

## [研究成果]

### 時間領域および周波数領域差分法を用いた周期構造の解析

有馬卓司, 宇野 亨

東京農工大学 大学院工学研究科 先端電気電子部門

同じ構造を周期的に並べた構造を周期構造と言うが、周期構造を用いることで単体の構造では得られない電気的特性を得ることができる。より良い特性が得られる周期構造を設計するには大型計算機を用いたシミュレーションが欠かせない。本稿では周期構造を電磁波問題に用いることを主眼に置き、電磁波問題に対する代表的なシミュレーション手法である時間領域および周波数領域差分法を用いた周波数構造の解析について述べる。

#### 1. はじめに

現在、電磁波に対して自然界には存在しえない電気的特性を示す構造が注目されている。これら構造は“メタマテリアル (Metamaterial)”と呼ばれている[1]。“メタ”とは超越を表す接頭語なので、超越媒質と言い換えることができる。メタマテリアルの一例として、負の屈折率を示すDNG (Double NeGative : 誘電率透磁率共に負の値を持つという意味) 媒質[2]、磁気壁として働くEBG (Electromagnetic BandGap) 構造[3]などがある。これらの特性を用いることで、平面レンズや低姿勢アンテナなどの開発が行われている。これらはすべて周期構造 (図 1) と呼ばれる、電磁波の波長オーダーの構造もしくは媒質を等間隔で周期的に並べる構造により実現されている。より効率よく、高性能なメタマテリアルを設計するには大型計算機を用いたシミュレーションが不可欠である。これら解析には、平面波展開 (PWE) 法[4]、有限要素 (FEM) 法[5]、時間領域差分法[6]、周波数領域差分法[7]などがある。どれも長所短所があるが、筆者らのグループでは、定式化が容易で解析対象に制約の少ない時間領域および周波数領域の差分法を主に用いている。本稿では、時間領域および周波数領域の差分法を用いた周期構造の解析について述べる。なお慣例に従い本文中では、時間領域差分法を FDTD 法、周波数領域差分法を FDFD 法と略記する。手法自体も似ているが、略称も非常に似ているので注意していただきたい。

#### 2. FDTD 法における周期構造の解析

FDTD 法とは、解析領域を図 2 に示すような微小空間 (セル) に分け、それぞれのセルに対して、時間領域のマクスウェルの方程式を時間および空間について直接差分し解析する手法である。この手法は、アルゴリズムが非常に簡易な事より解析対象の制限がなく、複雑な構造の解析に向いている事からメタマテリアルの解析にしばしば用いられる。この手法を用いて周期構造の解析をする手法としては、sin 波、cos 波それぞれで励起して解析する sin-cos 法、周期条件を満たすために新たな関数を導入する Split-Field 法、周波数領域の周期境界条件を導入する Constant-k 法などが知られている。これらの手法は直接に得られる情報が異なるため一概に優劣を比べることはできない。一方、周期構造中の電磁波の解析にはその媒質中を伝搬する電磁波の周波数特性 (伝搬モード) によって評価できる場合が多々ある。Constant-k 法は伝搬モードを容易に解析で

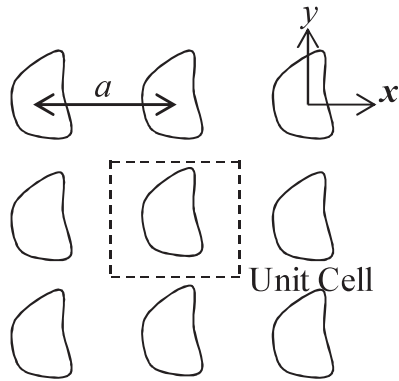


図1 周期構造とその単位構造

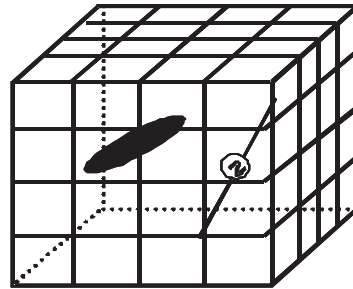


図2 FDTD法における解析空間

き，その伝搬方向の制限が少なく広く用いられている．次節において Constant-k 法について説明する．

### 2.1 Constant-k FDTD法による周期構造の解析

周期構造は同じ構造がつながっていることから，電磁界についても周期性がある．その周期性は，周期間隔を  $a$  とすると，

$$\varphi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = \varphi(\mathbf{r})e^{-j\mathbf{k}\mathbf{a}} \quad (1)$$

