

時間領域差分法

— 光学分野への応用を期待して —

市川 裕之

電磁波を扱うさまざまな分野ではそれぞれの応用に応じた電磁場の解析方法がある。可視領域を中心とした光の分野では、これまでほとんどの場合、スカラー波動方程式によって光の振舞を記述することができた。ところが電子ビーム直接描画をはじめとする近年の微細加工技術の進歩により、数十 nm オーダー以下の構造を作製することも可能になってきた。構造の大きさが数波長以下になると構造境界の効果が無視できなくなってくるため、電磁理論的に、すなわちベクトル波動方程式を用いて問題に対処する必要がある^{1,2)}。

その解析的な取り扱い、古くは Sommerfeld による、無限に薄い完全導体の半平面による平面波の回折の問題の解法³⁾に始まり、今世紀前半では多くの数学者の研究テーマとなり、膨大な量の論文が発表されている⁴⁾。しかし、厳密な回折問題を解析的に解ける構造はごく限られており、ほとんど実用的ではないといえる。コンピューターの普及と進歩に伴い、これに代わって登場してきたのがベクトル波動方程式を数値的に解いていこうとする手法で、現在ではさまざまな問題に対して利用されている⁵⁻⁸⁾。

光の分野でこれまで電磁理論的な問題に使用されてきた数値的解法のほとんどすべては周波数領域の手法である。すなわち、光の波動の表記 $\exp i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ から時間に依存する項を省いたもので、この場合、問題はベクトルヘルムホルツ方程式を解くことに帰着する。これが許されるのは電磁波が正弦的な振動をしている場合のみであり、私たち光学関係者の身近なところでは連続発振レーザーを光源とする場合がこれに相当する。一方、パルスレーザーからの光はそのパルス幅に応じた有限のスペクトル幅を有しており、特にフェムト秒オーダーのパルスでは、もはや単一

波長の光とは言い難い。したがって、媒質の分散や非線形性の影響は無視できなくなる。このような場合、パルス波形をフーリエ変換して得られた周波数スペクトルの各成分に対して周波数領域の計算方法を適用するというのでは対応することはできない。

これに対して、電磁場の逐次的な時間変化をシミュレートする数値解法として時間領域差分法 (finite-difference time-domain method: 以下 FDTD 法) と呼ばれるものがある。これは 1966 年に Yee⁹⁾ によってその基本概念が提案された方法で、分散性・非線形性を含むさまざまな媒質や一般的な形状の対象物体に適用可能なものである。しかも、多くの他の計算法と異なり、TE 波も TM 波も全く同様に扱うことができる。また、時間領域の計算法であるため、任意の場所での電磁場の時間変化を把握できることから、非定常状態や過渡現象の解析に特に威力を発揮する。このような特徴のため、FDTD 法に関する文献数は近年指数関数的に増加しており¹⁰⁾、特に、電磁界理論やアンテナなどの分野では今や標準的な手法であるといってもよいようである。ところが、光学の分野では対象とする構造の大きさや対象物の間隔が使用する電磁波の波長に比べると大きい場合、計算時間と記憶容量への負担が大き過ぎることなどが原因となつてか、これまであまり利用されておらず、一般にはほとんど知られていなかったのが実情である。

しかし、微細な光学的構造や超短光パルスの実現・普及に伴い、レンズの結像特性¹¹⁾、非線形ファブリー・ペロー共振器¹²⁾、非線形導波路¹³⁾、フェムト秒光ソリトン^{14,15)}、微細回折格子¹⁶⁻¹⁹⁾、近接場光学²⁰⁾に関する研究等がすでに報告されている*1。FDTD 法の特徴を考えると、光学分野では、非周期的な構造、パルス光の振舞、非線形光学などで、し

