

非有界領域での数値解法における完全適合層 (PML) について Perfectly Matched Layer for Numerical Method in Unbounded Region

加古 孝 (電気通信大学 情報工学科)

大井 祥栄 (電気通信大学 情報工学専攻 M2)

1 序論

非有界領域における波動現象の数値計算を行うためには、適切に計算領域を設定する必要がある。この問題に対して様々な方法が存在する。時間定常問題の場合には、領域を有界領域と非有界領域に分ける人工的な境界を設定し、その境界上に境界条件を導入する。即ち、人工境界上の DtN 写像は、その人工境界上で与えられた Dirichlet データに対する外部の非有界領域における解の同じ人工境界上における Neumann データを対応させる写像として定義される。その場合の Neumann データは内部からの解の Neumann データに (-1) を乗じたものに一致する。従って、それは内部領域における非局所境界条件を与える ([6], [12] 参照)。

他方、時間発展問題は扱いが更に難しく、人工的な境界上の境界条件は境界上の過去の解を必要とするため計算コストがかかる。

1994年に Béranger [1] によって内部領域をある種の吸収媒質で囲む Perfectly Matched Layer (PML) という手法が提案された。PML 領域では内部領域から入射する平面波は反射されない。これから、内部領域における解は汚染されないことになる。また、PML 領域内を伝播する波は振幅が指数関数的に減少する。これは以下に示すように波動方程式に減衰項を導入することでモデル化することができる。2次元電磁波現象では PML 領域中で物理変数を人工的に分離して計算することより効果的にシミュレーションできることが [1] で示されている。その後、PML の考えを線形 Euler 方程式や音の方程式に拡張し、それぞれの方程式に減衰項を導入することが試みられている [7], [8], [10], [16], [18], [19], [20]。

2 1次元波動方程式における PML の数学的解析

本論文では、非有界領域での Maxwell 方程式を有界領域において計算するための方法として Béranger [1] により提案された PML を 1次元波動方程式に適用した場合の問題点について考察する。

未知関数 $u(t, x), v(t, x)$ に対する 1次元波動方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t, x) = -\frac{\partial v}{\partial x}(t, x), \quad \frac{\partial v}{\partial t}(t, x) = -\frac{\partial u}{\partial x}(t, x) \quad (1)$$

の初期値問題を考える。初期値 $u(0, x), v(0, x)$ に対する (1) の厳密解は

$$u(t, x) = f(x-t) + g(x+t), \quad v(t, x) = f(x-t) - g(x+t), \quad (2)$$

但し

$$f(x) = \frac{1}{2}(u(0, x) + v(0, x)), \quad g(x) = \frac{1}{2}(u(0, x) - v(0, x)) \quad (3)$$

である。ここで、減衰項 $\sigma(x)$ を導入すると (1) は、

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t, x) + \sigma(x)u(t, x) = -\frac{\partial v}{\partial x}(t, x), \quad (4)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t}(t, x) + \sigma(x)v(t, x) = -\frac{\partial u}{\partial x}(t, x) \quad (5)$$

となる. 関数 $\sigma(x)$ は R において局所可積分な非負値実数関数と仮定する. (4),(5) の厳密解は

$$u(t, x) = \frac{1}{2}(e^{-\int_0^x \sigma(s)ds} f(x-t) + e^{\int_0^x \sigma(s)ds} g(x+t)), \quad (6)$$

$$v(t, x) = \frac{1}{2}(e^{-\int_0^x \sigma(s)ds} f(x-t) - e^{\int_0^x \sigma(s)ds} g(x+t)), \quad (7)$$

但し,

$$f(x) = \frac{1}{2}e^{\int_0^x \sigma(s)ds}(u(0, x) + v(0, x)), \quad (8)$$

$$g(x) = \frac{1}{2}e^{-\int_0^x \sigma(s)ds}(u(0, x) - v(0, x)) \quad (9)$$

で与えられる. 従って, $\sigma(x) = 0 : -L \leq x \leq L$ ならば, 解 u, v は領域 $[-L \leq x \leq L]$ で本来の波動方程式の解と一致する. また, $\sigma(x) > 0$ のとき, u, v は x に関して指数関数的に減衰する. $\sigma(x) > 0$ の領域を Perfectly Matched Layer (PML) と呼ぶ [1].

3 スタガードメッシュを用いた空間と時間の離散化

3.1 減衰項を導入した 1 次元波動方程式に対する FDTD スキーム

本節では 1 次元波動方程式に対する差分法の一つである FDTD 法と呼ばれる手法を紹介し, 自由空間と PML 領域における解の特性を述べる. 有限差分時間領域 (Finite Difference Time Domain:FDTD) 法はスタガードメッシュを用いた差分法の一つである. 同手法は K.S.Yee[2] によって考えられた Yee 格子を用いて Maxwell 方程式の離散化を行うために導入された. 現在, 様々な研究者によってスタガードメッシュを通常の波動方程式に対しても適用することが試みられている [7], [8], [9], [10], [16], [18], [19], [20].

