を行い、数値解析を行った。数値結果を解析解や先行研究結果と比較し、良い一致を見た。今後更に大規模な問題や、より現実的な問題への適用を行なう予定である。

千葉大学総合メディア基盤センターの植田毅准教授には、本論文の作成に当たり参考文献を紹介して頂き、また、フォトニック結晶分野における研究背景について極めて有用な御示唆を頂いた。ここに感謝の意を表する。

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。ここに謝意を表する。

参考文献

- 1) J.D. Joannopoulos, R.D. Meade and J.N. Winn: *Photonic Crystals*, Princeton University Press, 1995.
- 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) 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.
- 6) 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, *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, **4**(2006), pp.487–500.
- 7) Rokhlin, V.: Rapid solution of integral equations of scattering theory in two dimensions, *Journal of Computational Physics*, **86**(1990), pp.414–439.
- 8) Y. Otani and N. Nishimura: An FMM for periodic boundary value problems for cracks for Helmholtz' equation in two dimensions, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, to appear
- 9) J.-C. Nédélec: *Acoustic and Electromagnetic Equations*, Springer, 2001.
- 10) Y. Saad: *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*, Second Edition, SIAM, 2003.
- 11) K. Ohtaka, Y. Suda, S. Nagano, T. Ueta, A. Imada, T. Koba, J. S. Bae, K. Mizuno, S. Yano and Y. Segawa: Photonic band effects in a two-dimensional array of dielectric spheres in the millimeter-wave region, *Physical Review B*, **61**(2000), pp.5267–5279.
- 12) N. Stefanou and A. Modinos: Scattering of light from a two-dimensional array of spherical particles on a substrate, *Journal of Physics Condensed Matter*, **3**(1991), pp.8135–8148.
- 13) 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.
- 14) S. M. Rao, D. R. Wilton and A. W. Glisson: Electromagnetic scattering by surfaces of arbitrary shape, *IEEE Transactions on Antennas and Propagation* **AP-30**(1982), pp. 409–418.
- 15) L. C. Biedenharn, J. D. Louck and P. A. Carruthers: *Angular Momentum in Quantum Physics*, Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1981
- 16) N.A. Gumerov and R. Duraiswami: *Fast Multipole Methods for the Helmholtz Equation in Three Dimensions*, Elsevier, College Park, Maryland, 2005.

(2007 年 4 月 12 日 受付)

謝辞