愛媛大学工学部電気電子工学科 (〒790-8577 松山市文京町 3)
E-mail: hichikaw@dpc.ehime-u.ac.jp

*1 FDTD 法を使用し、かつ、周波数的に光学の範疇に入る研究報告の一例にすぎないことに注意されたい。

かも対象とする物体の構造が波長に比べてあまり大きくない場合にその力を発揮できるのではないかと考える。

FDTD 法に関する参考書や解説論文等は和文・英文ともにすでにいくつか出版されているが²¹⁻²³⁾、ある程度複雑な数値計算法の常で、それらを読んだだけでプログラムを書いて実際の計算を実行することは容易ではない。本稿では、光学関係者になじみの深い座標系等を使用し、FDTD 法の原理を数式を追って説明し、読者が光学分野での電磁波問題に適用する際の必要最低限の知識を得られることを目的とする。このため、本稿で扱う媒質は非分散・線形・等方的なものに限定する。

1. マクスウェルの方程式の差分化

電磁波の振舞はマクスウェルの方程式で記述される。通常、教科書等では4つのベクトル微分方程式が載っているが、それらがすべて独立であるわけではなく、2つの回転方程式、

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J}_0 + \sigma \mathbf{E} + \epsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (1)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \quad (2)$$

だけで十分である。ここで、 \mathbf{E} は電場、 \mathbf{H} は磁場、 \mathbf{J}_0 は外部印加電流密度、 σ は導電率、 ϵ は誘電率、 μ は透磁率である。

FDTD 法では、電磁場を時間・空間領域で離散化し、逐次的にマクスウェルの方程式を解いていくことになる⁹⁾。まず、解析したい空間領域を直方体形状の単位格子^{*2}に分割し、その各面上に電磁場を評価する標本点を配置する(図1)。ここで、 i, j, k はそれぞれ x, y, z 方向の離散的な座標で正の値をとる。FDTD 法では慣習的に原点を $(i, j, k) = (1, 1,$

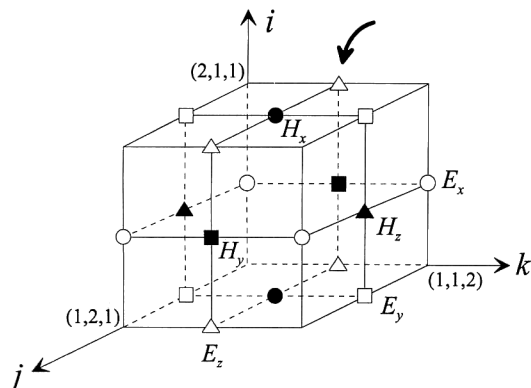


図1 FDTD 法の単位格子。○： E_x 、□： E_y 、△： E_z 、●： B_x 、■： B_y 、▲： B_z 。

1)としている。したがって、例えば図中矢印で示された点は電場 $E_z(2,1,1 \frac{1}{2})$ と表される。これらの等間隔に配置された電場と磁場の標本点の位置は互いに異なっていることに注意する。次に時間的には、ある瞬間には電場の全標本点で、次の瞬間には磁場の全標本点でというように、電場と磁場は交互に計算されていく。これらは、マクスウェルの方程式により、電磁場の時間変化は互いの回転によって表現できることに対応していると解釈できる。

本来、電磁場の問題は3次元であるが、説明と読者の理解の便を考え、本稿では光軸を z 軸とした xz 平面内の2次元問題に限定する。この場合、媒質および電磁場の構造は y 方向では一様であるため、具体的な取り扱いに関しては、図1で $j=1 \frac{1}{2}$ の平面内の電磁場を考えればよい。したがって、標本点の配置は図2のようになる。

これらを踏まえ、上記の式(1)、(2)に対して時間・空間の両面で(中心)差分化、すなわち、変数 s の関数 f について、

$$\frac{\partial f(s)}{\partial s} \rightarrow \frac{f(s+\Delta s/2) - f(s-\Delta s/2)}{\Delta s} \quad (3)$$

を行う。波源を含まない領域では式(1)において $\mathbf{J}_0 = 0$ だから、TE入射^{*3}に関しては、

$$E_y^{n+1}(i,k) = \frac{1 - \sigma(i,k)\Delta t/2}{1 + \sigma(i,k)\Delta t/2} \frac{\epsilon(i,k)}{\epsilon(i,k)} E_y^n(i,k) + \frac{\Delta t/\epsilon(i,k)}{1 + \sigma(i,k)\Delta t/2} \times \left\{ \frac{H_x^{n+1/2}(i, k + \frac{1}{2}) - H_x^{n+1/2}(i, k - \frac{1}{2})}{\Delta z} \right\}$$