まず, 時間と空間の離散間隔を $\Delta t, \Delta x$ とし, 整数格子点と半整数格子点をそれぞれ以下のように定義する,

$$(t_n, x_m) : t_n = n\Delta t, n \in \mathbb{Z}, \quad x_m = m\Delta x, m \in \mathbb{Z}$$

$$(t_{n+1/2}, x_{m+1/2}) : t_{n+1/2} = (n+1/2)\Delta t, n \in \mathbb{Z}, \quad x_{m+1/2} = (m+1/2)\Delta x, m \in \mathbb{Z}.$$

格子点における関数値 $u(t_n, x_m), v(t_{n+1/2}, x_{m+1/2})$ の近似値をそれぞれ $u_m^n, v_{m+1/2}^{n+1/2}$ とし (4),(5) を離散化すると

$$\frac{1}{\Delta t}(u_m^{n+1} - u_m^n) = -\frac{1}{\Delta x}(v_{m+1/2}^{n+1/2} - v_{m-1/2}^{n+1/2}), \quad (10)$$

$$\frac{1}{\Delta t}(v_{m+1/2}^{n+1/2} - v_{m+1/2}^{n-1/2}) = -\frac{1}{\Delta x}(u_{m+1}^n - u_m^n) \quad (11)$$

となる [2], [17]. ここで, Courant 安定条件を考慮し, 離散化方程式 (10),(11) の解が連続問題の解と一致するように $\Delta t = \Delta x = \tau$ と仮定する. 従って, 離散化スキームは

$$u_m^{n+1} - u_m^n = -v_{m+1/2}^{n+1/2} + v_{m-1/2}^{n+1/2}, \quad (12)$$

$$v_{m+1/2}^{n+1/2} - v_{m+1/2}^{n-1/2} = -u_{m+1}^n + u_m^n \quad (13)$$

となる. 次に PML 領域において離散化を行う. Bérenger のスキーム [1] では係数に指数関数を用いているが, より簡単なスキームもよく使われている. 同スキームを簡易スキームと呼ぶことにする. 簡易スキームを用いて (4),(5) を離散化すると

$$u_m^{n+1} - u_m^n + \frac{\tau\sigma_m}{2}(u_m^{n+1} + u_m^n) = -v_{m+1/2}^{n+1/2} + v_{m-1/2}^{n+1/2}, \quad (14)$$

$$v_{m+1/2}^{n+1/2} - v_{m+1/2}^{n-1/2} + \frac{\tau\sigma_{m+1/2}}{2}(v_{m+1/2}^{n+1/2} + v_{m+1/2}^{n-1/2}) = -u_{m+1}^n + u_m^n \quad (15)$$

となる. 但し, $\sigma_m = \sigma(x_m)$, $\sigma_{m+1/2} = \sigma(x_{m+1/2})$ である. (14),(15) をそれぞれ u_m^{n+1} , $v_{m+1/2}^{n+1/2}$ の時間発展形に書き直すと,

$$u_m^{n+1} = \frac{1 - \tau\sigma_m/2}{1 + \tau\sigma_m/2} u_m^n - \frac{1}{1 + \tau\sigma_m/2} (v_{m+1/2}^{n+1/2} - v_{m-1/2}^{n+1/2}), \quad (16)$$

$$v_{m+1/2}^{n+1/2} = \frac{1 - \tau\sigma_{m+1/2}/2}{1 + \tau\sigma_{m+1/2}/2} v_{m+1/2}^{n-1/2} - \frac{1}{1 + \tau\sigma_{m+1/2}/2} (u_{m+1}^n - u_m^n) \quad (17)$$

となる. ここで, $a_s = (1 - \frac{\tau\sigma_s}{2})/(1 + \frac{\tau\sigma_s}{2})$, $b_s = 1/(1 + \frac{\tau\sigma_s}{2})$, $s = m$ または $m + 1/2$ とすると (16),(17) は

$$u_m^{n+1} = a_m u_m^n - b_m (v_{m+1/2}^{n+1/2} - v_{m-1/2}^{n+1/2}), \quad (18)$$

$$v_{m+1/2}^{n+1/2} = a_{m+1/2} v_{m+1/2}^{n-1/2} - b_{m+1/2} (u_{m+1}^n - u_m^n) \quad (19)$$

となる. 一方, Bérenger のスキーム [1] を用いて (4),(5) を離散化すると

$$u_m^{n+1} = e^{\tau\sigma_m} u_m^n - \frac{1 - e^{\tau\sigma_m}}{\sigma_m \tau} (v_{m+1/2}^{n+1/2} - v_{m-1/2}^{n+1/2}), \quad (20)$$

$$v_{m+1/2}^{n+1/2} = e^{\tau\sigma_{m+1/2}} v_{m+1/2}^{n-1/2} - \frac{1 - e^{\tau\sigma_{m+1/2}}}{\sigma_{m+1/2} \tau} (u_{m+1}^n - u_m^n), \quad (21)$$

従って, $a_s = e^{\tau\sigma_s}$, $b_s = -(1 - e^{\tau\sigma_s})/(\sigma_s \tau)$ である. ここで, FDTD 法における Yee のスキームは, 以下に示すような (弱) 不安定性をもつことを注意しておく. まず, 減衰項がない場合の離散化方程式に対する 2 つの基本解 $\{F_{1m}^n, G_{1m+1/2}^{n-1/2}\}$, $\{F_{2m}^n, G_{2m+1/2}^{n-1/2}\}$ を導入する. 即ち, 解の初期値 ($n = 0$) はそれぞれ

$$F_{1m}^0 = \delta_{0,m}, \quad G_{1m+1/2}^{-1/2} = 0, \quad (22)$$

$$F_{2m}^0 = 0, \quad G_{2m+1/2}^{-1/2} = \delta_{0,m} \quad (23)$$

を満たすとする. 但し, $\delta_{n,m}$ はクロネッカーのデルタである. 全ての解はこれらの基本解の線形結合で表される. ここで, 2 つの基本解が汚染されていることに注意が必要である. 即ち, 基本解は $n > 0$ において明示的に以下のように記述できる:

$$F_{1m}^n = \begin{cases} (-1)^{m+n} : & -n \leq m \leq n, \\ 0 : & \text{その他}, \end{cases} \quad (24)$$

$$G_{1m+1/2}^{n+1/2} = \begin{cases} -(-1)^{m+n} : & -n \leq m < n, \\ 0 : & \text{その他}, \end{cases} \quad (25)$$

且つ

$$F_{2m}^n = G_{1m-1/2}^{n-1/2}, \quad G_{2m+1/2}^{n+1/2} = F_{1m}^n. \quad (26)$$

(24),(25),(26) より, 解の l^2 ノルムは n に対して線形的に増加することがわかる. 従って, 元の問題では成立しているエネルギー保存性が失われることになる. 以上より FDTD 法は (弱) 不安定性をもつことがわかる.

