

高速多重極法と数値逆ラプラス変換法を用いた微小金属の過渡電磁界解析
 Time Domain Analysis of Electromagnetic Problems for Metallic Nanoparticles
 by Fast Multipole Method with Fast Inverse Laplace Transform

○岸本誠也¹, 大貫進一郎²

* Seiya Kishimoto¹, Shinichiro Ohnuki²

Abstract: A novel computational technique is proposed for analysis of nanoscale electromagnetic problems with a large number of unknowns. Our proposed method is based on the combination of the boundary integral equation method (BIEM) and fast inverse Laplace transform. For solving problems with a large number of unknowns, the fast multipole method is applied to BIEM. We show that the reliable simulation can be performed and the computational cost can be reduced.

1. はじめに

対象物をナノサイズとした過渡電磁界解析法として、境界型積分方程式法(Boundary Integral Equation Method; BIEM)^[1]と数値逆ラプラス変換(Fast Inverse Laplace transform; FILT)法^[2]を併用した手法が提案されている。これは任意形状が解析可能で、固有モード解析が容易に行えるなどの利点があるが、計算量、計算機メモリが未知数 N に対し $O(N^2)$ で増大するため、詳細なモデル化やより高精度な解析などが困難であった。

本文では、これらの問題を解析するため、BIEM に高速多重極法(Fast Multipole Method; FMM)を適応する^[3]。また、本提案手法の計算精度と計算時間を検討し、その有用性を示す。

2. 解析法

本文では、解析対象物を Fig. 1 に示す任意の微小金属とする。ここで、対象物は入射波長に比べ十分小さいものとし、静的近似と境界条件により、以下の積分方程式が得られる^[1]。

$$\sigma(\mathbf{r}, s) - \frac{\lambda}{2\pi} \int_S \sigma(\mathbf{r}', s) \frac{\mathbf{n} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} dS' = 2\epsilon_0 \lambda \mathbf{n} \cdot \mathbf{E}^i f(s) \quad (1)$$

ここで、

$$\lambda = \frac{\epsilon(s) - \epsilon_0}{\epsilon(s) + \epsilon_0} \quad (2)$$

$\sigma(\mathbf{r}, s)$ は未知表面電荷密度、 $f(s)$ は入射波のスペクトル、 \mathbf{n} は境界面における外向きの単位法線ベクトルを示す。従来法である BIEM では、式(1)の積分方程式を離散化して得られる連立一次方程式を解くことで表面電荷密度を求める。この際、連立一次方程式の求解に必要な計算量は未知数 N に対し $O(N^2)$ で増加する。このため、詳細なモデル化が必要な場合は未知数が増加し、解析が困難となる。

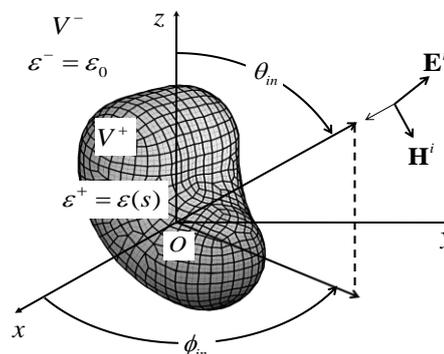


Figure 1. Geometry and coordinate system

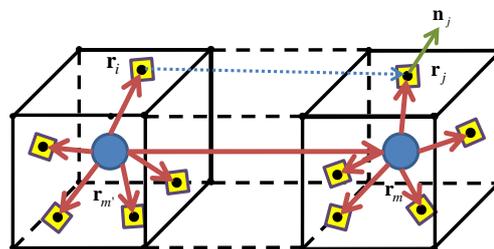


Figure 2. Interaction between element i in box m' and element i in box m

FMM では、未知関数をボックス分割しグループ化する。ボックス内に含まれる各要素から、ボックス中心への寄与を展開し、Fig. 2 のようにそれぞれの要素に対し相互作用を計算する。この際、以下に示すグリーン関数を用い、従来法に比べ高速に演算を行う^[3]。

$$\frac{\mathbf{n} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|^3} = - \sum_{n=0}^L \sum_{m=-n}^n (-1)^n R_{n,m}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_m) \times \sum_{n'=0}^L \sum_{m'=-n'}^{n'} S_{n+n', m+m'}(\mathbf{r}_m' - \mathbf{r}_m) \frac{\partial R_{n,m}(\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_j)}{\partial n_j} \quad (3)$$

但し、 L は FMM の打ち切り項数、

$$R_{n,m}(\mathbf{r}_i) = \frac{1}{(n+m)!} P_n^m(\cos \theta) e^{im\phi} r^n \quad (4)$$

$$S_{n,m}(\mathbf{r}_i) = (n-m)! P_n^m(\cos \theta) e^{im\phi} \frac{1}{r^{n+1}} \quad (5)$$

FMM の計算量は $O(N^{1.5})$, ボックス分割を更に行った多重レベル拡張時では $O(N)$ の計算量となる。

時間応答解析を行うため、複素周波数領域で求めた関数 $F(s)$ を FILT 法により時間領域へ変換する。FILT 法では、逆ラプラス変換を以下の式で計算する^[2]。

$$f(\mathbf{r}, t) := \int_{\gamma-i\omega}^{\gamma+i\omega} F(s) E_{ec}(st, \alpha) ds \approx \frac{e^\alpha}{t} \sum_{m=1}^M F_m \quad (6)$$