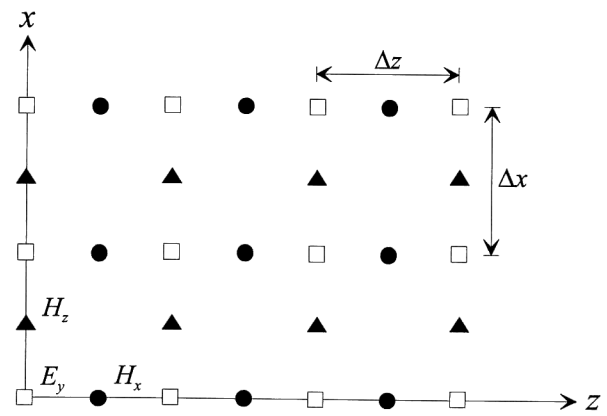


図2 2次元問題の標本点配置。□： E_y 、●： B_x 、▲： B_z 。

*3本稿では、TEとTMの名称に関して物理学・電波工学などで通常使用されている定義を用いているが、FDTD法関連のほとんどの文献ではTEとTMの定義がそれとは逆になっているので、注意する必要がある。

*2英語では cell, lattice あるいは grid などと呼ばれる。

$$\left. -\frac{H_z^{n+1/2}\left(i+\frac{1}{2},k\right)-H_z^{n+1/2}\left(i-\frac{1}{2},k\right)}{\Delta x} \right\} \quad (4)$$

$$H_x^{n+1/2}\left(i,k+\frac{1}{2}\right)=H_x^{n-1/2}\left(i,k+\frac{1}{2}\right) + \frac{\Delta t}{\mu\left(i,k+\frac{1}{2}\right)} \frac{E_y^n(i,k+1)-E_y^n(i,k)}{\Delta z} \quad (5)$$

$$H_z^{n+1/2}\left(i+\frac{1}{2},k\right)=H_z^{n-1/2}\left(i+\frac{1}{2},k\right) - \frac{\Delta t}{\mu\left(i+\frac{1}{2},k\right)} \frac{E_y^n(i+1,k)-E_y^n(i,k)}{\Delta x} \quad (6)$$

となる。ここで、 n は時間座標で自然数、 Δt は時間ステップ、 $\Delta x, \Delta z$ はそれぞれ x, z 方向の標本点の間隔である。 $\Delta x, \Delta z$ の大きさは、一般に、波長の十分の一程度以下といわれているが、筆者の経験¹⁷⁾ では、光の周波数ではもっと小さい値をとる必要があるようである。なお、時間ステップは以下の安定化条件を満たす必要がある。

$$\Delta t \leq \frac{1}{v\sqrt{(\Delta x)^{-2} + (\Delta z)^{-2}}} \quad (7)$$

ここで v はその媒質中での電磁波の速度である。この条件は非常に厳密で、ほんのわずかでも時間ステップがこの式から外れていると、伝搬に伴い電磁場は急速に不安定になり発散してしまう。

また、媒質定数 ε, μ, σ は各電磁場の標本点が代表している空間の平均値をとるものとする。光学分野では、透磁率は媒質によらず一定で誘電率の変化のみを問題とする場合がほとんどなので、異なる媒質同士の境界面は電場の標本点上を通るように設定する場合が多い。例えば、図3に示すような、2つの均質媒質からなる構造の境界の場合、矢印で示された位置 (i, k) は点線で囲まれた領域を代表するから、その点での誘電率は、

$$\varepsilon(i, k) = \frac{3\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{4} \quad (8)$$