3.2 離散化によって生じる人工的反射の解析

PML 領域において離散化の結果人工的反射が生じることが知られている。また、多数の研究者が様々な観点から、この現象を数理的及び数値的に研究している ([4], [5], [8], [16] 参照)。本節では簡易スキームを用いて離散化を行った場合について考察する。人工的反射の原因を明らかにするため、 $\{u_m^n, v_{m-1/2}^{n-1/2}\}$ を進行波: $u_m^n = \delta_{0,n-m}$, $v_{m-1/2}^{n-1/2} = u_m^n$, としたときの解のふるまいを検討する。 $(-\infty, 0]$ を真空領域, $(0, \infty)$ を PML 領域とする。即ち, $\sigma(x) = 0 : x \in (-\infty, 0]$, $\sigma(x) > 0 : x \in (0, \infty)$ である。進行波が真空中を $x < 0$ からプラス方向へ伝播し, PML 領域に到達したときの時刻を $t = 0$ ($n = 0$) とする。まず, $n = 1/2$ のとき (19) より,

$$v_{m-1/2}^{1/2} = \begin{cases} b_{1/2} : & m = 1, \\ 0 : & \text{その他} \end{cases}$$

である。次に, $n = 1$ のとき (18) より,

$$u_m^1 = \begin{cases} a_0 - b_0 b_{1/2} : & m = 0, \\ b_1 b_{1/2} : & m = 1, \\ 0 : & \text{その他} \end{cases}$$

となる。従って, $u_0^1 = a_0 - b_0 b_{1/2} \neq 0$ ならば必ず人工的反射が生じることになる。 $a_0, b_{1/2}, b_1$ を具体的に表すと

$$u_0^1 = a_0 - b_0 b_{1/2} = \frac{1 - \frac{\tau \sigma_0}{2}}{1 + \frac{\tau \sigma_0}{2}} - \frac{1}{1 + \frac{\tau \sigma_0}{2}} \frac{1}{1 + \frac{\tau \sigma_{1/2}}{2}} = 1 - \frac{1}{1 + \frac{\tau \sigma_{1/2}}{2}} = \frac{\frac{\tau \sigma_{1/2}}{2}}{1 + \frac{\tau \sigma_{1/2}}{2}} \quad (27)$$

となる。式 (27) における u_0^1 の値は $\sigma_{1/2} = \sigma(x_{1/2}) = \sigma(\tau/2) = 0$ でない限り零にはならない。座標が $x_{1/2}$ である点は PML 領域内であり, 前述のように $\sigma(x) > 0$ なので $\sigma_{1/2} > 0$ である。以上より, 簡易スキームを用いると真空領域と PML 領域の境界で振幅が $\tau \sigma(\tau/2) / \{1 + \tau \sigma(\tau/2)\}$ の反射が必ず生じることがわかる。ここで, $\sigma(x)$ が Tayler 展開により

$$\sigma(x) = \sigma_0 + \sum_{k=1}^N \frac{d^k}{dx^k} \sigma(0) x^k + O(x^{N+1}) \quad (28)$$

と表されるとすると, 人工的反射の反射係数は

$$R_s = \sigma_0 \tau + \frac{\sigma'(0)}{2} \tau^2 + O(\tau^3) \quad (29)$$

と書ける。これより反射係数は $\sigma(x)$ の不連続的変化量 σ_0 に比例し, σ_0 が零の場合は, $\sigma(x)$ の境界上における微分値と τ^2 の積に比例することがわかる。更に, 境界上での $\sigma(x)$ の微分値が零の場合には, 反射係数は高々 τ^3 に比例した値になる。

実際の計算では, PML 領域をある点で適切な境界条件を課して打切る必要がある。境界条件に零 Dirichlet 条件を用いた場合, 入射波と同じ振幅をもつ反射波が生じ, 逆向きに伝播して, 真空領域へ再び到達する。また, PML 中を伝播する波は振幅が時間に関して指数関数的に減衰する。

3.3 新しい離散化スキーム

前節の解析より, $\sigma(x)$ の形によらず PML 領域では反射が必ず生じることがわかる。この反射を $\sigma(x)$ が一定である PML 領域において除去するために新スキームを提案する。しかしながら, $\sigma(x)$ が一定でない領域においては依然として反射が生じてしまう。

新スキームを以下のように定義する:

$$u_m^{n+1} = e^{-\tau\sigma_m} u_m^n - e^{-\tau\sigma_m/2} (v_{m+1/2}^{n+1/2} - v_{m-1/2}^{n+1/2}), \quad (30)$$

$$v_{m+1/2}^{n+1/2} = e^{-\tau\sigma_{m+1}} v_{m+1/2}^{n-1/2} - e^{-\tau\sigma_{m+1/2}/2} (u_{m+1}^n - u_m^n). \quad (31)$$

