様式 C-19

科学研究費補助金研究成果報告書

平成 23 年 6 月 1 日現在

機関番号：14301
研究種目：基盤研究（B）
研究期間：2008 年 ～ 2010 年
課題番号：20360047
研究課題名（和文）周期的領域の周期・非周期波動問題における高速多重極法の研究

研究課題名（英文）On the fast multipole method for periodic and non-periodic boundary value problems in periodic domains

研究代表者　西村　直志（Naoshi Nishimura）
京都大学・大学院情報学研究科・教授
研究者番号：90127118

研究成果の概要（和文）：周期構造の波動問題は、光学におけるフォトニック結晶、メタマテリアルや、弾性波動におけるフォノニック結晶などの興味深い応用を有する学術分野である。我々は、周期構造の波動特性を解析する高速な数値解析手法として、周期多重極法を開発してきたが、まだ取り除くべきいくつかの制約条件があった。本研究では、音響や弾性波動、電磁波における周期多重極法について、その適用範囲を広げ、特に周期構造に周期性を持たない波動が入射した場合や構造の周期に乱れがある場合の解法を開発した。

研究成果の概要（英文）：Wave problems in periodic structures constitute an interesting academic area of research which has applications such as photonic crystals and metamaterials in optics and phononic crystals in elastodynamics. We have developed the periodic fast multipole method (FMM) as a fast solver of wave problems in periodic structures. But, this method still has a few restrictions which have to be removed. In this research we have extended the applicability of the periodic FMM in acoustics, elastodynamics and electromagnetics. Specifically, we have developed methods for analysing responses of periodic structures subject to non-periodic incident waves or waves in slightly perturbed periodic structures.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合　計
2008 年度	4,000,000	1,200,000	5,200,000
2009 年度	3,600,000	1,080,000	4,680,000
2010 年度	3,600,000	1,080,000	4,680,000
年度			
年度			
総　計	11,200,000	3,360,000	14,560,000

研究分野：応用力学、計算力学
科研費の分科・細目：（分科）応用物理学・工学基礎　（細目）工学基礎
キーワード：計算力学、高速多重極法、フォトニック結晶、メタマテリアル、フォノニック結晶

１．研究開始当初の背景

高速多重極法は 20 世紀を代表する 10 のアルゴリズムの一つといわれ[1]、理工学の種々の分野に革新をもたらした[2]。特に重力多体系や積分方程式の数値計算に帰着される分野では、従来、問題の自由度Ｎの２乗に比例する計算量を要していた計算がＮの定数倍程度の計算量で実行できるようになるので、例えば積分方程式の数値計算の分野で

は、これまでせいぜい数千元規模の問題が解かれていたのが、一挙に数十億元規模の問題にまで手が届くようになった。これまでにLaplace 方程式などの標準的な問題に多重極法を適用する研究はここ数年で大いに進み、既に一定のレベルに達している。最近では工学における個々の重要な問題への多重極法の応用も進み始めており、中でも、高速多重極法の適用が期待される分野として周期構造の波動問題を挙げることが出来る。この分野には種々の興味深い応用があり、工学基礎として非常に重要である。例えば、光学的に周期的な構造を持ついわゆるフォトニック結晶は、光を導いたり、蓄えたり、特定の周波数の光を通したり阻止したりする事が知られており、未来の光デバイスの基礎技術として盛んに研究されている[3]。また、誘電体に光の波長より微細な金属質の介在物を周期的に配した左手系メタマテリアルを用いると、自然界には存在しない負の屈折率を有する材料が作製できると言われており、このことを利用すれば従来の光学レンズでは不可能な完璧なフォーカスを実現できる「スーパーレンズ」を作る事ができるとされている[4]。周期構造の同様な性質は弾性波動においても知られている。特に弾性体におけるフォトニック結晶に相当のものはフォノニック結晶と呼ばている。それ以外にも、周期構造の波動現象に直接・間接的に関わる技術は多数存在する。

このような興味深い種々の応用を考慮して、我々のグループはこれまで波動問題における周期構造の高速多重極法の研究に世界に先駆けて取り組んできた。これまで、音響問題（Helmholtz 方程式）や電磁波問題（Maxwell 方程式）における周期境界値問題が多重極法で解けるようになった[5]。