で示される．これをブロッホの定理という． $\mathbf{k}$  は波数ベクトルであり， $\varphi$  は電界もしくは磁界を表している．図1のように， $x$ - $y$  方向の2次元周期構造を考え，それぞれの周期間隔を  $a$  とすると(1)式は

$$\varphi(a, y) = \varphi(0, y)e^{-jk_x a}$$

$$\varphi(x, a) = \varphi(x, 0)e^{-jk_y a} \quad (2)$$

と表わすことができる．FDTD法は時間領域の解法のため(2)式をそのままフーリエ変換すると時間シフトの項が出てしまう．斜め入射においては，時間シフトが未来の値を示すため因果律に反して解析できなくなってしまう．一方，波数  $k$  を定数と考えるとフーリエ変換しても時間シフトの項は現れない．そこで波数を定数として，(2)式を FDTD 法に組み込み計算する手法を Constant-k FDTD 法という．(2)式は複素数で表わされるため，Constant-k FDTD 法において電界磁界はそれぞれ複素数とする必要がある．Constant-k FDTD 法を用いて伝搬モードを求めるには，周期構造の一つの単位セルの計算領域の端で(2)式を適用した後，解析空間の任意の場位置よりパルスを励起し，それとは異なる点での電界の時間変化を記録する．記録された時間領域の電界をフーリエ変換すると，伝搬モードの周波数において強いスペクトルが記録される．図3に上記手順で得られた時間領域の電界，図4にそれをフーリエ変換して得られたスペクトルを示す．解析対象は，3次元の金属ワイヤにより構成されたメッシュ構造である．図4から分かるように，周期構造中で伝搬モードは離散的に無数に存在していることが分かり，妥当な解析がで

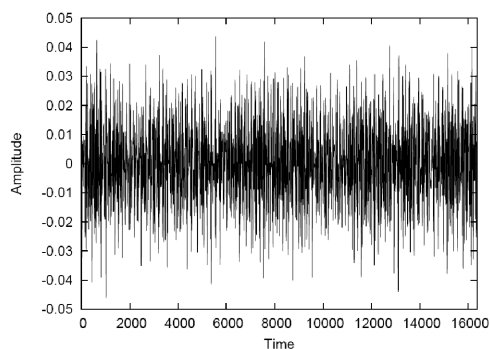


図 3 時間領域の周期構造中電界

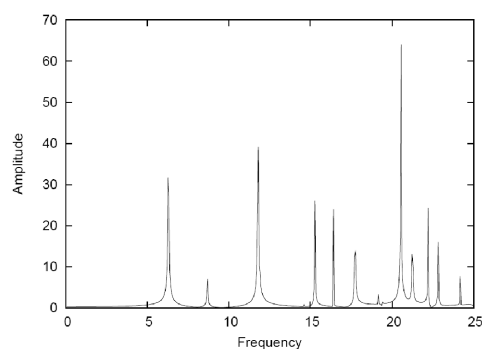


図 4 周波数スペクトル

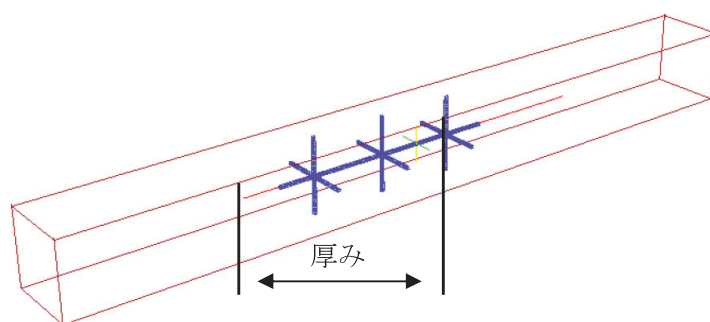


図 5 有限の厚みを持つ周期構造の単位構造

きていることが分かる．この手法は図 5 に示すような、有限の厚みを持つ周期構造に対して入射角を持つ波が入射した際の反射特性などの計算も可能である．この際は、入射角によらず波数が一定となる入射波を用いて解析する必要がある．