(30),(31) を (18),(19) と同様の形に表すと

$$u_m^{n+1} = a_m^{\text{new}} u_m^n - b_m^{\text{new}} (v_{m+1/2}^{n+1/2} - v_{m-1/2}^{n+1/2}), \quad (32)$$

$$v_{m+1/2}^{n+1/2} = a_{m+1/2}^{\text{new}} v_{m+1/2}^{n-1/2} - b_{m+1/2}^{\text{new}} (u_{m+1}^n - u_m^n); \quad (33)$$

但し, $a_s^{\text{new}} = e^{-\tau\sigma_s}$, $b_s^{\text{new}} = e^{-\tau\sigma_s/2}$, $s = m$ または $m + 1/2$ である. ここで, 前節と同様に反射係数を計算すると, $\sigma_s = \sigma_{s+1/2} = \sigma_0$ より

$$\begin{aligned} R_s &= a_s - b_s b_{s+1/2} = e^{-\tau\sigma_s} - e^{-\tau\sigma_s/2} e^{-\tau\sigma_{s+1/2}/2} \\ &= e^{-\tau\sigma_0} - e^{-\tau\sigma_0/2} e^{-\tau\sigma_0/2} = e^{-\tau\sigma_0} - e^{-\tau\sigma_0} = 0 \end{aligned} \quad (34)$$

となる. これから, $\sigma(x)$ が一定の PML 領域では反射がないことが結論付けられる.

新スキームは $\sigma(x)u(x)$ の離散化を

$$\sigma(x_m)u(t_{n+1/2}, x_m) \approx \frac{1}{\tau} \{ (e^{\tau\sigma_m/2} - 1)u_m^{n+1} + (1 - e^{-\tau\sigma_m/2})u_m^n \} \quad (35)$$

とすることに対応する. また, $\sigma(x)v(x)$ に対しても同様である.

4 数値実験

本章では前章で行った数学的な解析の有効性を確認するために数値実験を行う.

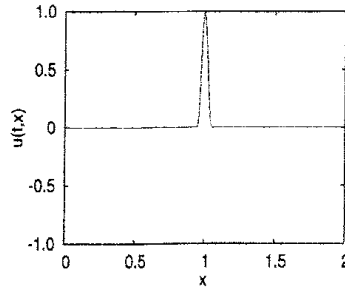
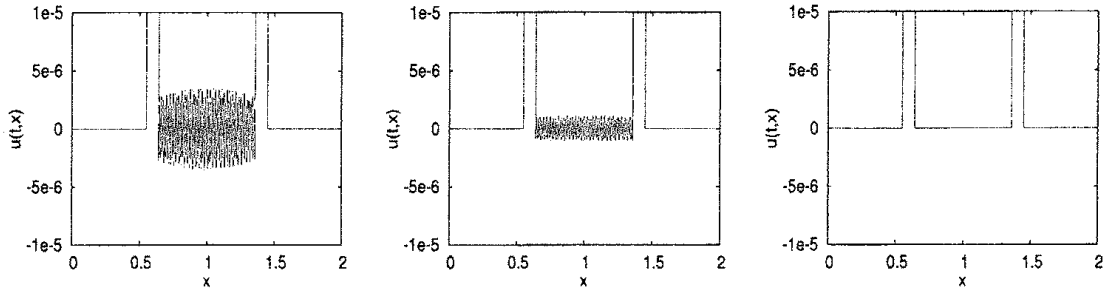
まず最初に, 領域 $[0, 2]$ を全て PML 領域とし, $\sigma(x) \equiv \log 10 = 2.302585 \dots$, $x \in [0, 2]$ とおく. このとき, 振幅が 1 の進行波が $x = 0$ から入射し $x = 2$ で反射して再び $x = 0$ へ戻ってきたときの振幅は $e^{-2 \int_0^2 \sigma(x) dx} = 10^{-4}$ になる. u, v の初期値をそれぞれ,

$$\begin{aligned} u(0, x) &= \begin{cases} \cos^2(20\pi(x - 1.0)) : & 0.95 < x < 1.05, \\ 0 : & \text{その他}, \end{cases} \\ v(0, x) &\equiv 0 \end{aligned}$$

とした. また, 境界条件は零 Dirichlet 条件を用い, $u(t, 0) = u(t, 2) = v(t, 0) = v(t, 2) \equiv 0$ とした.

図 1 - 3 は簡易スキーム (16),(17) と Bérenger スキーム (20),(21) と新スキーム (30),(31) を用いたときの反射波の比較を示している. 時間間隔, 空間間隔は共に $\Delta t = \Delta x = \tau = 0.00625$ である. 横座標, 縦座標はそれぞれ $x, u(t, x)$ を表している. 簡易スキームと Bérenger スキームを用いた場合は初期の波の背後に人工的反射波が見られる. それに対し新スキームを用いた場合は反射波は全く見られない. また, 簡易スキームを用いた場合の反射波の振幅は $\sigma^2 \tau^2$ に比例しており (29) と一致している.

これより, 新スキームを用いた方が PML 領域で $\sigma(x)$ の値が一定の場合には従来のスキームより誤差が少なくなることが予想される. しかしながら, 真空領域と PML 領域の境界で $\sigma(x)$ が不連続に増加すると, (29) で示したように振幅が $\sigma_0 \tau$ に比例した反射波が生じる. そこで, $\sigma(x)$ が一定である領域をもち, 且つ, $\sigma(x)$ の増加に伴う反射をなるべく抑えた分布を探すことを考える. PML 領域を $[L, L + L_p]$ としたとき, $\sigma(x)$ を $[L, L + L_p/2]$ では 3 次スプラインを用いて増加させ,

図 1: $u(0, x)$ の初期形状.図 2: $t = 0.4$ における反射波の比較, 簡易 (左), Bérenger (中央), 新 (右).