と表す。 μ, σ についても同様に取り扱う。なお、完全導体と

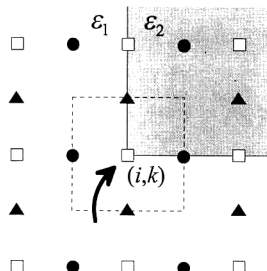


図3 誘電率の定義。 ε_j : 媒質 j の誘電率。 \square : E_y , \bullet : B_x , \blacktriangle : B_z 。

の境界面では、電場の境界面内の成分をゼロとすればよい。

前述のように、電場と磁場は時間・空間ともに互いに $1/2$ ステップ分のずれがある。プログラムを書く上でこの $1/2$ は不便であるため、磁場の時間ステップの表記を $+1/2$ だけずらし、 $n+1/2 \rightarrow n+1$ とし、電磁場の位置座標に関しても $i+1/2 \rightarrow i$ などとする。さらに、 ε, μ, σ については、標本点が代表する電磁場の成分を添字につけて区別する。TE波の場合は μ についてだけそれを考慮すればよい。この結果、式(4)~(6)は以下のように書き換えられる。

$$E_y^{n+1}(i, k) = \frac{1 - \sigma(i, k)\Delta t/2}{1 + \sigma(i, k)\Delta t/2} \frac{\varepsilon(i, k)}{\varepsilon(i, k)} E_y^n(i, k) + \frac{\Delta t/\varepsilon(i, k)}{1 + \sigma(i, k)\Delta t/2} \frac{\varepsilon(i, k)}{\varepsilon(i, k)} \times \left\{ \frac{H_x^{n+1}(i, k) - H_x^{n+1}(i, k-1)}{\Delta z} - \frac{H_z^{n+1}(i, k) - H_z^{n+1}(i-1, k)}{\Delta x} \right\} \quad (9)$$

$$H_x^{n+1}(i, k) = H_x^n(i, k) + \frac{\Delta t}{\mu_x(i, k)} \frac{E_y^n(i, k+1) - E_y^n(i, k)}{\Delta z} \quad (10)$$

$$H_z^{n+1}(i, k) = H_z^n(i, k) - \frac{\Delta t}{\mu_z(i, k)} \frac{E_y^n(i+1, k) - E_y^n(i, k)}{\Delta x} \quad (11)$$

こうして得られた式が差分されたマクスウェルの方程式であり、電磁場の時間・空間的な変化、すなわち光が伝搬する様子を記述するものである。FDTD法では解析領域内の電磁場が安定するまでこれらの式を繰り返し計算するわけである。

2. 初期条件

前項で導いた式は媒質中に波源が存在しない場合のものであるため、計算の初期条件として光源を導入する。ここでは、光学分野では最も頻繁に使われる単一波長連続光の平面波を例にとり説明する。

2.1 ハードソース

まず、一番簡単なものはハードソースと呼ばれる形式で、ある直線上に並ぶ標本点の電磁場を正弦的に強制振動させるものである。例えば、図2のような配置において $k=k_s$ の一列に位置する電磁場を以下のようにすれば、 z 軸に対し角度 θ で伝搬する平面波が生成される。

$$E_y^n(i, k_s) = \sin \left[2\pi \frac{c}{\lambda} \left\{ n\Delta t - \frac{\sqrt{\varepsilon_r}}{c} (i-1)\Delta x \sin \theta \right\} \right] \quad (12)$$

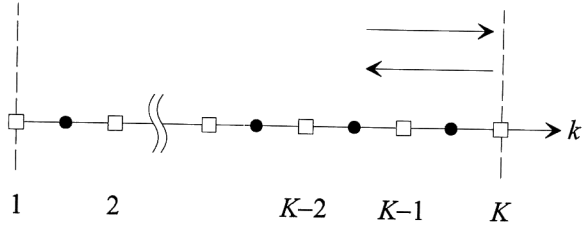


図4 Murの1次の吸収境界条件の考え方, □: E , ●: B .