しかし波動問題の周期多重極法で直接的に扱える問題と現実の問題とは、まだ距離がある。実際、研究開始当初の周期多重極法では周期構造の単位は立方体(正方形)でなければならず、現実の問題への適用において障害となっていた。さらに、当時の周期多重極法では、領域形状のみならず、入射波動や境界条件も完全な周期性を有する場合しか扱えず、周期構造へ周期的でない波動が入射した場合や、周期構造に一部乱れのある問題などは解けなかった。しかし、周期構造の乱れの解析はフォトニック結晶において光を制御するための仕組みにも関係があり、工学的に重要である。更に、弾性波動の周期多重極法には全く手がついていなかった。

[1]J. Board and K. Schulten, IEEE Comp. Sci. Eng., 2 (1), 76-79 (2000)
[2] N. Nishimura, Appl. Mech. Rev., 55, 299-329 (2002)
[3]吉野，武田，フォトニック結晶の基礎と応用，コロナ社 (2004)
[4]J.B. Pendry, Phys. Rev. Lett., 85, 3966-3969 (2000)
[5]Y. Otani, N. Nishimura, Int. J. Num. Meth. Eng., 73, 381-406 (2008)

２．研究の目的

本研究の目的は、これまでの波動問題の周期多重極法に関する研究をさらに推し進め、研究開始時点では取り扱う事のできなかった上記の問題のそれぞれにその適用範囲を広げる事である。具体的には、時間方向に正弦的な（周波数域の）波動問題における周期多重極法を完成させるために次のテーマに取り組む。

(1) Helmholtz 方程式の周期的領域における周期境界値問題において、周期構造の単位(ユニットセル)が立方体でなければならないという制約を取り除く。更に、これの Maxwell 方程式や弾性波動への拡張を検討する。
(2) Helmholtz 方程式において、境界形状は周期的であるが、境界条件は非周期的である波動問題の解法を定式化し、これを解くための周期多重極法を実装する。更に、これの Maxwell 方程式や弾性波動への拡張を検討する。
(3) Helmholtz 方程式において、境界形状はほとんど周期的であるが、一部で周期性が乱れた場合の波動散乱問題の解法を定式化し、これを解くための周期多重極法を実装する。更に、これの Maxwell 方程式や弾性波動への拡張を検討する。
(4) 上記を実現するための関連する数値計算上の諸技術を開発する。
(5) さらに可能であれば時間域の（時間方向に正弦波的でない）周期問題の解法の可能性を検討する。

３．研究の方法

全体を電磁波動問題における周期多重極法の研究と弾性波動問題における周期多重極法の研究に分け、それぞれ Helmholtz 方程式と Maxwell 方程式、及び弾性波動の方程式を研究対象とする。

(1)電磁波動問題における周期多重極法の研究

以下の研究を行う。
①ユニットセル（周期単位）が立方体でなければならないという制約条件を取り除く。直方体セルの使用、複数のレベル０の箱の使用

などを試みる。
②幾何学的に周期的な構造に非周期的な境界条件を与えた場合の解法を研究する。このような問題にFloquet変換と呼ばれる変換を施せば、非周期問題を周期問題に変換することができる。これを周期多重極法を用いて解いた上で逆変換する。
③周期問題では、いくつかの周波数に対して、僅かな条件の変化に対応して解が大幅に変動する現象が知られており、アノマリと呼ばれている。アノマリの周辺では線型方程式の性質が悪化し、求解に要する計算時間が増大する。このことの対策として、前処理法を検討する。特に、積分方程式の特性に立脚したCalderon前処理と呼ばれる方法を研究する。
④ほとんど周期的な構造に一部形状の乱れのある場合、周期的な外乱（たとえば平面波）に対する応答をFloquet変換を用いて計算する方法を考案する。
⑤以上述べた事項は周波数域の解析を想定している。一方、時間域の解法において周期問題を扱う方法は決して容易ではない。本研究では時間域の周期問題の取り扱いについても研究する。なお、これは当初の研究予定にはなかった課題であるが、本研究の進行に伴って解法のアイデアを得たことと、テーマ自体が深く関連する内容であるので、本研究の一部として取り扱った。