$[L + L_p/2, L + L_p]$ では一定とする分布を用いた. $\sigma(x)$ の形状が 3 次スプラインと不連続増加及び線形増加の 3 種類の数値実験を行い, $\sigma(x)$ の分布の違いによる反射波の変化を測定する. 真空領域を $[0, 1.0]$ とし, PML 領域を $[1.0, 1.2]$ とする. 図 4 に $\sigma(x)$ の形状を示す. 横座標, 縦座標はそれぞれ $x, \sigma(x)$ を表している. ここで, $\sigma(x)$ を真空領域と PML 領域の境界で不連続に増加させた場合は, $\sigma(x) \equiv \sigma_0 = 10 \log 10 = 23.02585 \dots : x \in [1.0, 1.2]$ とおく. また, 線形増加及び 3 次スプラインの場合は $\sigma(x) \equiv \frac{4}{3}\sigma_0 = \frac{4}{3}(10 \log 10) = 30.70113 \dots : x \in [1.1, 1.2]$ とおいた. このとき, $\int_{1.0}^{1.2} \sigma(x) dx$ の値は全て同じであるので, 解析的な反射係数は 3 ケースとも 10^{-4} である. 初期値は $u(0, x) \equiv 0, v(0, x) \equiv 0$ とし, 進行波の領域の左端からの非斉次入力値を

$$u(t, 0) = \begin{cases} \sin^2(20\pi t) : & 0.0 \leq t \leq 0.1, \\ 0 : & 1.0 < t \end{cases}$$

とした. また, 領域右端における境界条件は零 Dirichlet 条件を用い, $u(t, 2) = v(t, 2) \equiv 0$ とした.

図 5-7 は $\sigma(x)$ の形状の違いによる反射波の変化と, τ に対する反射波の変化を示している. 横座標, 縦座標はそれぞれ $t, u(t, 0.5)$ である. $t = [1.9, 2.0]$ に見えるピークは解析的な反射波であり, $t = 1.5$ から始まるピークは $\sigma(x)$ の増加に伴う反射波である. 同図より, $\sigma(x)$ を 3 次スプラインを用いて増加させた場合が一番反射が少ないことがわかる. また, τ を $1/2, 1/4$ と変化させたときの反射波はそれぞれ, 不連続増加の場合は $1/2, 1/4$, 線形増加の場合は $1/4, 1/16$, 3 次スプラインでは $1/16, 1/64$ となった. この結果, 人工反射の反射係数は (29) と一致しており, 前章での解析が正しいことが数値的にも検証された.

5 新スキームの 2 次元問題への応用

本章では新スキームを 2 次元の TE モード Maxwell 方程式に応用する ([1], [17]; 289 項, 参照). 空間間隔は $\Delta x = \Delta y = \Delta l$ とし, また, Courant 安定条件を考慮し時間間隔は $\Delta t = \Delta l / \sqrt{2}$ とし

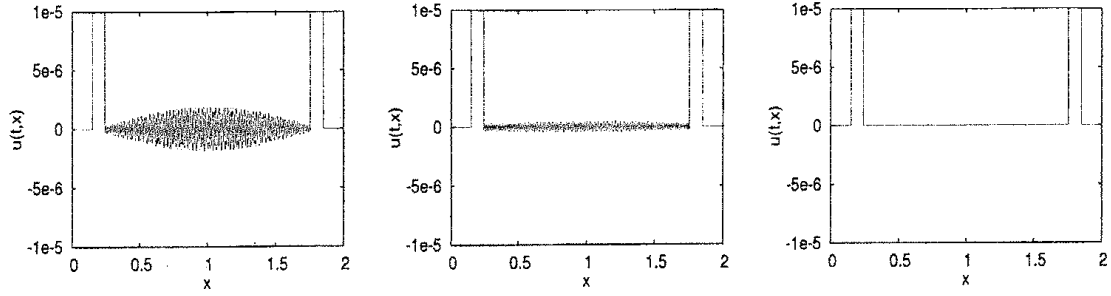


図 3: $t = 0.8$ における反射波の比較, 簡易 (左), Béranger (中央), 新 (右).

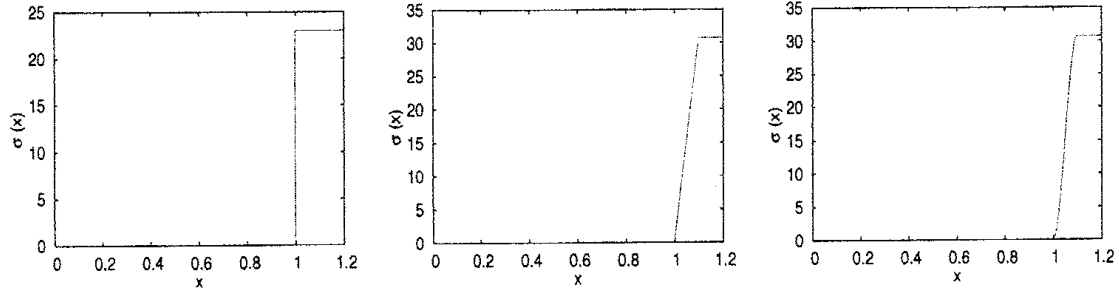


図 4: $\sigma(x)$ の形状, 不連続増加 (左), 線形増加 (中央), 3 次スプライン (右).