### 3. FDFD 法による周期構造の解析

FDFD 法は、周波数領域のマクスウエルの方程式を空間について差分する手法であり、FDTD 法と同様に空間を微小空間に分割して計算する手法である．FDTD 法は時間を進めて解析する関係上、マクスウエルの方程式を電界磁界に関する連立微分方程式と考え、それらを交互に計算していく手法であったが、FDFD 法では電界もしくは磁界が満たす波動方程式を考慮することにより電界磁界どちらか一方のみの計算でよくなる．FDFD 法は周波数領域の手法であるので周波数領域の周期境界条件

$$\varphi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = \varphi(\mathbf{r})e^{-j\mathbf{k}\mathbf{a}}$$

がそのまま適用できる．ここでは図 1 に示すような 2 次元問題を考え、電界は  $z$  方向成分のみを持つとする．すると電界に関する周波数領域波動方程式は

$$-\frac{1}{\epsilon\mu} \left( \frac{\partial^2 E_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_z}{\partial y^2} \right) - \left( \frac{\omega}{c} \right)^2 E_z = 0 \quad (3)$$

となる．これを各セルについて空間差分し、行列の形で整理すると

$$\left\{ \mathbf{B} - \left( \frac{\omega}{c} \right)^2 \mathbf{I} \right\} \cdot \mathbf{E}_z = 0 \quad (4)$$

と表わすことができる．ここで、 $\mathbf{I}$ は単位行列、 $\mathbf{E}_z$ は電界行列、 $\mathbf{B}$ は

$$\mathbf{B} = -\varepsilon^{-1} \mu^{-1} \{ \mathbf{V}_y \mathbf{U}_y + \mathbf{V}_x \mathbf{U}_x \}$$

で表わされ、 $\mathbf{V}_y, \mathbf{U}_y, \mathbf{V}_x, \mathbf{U}_x$  はそれぞれ空間の差分を表す演算子である．このように、FDFD 法は非常にシンプルな式でまとめることができる．(4)式は固有値問題そのものなので、様々な数値計算ライブラリが利用できる．FDFD 法の計算量については、周期構造の単位構造の一辺を 30 分割したとすると、2 次元問題では  $E_z$  成分のみ解析すればよいので  $30 \times 30 = 900$  個の未知数となり  $900 \times 900$  の大きさの行列に対する固有値を求める問題となる．一方、3 次元問題においては  $E_x, E_y, E_z$  の 3 成分を計算しなければならないので、未知数の数は  $30 \times 30 \times 30 \times 3 = 81,000$  個となりこれらを求めるために、 $81,000 \times 81,000$  の大きさの行列の固有値を求める問題となる．これは非常に大きな計算量となってしまい、現実的に 3 次元空間を FDFD 法を用いて解析するには大型計算機が必要となっている．なお、高速に固有値を求める方法も広く提案されている．

#### 4. 解析結果

本節では、FDTD 法と FDFD 法で計算した結果をいくつか示す．上述したように FDTD 法、FDFD 法ともに多くの計算機資源が必要になる．数値例をあげると、FDTD 法においては数百 G バイト程度のメモリ、FDFD 法においては  $10,000 \times 10,000$  程度の大きさの行列演算である．そのため、ここに示す解析結果はすべて東北大学サイバーサイエンスセンター大型計算機 SX-9 (1 CPU あたり 102.4G FLOPS) を用いたものである．

##### 4.1 FDTD 法と FDFD 法による計算結果の比較

まず、FDTD 法と FDFD 法の計算特性の違いを確認するために、図 6 に示す無限長誘電体円柱が周期的に並んだモデルの解析を行った．誘電体の比誘電率は 8.9 であり、その半径は  $0.2a$  とした．また、FDTD 法 FDFD 法ともに解析領域は一辺を 20 セルで分割している．図 7 に解析結果を示す．この図の横軸に示されている  $\Gamma, X, M$  はそれぞれ図 7 中に小さな模式図で示されている