$$H_x^n(i, k_s) = -\sin \left[2\pi \frac{c}{\lambda} \left\{ \left(n - \frac{1}{2} \right) \Delta t - \frac{\sqrt{\epsilon^r}}{c} \left((i-1) \Delta x \sin \theta + \frac{\Delta z}{2} \cos \theta \right) \right\} \right] \times \frac{\sqrt{\epsilon^r} \cos \theta}{Z_0} \quad (13)$$

$$H_z^n(i, k_s) = \sin \left[2\pi \frac{c}{\lambda} \left\{ \left(n - \frac{1}{2} \right) \Delta t - \frac{\sqrt{\epsilon^r}}{c} \left(i - \frac{1}{2} \right) \Delta x \sin \theta \right\} \right] \frac{\sqrt{\epsilon^r} \sin \theta}{Z_0} \quad (14)$$

ここで, c , $Z_0 = \sqrt{\mu_0/\epsilon_0}$ はそれぞれ真空中の光速と固有インピーダンス, ϵ^r は光源のある媒質の比誘電率である. このモデルでは E_y の標本点を基準とし, H_x , H_z に関しては, E_y より $\Delta t/2$ だけ早く, それぞれ $+\Delta z/2$, $+\Delta x/2$ だけ離れた位置にあることを考慮している. n が1から始まって増加するに伴い, $k > k_s$ の方向へ進行波が, $k < k_s$ の方向へは後退波がそれぞれ伝搬していく.

この方法の利点は, 現象が理解しやすいこと, および, 電磁場の振動が安定していることである. その一方で, 強制振動により $k = k_s$ の面に (数値的な) 障壁が形成されることになり, 光学素子など解析対象物体からの反射・散乱光がこの面で反射され, 計算を繰り返すうちに電磁場の発散や実際とは異なる値への収束を引き起こしてしまう. これを避けるためには, 光源面と対象物体の間の距離を大きくとる必要があり, 計算機のメモリーや計算回数から計算効率が悪くなる.

2.2 ソフトソース

上述の問題を避けるためには, ソフトソースとも呼ばれる, 外部印加電流密度 \mathbf{J}_0 を光源位置に含む方法が使用できる. ここでは Zhao による提案²⁹⁾を紹介する. この方法では, 光源位置の電場のみを,

$$E_y^{n+1}(i, k_s) = E_{y,\text{prop}}^{n+1}(i, k_s) + E_{y,\text{inc}}^n(i, k_s) \quad (15)$$

の形で表現する. ここで, $E_{y,\text{prop}}^{n+1}(i, k_s)$ は $k = k_s$ における通常の伝搬の式(9), $E_{y,\text{inc}}^n(i, k_s)$ は光源の振動の式, 例えば正弦振動するハードソースの式(12)である. 一方, 磁場に関する初期条件は何も設定しない. すなわち, 式(10), (11)をそのまま使用する.

この方法を用いれば, 光源と対象物体の間隔を大きくと

る必要はないため, 空間的にも時間的にも効率よく計算ができる. ただし, 筆者の経験では, ハードソースを用いた場合に比べて電磁場の安定性は悪いようである.

3. 境界条件

FDTD法のように, 解析したい対象物を囲む閉じた (有限な大きさの) 空間領域を規定し, その範囲内で数値計算を行う場合には, 一般に, その解析領域とは現実の空間中に便宜上仮定した数値計算のための領域である. したがって, 人工的に作られたその境界面では現実には起こり得ない電磁波の反射が生じることになる. このような不要な反射をなくし, 境界面に入射する電磁波の全エネルギーが, あたかもそこには境界面が存在しないかのように, そのまま解析領域外へ流れ出てしまうように設定された条件が吸収境界条件 (ABC: absorbing boundary condition) であり, 大きくは2種類に分けられる.

ひとつは, 境界面からの反射係数がゼロになるように微分方程式を解いて境界面上の電場の値を決定する手法で, differential-based ABC と呼ばれ, Mur による境界条件³⁰⁾が最も一般的に利用されている. もうひとつは, 境界面の外側に置かれた仮想的な媒質中での吸収によって反射をゼロに近づける手法で, material-based ABC と呼ばれ, Berenger によって提案された PML (perfectly matched layer) 法³¹⁾が現在までのところ最も効率がよいとされている. ここでは, 両者の代表的なものを紹介する. なお, 原理的には, これらの境界条件はある特定の入射角度に対して最適化されるため, 角度のずれに伴い反射率は増大することに注意する必要がある.