(2)弾性波動問題における周期多重極法の研究

電磁波動問題で開発した周期多重極法とCalderon 前処理法を弾性波動問題に拡張する。その際、積分方程式の特性により、本来の解が唯一であっても数値解は多数存在することがあり得る。この問題の回避の仕方には２つの有力な方法があり、それぞれPMCHWT定式化、Burton-Miller の方法と呼ばれている。電磁波問題では前者を試みているので、弾性波動問題ではBurton-Millerの方法も試みる。

４．研究成果

(1) 周期多重極法の拡張について
　周期多重極法では周期構造の単位（ユニットセル）を多重極法のレベル０の箱と同一視すること、及びこれまでの多重極法では多重極法に用いる箱を立方体にとっていたことから、ユニットセルが立方体でない場合に周期多重極法を単純に拡張すると解析効率が落ちると考えられたため、計画段階では図形詰め込みアルゴリズムの使用など、種々の可能性を想定していたが、実際には非立方体の箱を用いた多重極法は予想外に効率が良く、立方体の場合よりも効率が良い場合さえあることが判明した。このため、単にユニットセルを多重極法のレベル０の箱に取る手法によって、十分に効率のよい周期多重極法が得られることが分かった。
　さらに、ユニットセルの高さが非常に高い場合も、レベル０の箱を複数取ることにより取り扱えることが分かった。
　典型的な解析例として、文献番号⑦のミミズの表皮の解析を示す。ミミズの表皮は微細な周期構造を有し、これに伴っていわゆる構造色が現れることが知られている。具体的には，45°方向から見ると青い光が観測される。ここでは、ミミズの表皮を水中にガラス繊維を積層したものとしてモデル化し、種々の方向から青い光を入射したときのエネルギー透過率を計算した。計算結果を図 1，2 に示す。図より、確かに45°方向から入射した場合、光がほとんど透過しない、すなわちほとんど反射することが分かり、実験事実と合っていることが分かる。
　なお、この研究に関わる雑誌などの論文は④⑦⑧⑩であり、講演は③⑤⑥⑦⑧⑨⑩⑪である。これらの講演はすべて招待講演であり、我々の研究は、内外で関連する分野の基本的研究成果と受け止められているようである。
(2) 周期構造における非周期問題について
周期構造に非周期境界条件を与える問題では、解をFloquet 変換することによって問題が周期問題となる。これを逆変換すれば周期構造の非周期境界値問題が解ける。
　この際、いくつかのFloquetのパラメータの周辺において、解くべき線型方程式が悪条

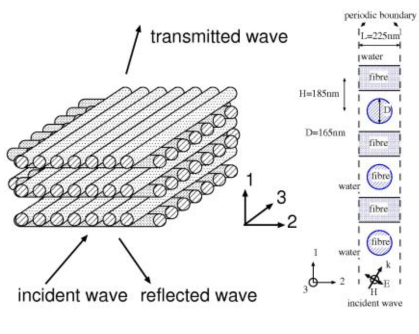

図１　ミミズの表皮構造

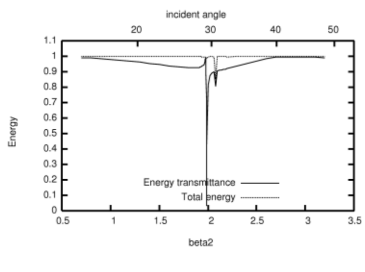

図２　エネルギ透過率

件となることがあり、最悪の場合は解が存在しない場合もある。本研究では解の存在する場合を扱った。上記の方法により、Helmholtz 方程式において周期的な円形の散乱体による（非周期的な）ガウスビームの散乱問題を解いた結果を図３に示す。なお、いくつかのFloquet パラメータに対して、解の不存在の場合がある条件下での解析は今後の課題となった。

なお、この研究に関わる学会発表は口頭発表⑪である。研究(3)の成果と組み合わせて論文投稿を検討中である。

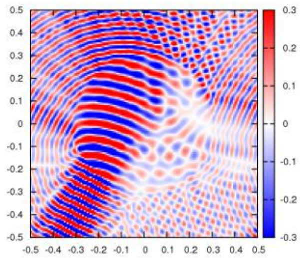

図３　誘電体の Gauss beam 入射への応答 $\varepsilon_{外}/\varepsilon_{内}=3$, $k_{外}a=46.172$, $a/l=0.3$.