た. このとき, 具体的なアルゴリズムは,

$$\begin{aligned}
 E_x^n(i + \frac{1}{2}, j) &= e^{-\sigma_y(j)\Delta t} E_x^{n-1}(i + \frac{1}{2}, j) \\
 &+ \frac{\Delta t}{\Delta l} e^{-\sigma_y(j)\frac{\Delta t}{2}} \{ H_{zx}^{n-\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}) + H_{zy}^{n-\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}) \\
 &- H_{zx}^{n-\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2}) - H_{zy}^{n-\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2}) \}, \quad (36)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 E_y^n(i, j + \frac{1}{2}) &= e^{-\sigma_x(i)\Delta t} E_y^{n-1}(i, j + \frac{1}{2}) \\
 &- \frac{\Delta t}{\Delta l} e^{-\sigma_x(i)\frac{\Delta t}{2}} \{ H_{zx}^{n-\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}) + H_{zy}^{n-\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}) \\
 &- H_{zx}^{n-\frac{1}{2}}(i - \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}) - H_{zy}^{n-\frac{1}{2}}(i - \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}) \}, \quad (37)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 H_{zx}^{n+\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}) &= e^{-\sigma_x(i+\frac{1}{2})\Delta t} H_{zx}^{n-\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}) \\
 &- \frac{\Delta t}{\Delta l} e^{-\sigma_x(i+\frac{1}{2})\frac{\Delta t}{2}} \{ E_y^n(i + 1, j + \frac{1}{2}) - E_y^n(i, j + \frac{1}{2}) \}, \quad (38)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 H_{zy}^{n+\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}) &= e^{-\sigma_y(j+\frac{1}{2})\Delta t} H_{zy}^{n-\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}) \\
 &+ \frac{\Delta t}{\Delta l} e^{-\sigma_y(j+\frac{1}{2})\frac{\Delta t}{2}} \{ E_x^n(i + \frac{1}{2}, j + 1) - E_x^n(i + \frac{1}{2}, j) \}. \quad (39)
 \end{aligned}$$

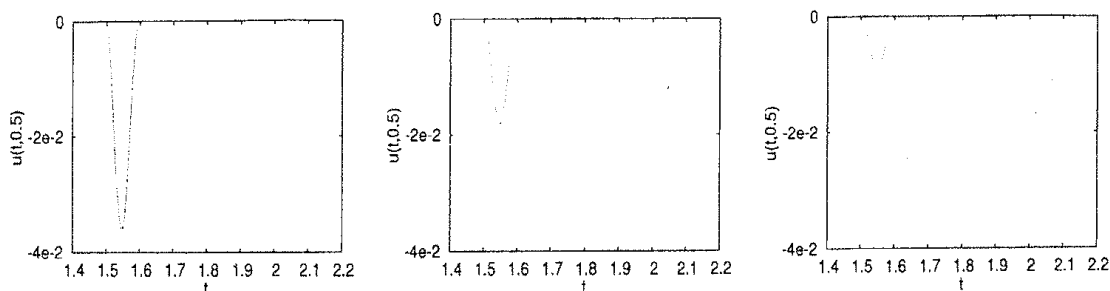


図 5: $\sigma(x)$ を不連続増加させたときの $u(t, 0.5)$ の時間変化, $\tau = 1/160$ (左), $\tau = 1/320$ (中央), $\tau = 1/640$ (右).

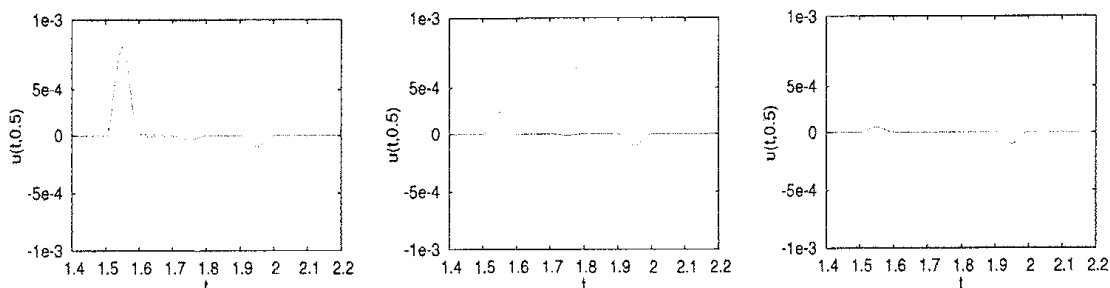


図 6: $\sigma(x)$ を線形増加させたときの $u(t, 0.5)$ の時間変化, $\tau = 1/160$ (左), $\tau = 1/320$ (中央), $\tau = 1/640$ (右).

である. 計算領域を $[-0.7, 0.7] \times [-0.7, 0.7]$ とし, その内, 真空領域を $[-0.5, 0.5] \times [-0.5, 0.5]$ とした. 減衰項 $\sigma(x), \sigma(y)$ の分布は 1 次元の場合のように 3 次スプラインを用いる:

$$\sigma(x) = \begin{cases} \sigma_0 : & -0.7 \leq x \leq -0.6, \\ 2000\sigma_0(x+0.5)^3 + 300\sigma_0(x+0.5)^2 : & -0.6 \leq x \leq -0.5, \\ 0 : & -0.5 \leq x \leq 0.5, \\ -2000\sigma_0(x-0.5)^3 + 300\sigma_0(x-0.5)^2 : & 0.5 \leq x \leq 0.6, \\ \sigma_0 : & 0.6 \leq x \leq 0.7, \end{cases}$$

$$\sigma(y) = \begin{cases} \sigma_0 : & -0.7 \leq y \leq -0.6, \\ 2000\sigma_0(y+0.5)^3 + 300\sigma_0(y+0.5)^2 : & -0.6 \leq y \leq -0.5, \\ 0 : & -0.5 \leq y \leq 0.5, \\ -2000\sigma_0(y-0.5)^3 + 300\sigma_0(y-0.5)^2 : & 0.5 \leq y \leq 0.6, \\ \sigma_0 : & 0.6 \leq y \leq 0.7. \end{cases}$$