このほかにもさまざまな手法が提案されているが, FDTD法で正しい結果を効率よく得るためには適切な吸収境界条件が不可欠であるため, 現在でも重要な研究テーマとなっている.

3.1 Murの吸収境界条件

原理の説明のため z 軸に沿った1次元の系を考える. 図4に示すように, 解析領域を $1 \leq k \leq K$ の電場標本点間とし, $k = K$ の境界面に入射する光を考える. すでに述べたように, 解析領域の境界は電場の標本点上に置いているため, 電場に関する境界条件のみを考慮すればよい.

ここで, 電場 E のしたがう波動方程式 $\partial^2 E / \partial z^2 - (1/v^2) \partial^2 E / \partial t^2 = 0$ を下のように変形する.

$$\left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \right) \left(\frac{\partial}{\partial z} - \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \right) E = 0 \quad (16)$$

左辺の第1項は後退波, 第2項は進行波を表している. ここで,

$$\left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t}\right)E = 0 \quad (17)$$

ならば、波動方程式の一般解のうち後退波の振幅がゼロになる。すなわち、 $k=K$ の境界面において式(17)が成り立てば、その境界からの反射波は存在しないことになる。 $k=K-\frac{1}{2}$ の位置、 $n+\frac{1}{2}$ の時刻に関して式(17)を差分化すると、

$$E^{n+1}(K) = \frac{v\Delta t - \Delta z}{v\Delta t + \Delta z} \{E^{n+1}(K-1) - E^n(K)\} + E^n(K-1) \quad (18)$$

が得られる。これが1次の Mur の吸収境界条件である。この条件は境界に垂直に入射する光に対しては反射をゼロにすることができるが、入射角度の増加に伴い反射は急増する。

したがって、2次元平面の問題に対しては2次元の波動方程式、

$$\frac{\partial^2 E}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E}{\partial z^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = 0 \quad (19)$$

に対して同様の操作を施して得られる、2次の Mur の吸収境界条件を使用するほうがよい。結果については、複雑になるためここでは省略するので、文献³⁰⁾を参照していただきたい。ただし、2次の条件であっても、入射角度が 20° を超えると反射が増加し、 90° の入射角に対しては100%反射されてしまう。

3.2 Berenger の PML

誘電率 ϵ 、透磁率 μ の均質な誘電体から、誘電率 ϵ_p 、透磁率 μ_p の均質な損失媒質へ平面波が垂直入射するとき、

$$\epsilon_p = \epsilon - i \frac{\sigma_p}{\omega} \quad (20)$$

$$\mu_p = \mu - i \frac{\sigma_p^*}{\omega} \quad (21)$$

$$\frac{\sigma_p}{\epsilon} = \frac{\sigma_p^*}{\mu} \quad (22)$$

が成り立つならば、両媒質の間にはインピーダンス整合があり、その周波数にかかわらず、境界面からのフレネル反射係数³²⁾はゼロになることが知られている³³⁾。ここで、 σ_p は導電率、 σ_p^* は導磁率⁴⁾である。

Berenger は、損失媒質中を伝搬する平面波の x 成分と z 成分が独立にインピーダンス整合を満たすように導電率・導磁率を決めてやることによって、任意の周波数・入射角度に関して境界面で反射を起こさない媒質を得ることができることを示した。このような媒質を PML (perfectly matched layer) と呼ぶことにする⁵⁾。