(3) Calderon 前処理について

本研究で扱った多くの問題は、波動透過問題に属し、たとえば誘電体による波動散乱問題のように、全空間をいくつかの部分領域に分け、各々の部分領域内で波動問題を解くタイプの問題となる。この際、波動場とその法線微分の連続性から得られる積分方程式を解く、いわゆる PMCHWT 定式化が便利である。

この定式化で得られる積分方程式を周期多重極法を用いて高速に解く場合、線型方程式を反復法で解くことが必要となる。その反復回数の減少は、解析を効率よく行うための重要課題である。PMCHWT 定式化の積分方程式は Calderon の式と呼ばれる恒等式を満たし、これを用いることによって、線型方程式の性質を改善（前処理という）することができる。本研究では、Helmholtz 方程式の周期多重極法において、選点法を用いた場合には、線型方程式を正しく並べるだけで Calderon 前処理の効果を得ることができること、係数行列そのものを前処理行列にすることでも良好な前処理効果が得られること、Galerkin 法においては Gram 行列を前処理行列に選ぶことによって良好な前処理効果を得られることなどが分かった。

図 4,5 には投稿中の論文から典型的な計算結果を示す。同図は２周期的に配置した球形介在物による波動散乱の解析例であり、線型方程式は GMRES で解いている。Gram 行列で前処理を行う方法が計算時間においてはほかの手法より早いことが分かるが、このことは使用した GMRES の原理から説明できることを示した。

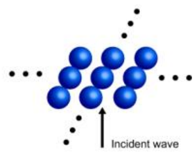

図４　２周期球状散乱体

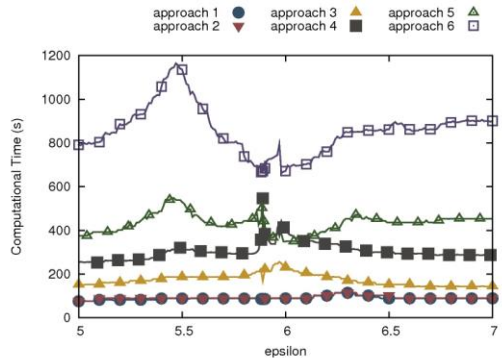

図５　計算時間の比較。1: 外側、2: 内側、$\varepsilon_1=1$, $\varepsilon_2=2.56$, App1=Calderon (A), App2=Calderon (A^2), App3=新オーダリング＋従来前処理、App4=新オーダリング＋前処理なし、App5=従来オーダリング＋従来前処理、App6=従来オーダリング＋前処理なし。

なお、この研究に関わる雑誌などの論文は①⑥であり、更に欧文誌に投稿中である。口頭発表は①④であり、④は招待講演である。また、本研究の方式に基づく Calderon 前処理の研究は、今後 Maxwell 方程式の場合へと拡張する予定である。

(4) 周期性に乱れのある領域における波動散乱問題

工学においては、ほとんど周期的であるが、一部の構造に欠損がある場合の波動場を求めることが必要になる場合がある。たとえばフォトニック結晶では、周期構造の乱れを利用して光を導いたり、蓄えたりする。本研究では、まず、この種の問題を Floquet 変換を用いて解析することができることを示した。特に、周期的な介在物の配置から１個を取り除き、母材で置き換えた構造について、これを解析するための積分方程式を導出し、周期多重極法で解いた。得られる積分方程式は Floquet のパラメータに関する連成項を含む連立方程式であり、これを同時に解くことは現実的ではないので、反復法によって数値的に解いた。

図６には２次元 Helmholtz 方程式における解析例として、円形介在物の１周期構造において円形介在物が１個だけ(図では中央の曲線がこれに当たる)存在しない時の境界での解が示されている。図中の従来法はいわゆるスーパーエレメントの解であり、本研究はスーパーエレメント法の妥当性を示した形となった。なお、本研究に関わる論文等は現在準備中である。