但し, $\sigma_0 = 10 \log 10 = 23.02585$ とおいた. このとき, 解析的な反射係数は 10^{-4} である. また, $\sigma(x)$ は y に関して一定であり, $\sigma(y)$ は x に関して一定である. H_z, E_x, E_y の初期値はそれぞれ,

$$\begin{aligned} H_z(0, x, y) &= e^{-(x^2+y^2)/16}, \\ E_x(0, x, y) &\equiv 0, \\ E_y(0, x, y) &\equiv 0, \end{aligned}$$

とした. また, 境界条件は零 Dirichlet 条件を用い,

$$H_z(t, -0.7, y) = H_z(t, 0.7, y) = H_z(t, x, -0.7) = H_z(t, x, 0.7) \equiv 0$$

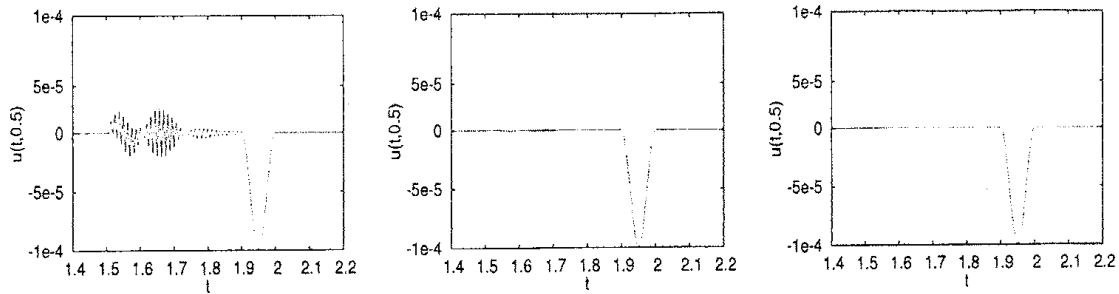


図 7: $\sigma(x)$ を 3 次スプラインを用いて増加させたときの $u(t, 0.5)$ の時間変化, $\tau = 1/160$ (左), $\tau = 1/320$ (中央), $\tau = 1/640$ (右).

$$E_x(t, -0.7, y) = E_x(t, 0.7, y) = E_x(t, x, -0.7) = E_x(t, x, 0.7) \equiv 0$$

$$E_y(t, -0.7, y) = E_y(t, 0.7, y) = E_y(t, x, -0.7) = E_y(t, x, 0.7) \equiv 0$$

とした.

図 8-10 は 2 次元計算における $H_z(t, x, y)$ の時間変化を示している. 横座標, 縦座標はそれぞれ x, y であり, $H_z(t, x, y)$ をグレースケールで表している. 同図より, 初期の進行波が反射せずに伝播する様子が確認できる. また, PML 領域内では進行波の振幅が減衰していく様子が確認できる. これより, 新スキームは 2 次元計算にも適用できると推測される.

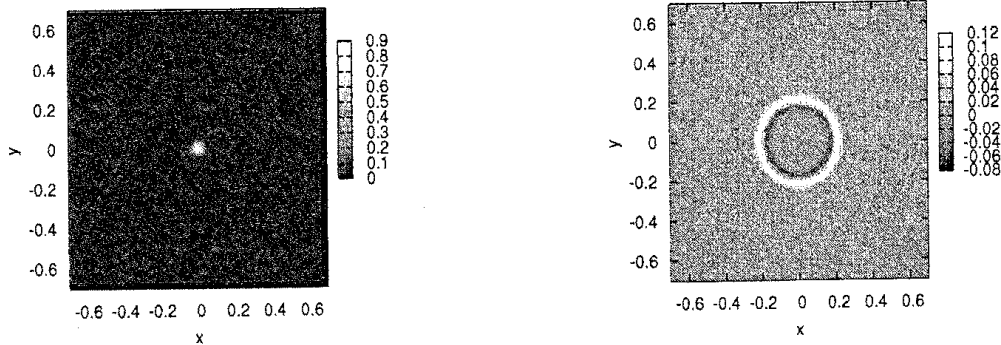


図 8: 2 次元計算における $H_z(t, x, y)$ の時間変化, $t = 0.0$ (左), $t = 0.2$ (右).

6 結論.

本論文では非有界領域での 1 次元波動方程式における FDTD 法に対する PML の数学的解析を行い, 2 次元の Maxwell 方程式に対しても数値実験を TE モードについて行った. 数学的解析では PML 領域での離散化による人工的反射の原因を 1 次元の問題に対して明らかにし, $\sigma(x)$ が一定の領域において反射が生じない新しい離散化スキームを提案した. また, 数値実験により数学的解析の検証と新離散スキームの精度確認を行った. 次に, 新しい離散化スキームを 2 次元の問題に対して適用したところ, 精度のよい計算結果が得られた. 2 次元問題の理論的解析や 3 次元問題の計算法に関する研究が今後の課題である. また, 実際の理工学の問題への応用も課題となる.