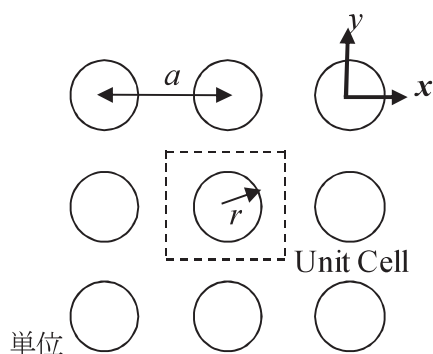


図 6 解析モデル

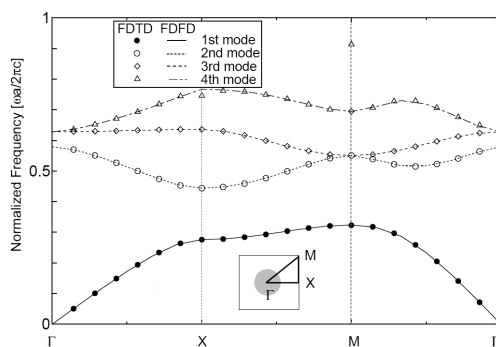


図 7 伝搬モード (第 1 ~ 第 4)

構造中の波数空間を示しており、これらは波の伝搬方向ともいえる。また、 $\Gamma$ ,  $X$ ,  $M$  という点はこの構造周期構造の特徴をよく示す点として知られており、 $\Gamma$ ,  $X$ ,  $M$  で構成される領域をブリルアンゾーンという。図 7 中には伝搬モードを周波数の低い方から 4 個（第 1~第 4 モード）示している。図 8 に、高次の伝搬モード（周波数の低い方から数えて 8 番目から 11 番目：第 8~第 11 モード）を示している。伝搬モードは高次になると密接してくることが知られているが、結果もその通りになっている。FDFD 法の結果はすべてのモードにおいて比較的滑らかな結果が得られており妥当な解析が得られていることが分かる。一方、FDTD 法の結果はあるところにおいて不自然に飛んでいることが分かる。これは、異なる伝搬モードにおいても同じ周波数となる場所（縮退という）においてである。この原因は、FDTD 法で伝搬モードは、上述したように周波数スペクトルより求められる。しかし、2 つ以上の伝搬モードが同じになる（縮退している）ところでは、1 つのスペクトルしか検出されないためである。これを避けるには手作業でグラフを書いて確かめるしかない。このように、FDTD 法と FDFD 法ではその解析手法の違いから結果の違いが出てくるので注意が必要である。

## 4.2 FDTD 法と FDFD 法による計算時間の比較

次に、4.1 節と同じ 2 次元無限長誘電体円柱の周期構造モデルを用いて、FDTD 法と FDFD 法の計算時間増加の割合を調べた。その結果を図 9 に示す。横軸は解析に用いたセルの総数、縦軸は解析領域を  $20 \times 20$  セルとした時で規格化した計算時間である。FDFD 法において固有値を求めるには、QR 法と IRA (Implicitly Restarted Arnoldi) 法を用いた。図 9 より、FDTD 法はセル数を増やしても計算時間の増加が少ない事が分かる。一方、FDFD 法についてはセルの増加とともに計算時間が大きく増加していることが分かる。また、IRA 法を用いることにより大きく計算時間が抑えられていることが分かる。FDFD 法はこのようにセル数の増加とともに計算時間が大きく増える特徴がある。このため、上述したように 3 次元問題ではその解析に非常に多くの計算時間が必要となってしまう、大規模行列に対して高速に固有値を求める手法を組み込むことが必要になってくる。なお、FDFD 法において行列は疎行列となっている。