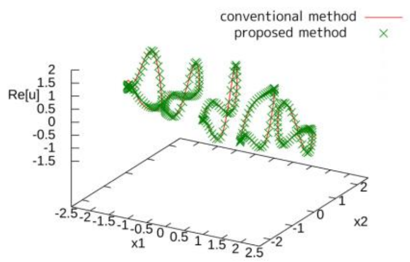

図６　周期構造に乱れがある場合の波動場 $\varepsilon_{外}$=1, $\varepsilon_{内}$=0.5, 入射角=1(rad), $\omega=2\pi$

(5) 時間域の周期問題

いままで述べてきた研究成果はすべて解の時間挙動が正弦波的であるときに対するものであった。一方、波動現象の数値解析の現状では FDTD 法などの時間を陽に含む解法が使用されることが多いことからもわかるように、時間域の解析の需要も大きい。しかし、周期構造の時間域の解析を行う場合、入射波動が斜め入射をする場合、因果律の制約のため、解析が困難になることが知られており、FDTD 法においても種々の工夫が提案されている。境界積分方程式法においても同様の問題が生ずるが、時空に関する変数変換を行うことにより仮想時間を導入すれば、入射方向が周期方向に直交するように見えるようにすることができ、これを用いると時間域の周期問題が入射方向に関わらず解けることが分かった。本研究では以上のアイデアを数値的に実装し、良好な解析結果が得られることを示した。図７に２次元波動方程式のクラック問題における解析例を示す。

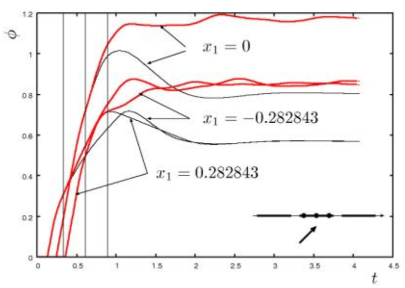

図７　開口変位。クラック長 0.8、入射角 23.6°、赤：周期解、黒：単一クラック

なお、この研究に関わる学会発表は口頭発表②⑨である。⑨は招待講演である。今後論文発表を検討する。

(6) 弾性体波動に関わる周期多重極法の研究

周期構造中の弾性波動は、フォノニック結晶や、アコースティックメタマテリアルなどに関連して興味深い研究対象となっている。本研究ではこれまでに述べてきた Helmholtz 方程式や Maxwell 方程式における周期多重極法の研究を弾性体に拡張することを目的とする。具体的には、2, 3 次元弾性波動問題の周期問題において、周期多重極法を定式化し、PMCHWT 定式化と、Burton Miller 法の双方の効果を確かめた。さらに前者において、Calderon 前処理の効果を検討した。

図８は論文②よりの引用で、図４の散乱体に対して Calderon 前処理の効果を調べたものである。球の外部に $\lambda=\mu=\rho=1$、内部に $\mu=\rho=1$ の弾性体が分布するとき、内部の λ の関数として計算時間をプロットした。Calderon 前処理の有効性が分かる。

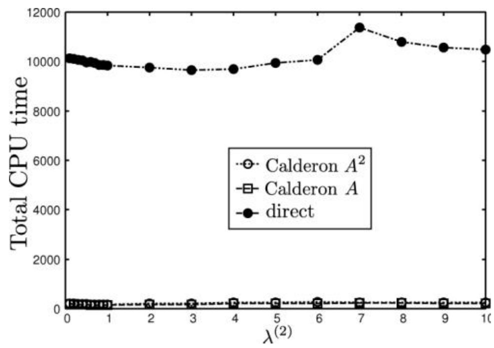

図 8 Calderon 前処理と従来型前処理の CPU 時間の比較。ω=8, 球の半径=0.31

なお、このテーマに関する雑誌論文は②③⑤⑨、口頭発表は①③④であり、いずれも招待講演である。今後より一般的な境界条件に対する前処理法の研究に繋げてゆきたい。

５．主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計 10 件)

①新納和樹、西村直志、Helmholtz 方程式の Galerkin 法を用いた周期多重極法における Calderon の式に基づく前処理法について、査読有、10, 2010, 39-44

②飯盛浩司、新納和樹、吉川仁、西村直志、3 次元動弾性学の周期多重極法における Calderon の式に基づく前処理について、計算数理工学論文集、査読有、10, 2010, 45-50