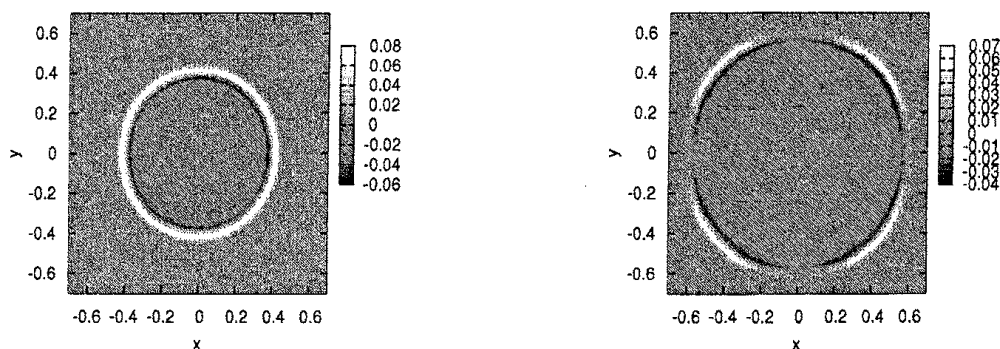


図 9: 2次元計算における $H_z(t, x, y)$ の時間変化, $t = 0.4$ (左), $t = 0.6$ (右).

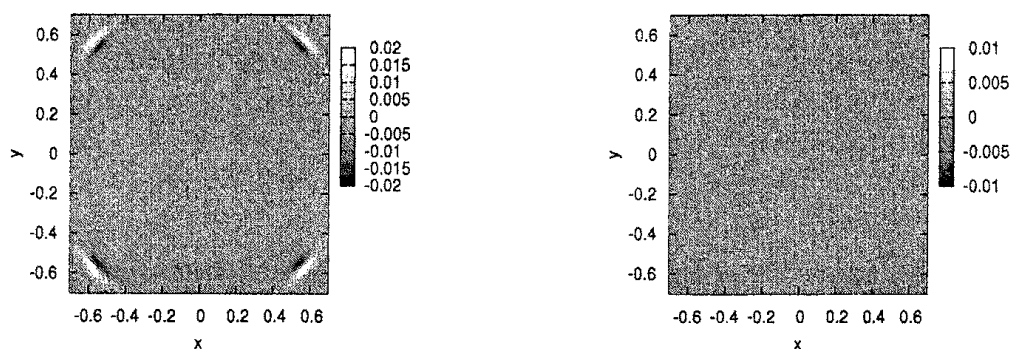


図 10: 2次元計算における $H_z(t, x, y)$ の時間変化, $t = 0.8$ (左), $t = 1.0$ (右).

参考文献

- [1] J.-P. Bérenger, A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves, J. Comput. Physics 114 (1994) 185–200.
- [2] K.S. Yee, Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equation in isotropic media, IEEE Trans. Antennas Propagation AP16 (1966) 302–307.
- [3] S. Abarbanel and D. Gottlieb, A mathematical analysis of the PML method, J. Comput. Physics 134 (1997) 357–363.
- [4] F. Collino and P.B. Monk, The perfectly matched layer in curvilinear coordinates, Technical Report 3049 INRIA, 1996.
- [5] F. Collino and P.B. Monk, Optimizing the perfectly matched layer, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 164, (1998) 157–171.
- [6] D. Givoli, Numerical Method for Problems in Infinite Domains, Elsevier Amsterdam, 1992.

- [7] T. Hagstrom, A new construction of perfectly matched layers for hyperbolic systems with applications to the linearized Euler equations, in: *Mathematical and numerical aspects of wave propagation WAVE 2003 Proceedings*, Springer, 1998, pp.125–129.
- [8] I. Harari, M. Slavutin and E. Turkel, Analytical and numerical studies of a finite element PML for the Helmholtz equation, *J. Comput. Acoustics* 8 (2000) 121–137.
- [9] E. Heikkola, T. Rossi and J. Toivanen, Fast direct solution of the Helmholtz equation with perfectly matched layer or an absorbing boundary condition, *Int. J. Numer. Methods Engrg.* 164, (1998) 157–171.
- [10] F.Q. Hu, On absorbing boundary conditions for linearized Euler equations by a perfectly matched layer, *J. Comput. Physics* 129 (1996) 201–219.
- [11] J.-L. Lions, J. Metral and O. Vacas, Well-posed absorbing layer for hyperbolic problems, *Numer. Math.* 92 (2002) 535–562.
- [12] H.M. Nasir, T. Kako and D. Koyama, A mixed-type finite element approximation for radiation problems using fictitious domain method, *J. Comput. Appl. Math.* 152 (2003) 377–392.
- [13] P.G. Petropoulos, On the termination of perfectly matched layer with local absorbing boundary conditions, *J. Comput. Physics* 143 (1998) 665–673.
- [14] P.G. Petropoulos, Reflectionless sponge layers as absorbing boundary conditions for the numerical solution of Maxwell equations in rectangular, cylindrical, and spherical coordinates, *SIAM J. Appl. Math.* 60 (2000) 1037–1058.
- [15] P.G. Petropoulos and L. Zhao, A.C. Cangellaris, A reflectionless sponge layer absorbing boundary condition for the solution of Maxwell's equations with higher-order staggered finite difference schemes, *J. Comput. Physics* 139 (1998) 184–208.
- [16] Q. Qi and T.L. Geers, Evaluation of the perfectly matched layer for computational acoustic, *J. Comput. Physics* 139 (1998) 166–183.
- [17] A. Taflov and S. Hagness, *Computational Electrodynamics : the Finite-Difference Time-Domain Method*, Artech House, Boston, 2000.
- [18] E. Turkel and A. Yefet, Absorbing boundary layers for wave-like equations, *Applied Numerical Mathematics* 27 (1998) 533–557.
- [19] J.-L. Vay, A new absorbing layer boundary condition for the wave equation, *J. Comput. Physics* 165 (2000) 511–521.
- [20] J.-L. Vay, An extended FDTD scheme for the wave equation: application to multiscale electromagnetic simulation, *J. Comput. Physics* 167 (2001) 72–98.