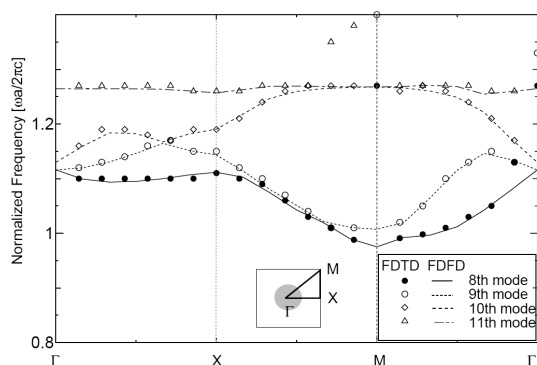


図 8 高次伝搬モード

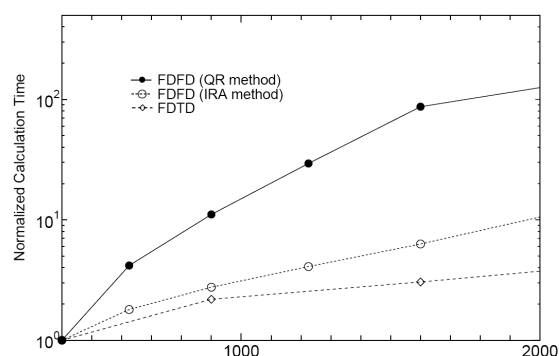


図 9 計算時間の増加量の比較

### 4.3 FDTD 法による有限周期構造の解析

最後に FDTD 法を用いた有限周期構造の解析例を示す。シミュレーション上は無限周期構造と出来るが実際にモノを作るときは必ず有限になる。そのため、実用上の応用をシミュレーションするには、有限の周期構造を解析する必要がある。有限の周期構造では、実際に多くの単位構造を解析する必要があるのでその計算量は膨大な物となる。解析モデルは、図 10 に示すような 3 次元ワイヤメッシュに金属球が装荷されているモデルとし、周期構造の厚さ方向は 2 層とした。この構造に、入射角  $50^\circ$  のある幅を持った入射波が入射する状況を解析した。その結果を図 11 に示す。この結果は、周期構造に入射した電波が、構造の表面を添うように伝搬している状況を示している。

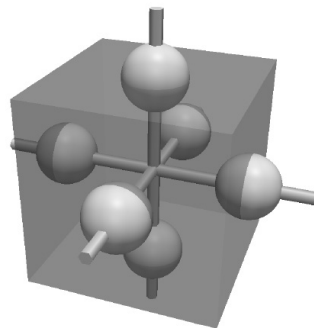


図 10 解析モデル



図 11 解析結果

## 5. まとめ

本稿では、現在注目されている周期構造体を時間領域および周波数領域で解析する手法についていくつか例を示しながら説明した。時間領域および周波数領域の手法それぞれにおいて特徴があり、その特徴を理解したうえで解析する必要がある。周期境界を用いることで単位構造のみを解析すればよいので分散量は大幅に減る。しかし、実際の実験で無限周期構造は作製出来ないのので、有限の周期構造の計算も必要になる。この際には、大規模計算が必要になる。



## 6. 参考文献

- [1] Special Issue on Metamaterial Structures Phenomena and Applications, IEEE Trans. Microwave Tech., vo,52, no.2, Feb. 2004.
- [2] V. G. Veselago, "The electrodynamics of substances with simultaneously negative values of permittivity and permeability," Soviet Physics USPEKI, Vol. 10 No. 509, 1968.
- [3] F. Yang, Y. Rahmat-Samii, S. C. Cripps, P. Aaen and J. A. Pla, "Electromagnetic Band Gap Structures in Antenna Engineering", Cambridge Univ. Press, 2008.
- [4] J. D. Joannopoulos, R. D. Meade and J. N. Winn, Photonic Crystal: Molding the Flow of Light, Princeton University Press, Princeton, NJ, 1995.
- [5] O. C. Zienkiewicz, "The Finite Element Method in Engineering Science", McGraw-Hill, London, 1971.
- [6] 宇野亨 "FDTD 法による電磁界およびアンテナ解析", コロナ社, 1998.
- [7] K. Yasumoto, "Electromagnetic Theory and Applications for Photonic Crystals", CRC press, 2006.