③飯盛浩司、吉川仁、西村直志、3 次元動弾性学の周期多重極法と、その平面 2 周期構造

による散乱問題への適用、応用力学論文集、査読有、13, 2010, 169-178
④Y. Otani and N. Nishimura, Behaviour of periodic fast multipole boundary integral equation method for Maxwell's equations near Wood's anomalies, Contemporary Mathematics, 査読有、494, 2009, 43-59
⑤飯盛浩司、大谷佳広、吉川仁、西村直志、3 次元動弾性学における周期多重極法と Wood の anomaly に関する基礎的考察、応用力学論文集、査読有、12, 2009, 171-178
⑥新納和樹、西村直志、2 次元 Helmholtz 方程式の 1 周期境界値問題に対する Calderon の式に基づく前処理について、計算数理工学論文集、査読有、9, 2009, 1-6
⑦大谷佳広、西村直志、Maxwell 方程式における周期多重極法の tall cell 問題への拡張, 計算数理工学論文集、査読有、9, 2009, 55-60
⑧Y. Otani and N. Nishimura, An FMM for orthotropic periodic boundary value problems for Maxwell's equations, Waves in Random and Complex Media, 査読有, 19, 2009, 80-104
⑨坂本和穂・大谷佳広・西村直志、2 次元弾性波動問題における周期多重極境界積分方程式法、計算数理工学論文集、査読有、8, 2008, 77-82
⑩大谷佳広・西村直志、3 次元 Maxwell 方程式直交異方周期散乱問題における高速多重極境界要素法、計算数理工学論文集、査読有、8, 2008, 71-76

〔学会発表〕(計　25 件、以下主要なもの)
①N.Nishimura, Calderon preconditioners for periodic FMMs in wave transmission problems, Trefftz/MFS2011, 2011/3/17, Kaohsiung, Taiwan
②渡辺慧、西村直志、2 次元波動方程式の周期問題の時間域解法について、機械学会計算力学講演会、2010/9/24、北見工業大学
③ N. Nishimura, Fast BEMs for elastodynamics and periodic problems, NSF workshop on emerging applications and future directions of the boundary element method, 2010/9/2, Akron, Ohio, USA
④N. Nishimura, Preconditioners based on Calderon's formulae for FMMs in periodic wave problems, Workshop on Integral equation methods, fast algorithms and applications, 2010/8/4, Minneapolis, USA
⑤N. Nishimura, Applications of periodic FMM for Maxwell's equations in optical problems, 2nd German-Japanese workshop on computational mechanics, 2010/3/29, 地球シミュレータセンター
⑥ N. Nishimura, Boundary integral equation methods and fast multipole methods in periodic wave problems, 2009 Taiwan-Japan Joint Workshop on Numerical Analysis and Scientific Computation, 2009/11/7, Taipei, Taiwan
⑦N. Nishimura、Applications of periodic FMM for Maxwell's equations in optics, ICOME2009, 2009/10/20, Hohai University, Nanjing, China
⑧西村直志、高速多重極境界要素法―弾性体からメタマテリアルまで、理論応用力学講演会、2009/6/9、日本学術会議
⑨ N. Nishimura, Boundary integral equation method and fast multipole methods in periodic wave problems, CoMFoS 2008, 2008/10/28, 京大会館
⑩N. Nishimura, A fast multipole method for 3 dimensional periodic boundary value problems for Maxwell's equations, Imaging microstructures, Mathematical and computational challenges, 2008/6/18, Institut Henri Poincare, Paris, France
⑪N. Nishimura, On the periodic FMM for Maxwell's equations, BEM/FEM techniques for time dependent and time harmonic problems, 2008/5/28, Saarland Univ., Germany
⑫新納和樹、周期多重極法を用いた Helmholtz 方程式の周期領域非周期境界値問題の解法、計算工学会、2008/5/21、仙台市民会館

６．研究組織
(1)研究代表者
西村　直志（Naoshi NISHIMURA）
京都大学・大学院情報学研究科・教授
研究者番号：90127118

(2)研究分担者
吉川　仁（Hitoshi YOSHIKAWA）
京都大学・大学院情報学研究科・講師
研究者番号：90359836