ここで、

$$F_m = (-1)^n \operatorname{Im} \left[F \left\{ \frac{\alpha + i(m-0.5)\pi}{t} \right\} \right] \quad (7)$$

$$E_{ec}(st, \alpha) = \frac{e^\alpha}{2 \cosh(a-st)} \quad (8)$$

$$= \frac{e^\alpha}{2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} i(-1)^m \frac{1}{st - [\alpha + i(m-0.5)\pi]}$$

M は FILT 法の打ち切り項数, α は有効桁数を示す。

3. 数値結果

解析対象物を微小金属球とし、提案法の計算精度について検討する。ここで、球の半径は 2.5 nm, 媒質は銀とし、その誘電率を Lorentz-Drude モデルにて定義した^[3]。入射波は電界が x 方向成分のみを持ち z 軸方向に進行する正弦波とした。Fig. 3 に観測点 $x = 3.0$ nm, $y = z = 0$ における電界の時間応答を示す。本提案法によって得られた数値結果と厳密解が図上で良く一致していることが確認できる。

Fig. 4 に $t = 19.2$ fs における、FILT 法の打ち切り項数に対する本手法と厳密解の相対誤差を示す。ここで、相対誤差の収束する桁数は $10^{-\alpha}$ となり、有効桁数により計算精度を制御できることが確認できる。

Fig. 5 に未知数に対する計算時間を示す。実線で従来法である BIEM-FILT 法による計算時間、破線で FMM-FILT 法の計算時間を示す。未知数 N が 2,000 を超えるあたりで FMM による高速化が確認でき、 N が 25,000 を超えると、従来法に対し 10 倍以上高速に計算できることがわかる。

4. まとめ

本文では、微小金属の過渡電磁界解析において高速化のため、FMM と FILT 法を併用した数値解析手法を提案した。本手法の計算精度を検討し、計算誤差を制御できることを示した。また、未知数が 25,000 の場合、10 倍以上の高速化が可能であることを示した。

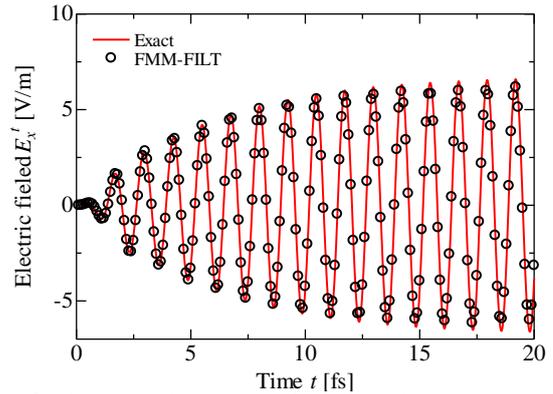


Figure 3. Time domain response for a metallic nanosphere

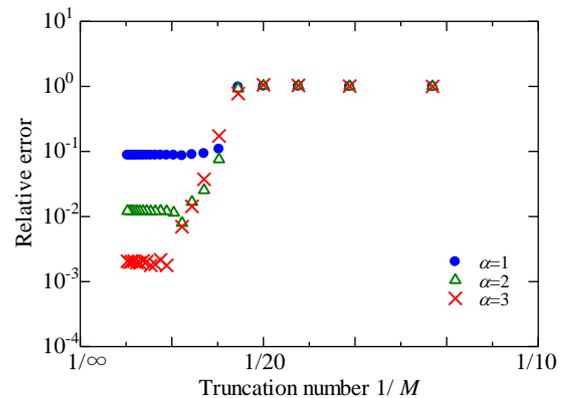


Figure 4. Convergence test for the truncation number M .

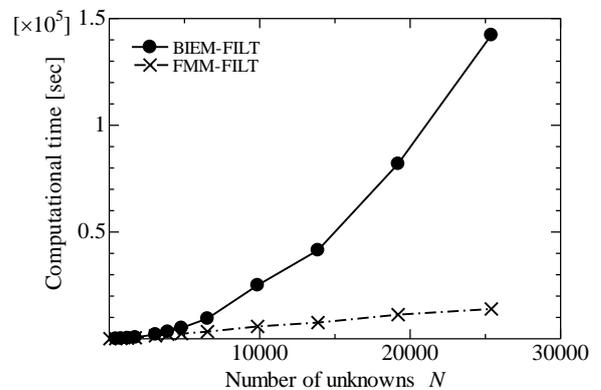


Figure 5. Computational time for varying the number of unknowns

5. 謝辞

本研究の一部は、日本大学学術戦略プロジェクト、及び私立大学戦略的研究基盤形成支援事業の援助を受けて行われた。

6. 参考文献

- [1] I.D. Mayergoyz, et al. : Physical Review B, Condens. Matter, Vol. 72, pp. 155412-1-155412-15, 2005.
- [2] T. Hosono : Radio Science, Vol.16, pp.1015-1019, 1981.
- [3] S. Kishimoto, et al. : Journal of Electromagnetic Waves and Applications, Vol.26, No.8/9, pp. 997-1006, 2012.