⁴⁾ 導電率 electric conductivity に対応して導磁率 magnetic conductivity と呼ばれる。

⁵⁾ この PML は現実には存在しない仮想的な媒質である。

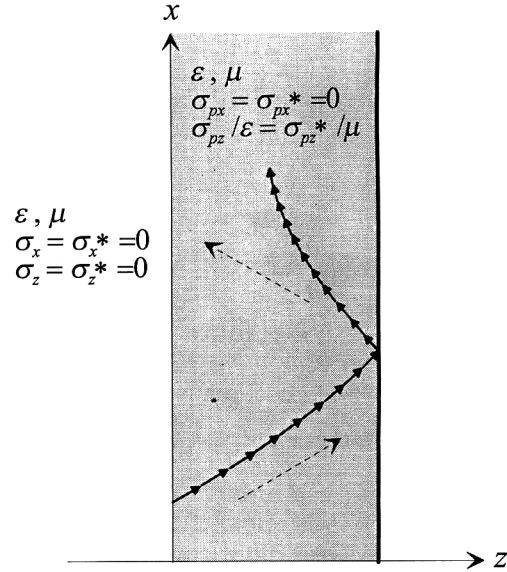


図5 PMLに入射した光が伝搬に伴い吸収されていく様子。

PML内のTE波の振舞は、電場を $E_y = E_{yx} + E_{yz}$ のように x, z 2つの成分に分け、以下のように4つの式で表現される。なお、導電率・導磁率も必然的に x, z 成分に分けられる。

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} = \epsilon \frac{\partial E_{yz}}{\partial t} + \sigma_{pz} E_{yz} \quad (23)$$

$$-\frac{\partial H_z}{\partial x} = \epsilon \frac{\partial E_{yx}}{\partial t} + \sigma_{px} E_{yx} \quad (24)$$

$$\frac{\partial (E_{yx} + E_{yz})}{\partial z} = \mu \frac{\partial H_x}{\partial t} + \sigma_{pz}^* H_x \quad (25)$$

$$-\frac{\partial (E_{yx} + E_{yz})}{\partial x} = \mu \frac{\partial H_z}{\partial t} + \sigma_{px}^* H_z \quad (26)$$

例えば、誘電体とPMLの境界が z 軸に垂直な場合、 x, z 成分に関するインピーダンス整合の条件は、それぞれ、

$$\sigma_{px} = \sigma_{px}^* = 0 \quad (27)$$

$$\frac{\sigma_{pz}}{\epsilon} = \frac{\sigma_{pz}^*}{\mu} \quad (28)$$

となる。すなわち、 x 成分に対しては、PMLは解析領域の誘電体と同じ媒質ということになる。

解析領域の境界面の外側に置かれたこのPMLに無反射で入射した光のうち z 成分は伝搬とともに吸収されていく。しかし、数値計算においてはPMLの層の厚さは有限であるため、PML自身の外側の境界からの反射が生じることになる。したがって、実際の計算では、有限な厚さのPMLの外側は完全導体で取り囲み、そこに至ったすべての光を反射させ、復路のPML中でさらに吸収を行い、最終的に解析領域に戻ってくる光をできるだけゼロに近づけるといった方法をとる。また、 x 成分の光はこのPML中では吸収されずそのまま伝搬していく。これを模式的に示

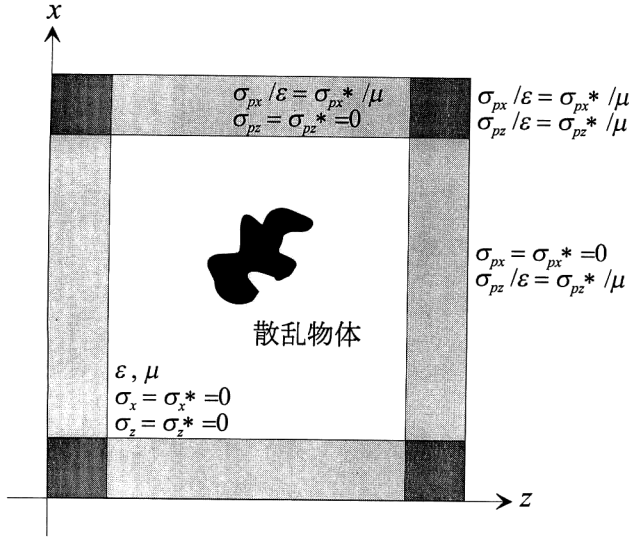


図6 PMLによって解析領域を囲み込む。x軸に垂直な境界面では、 $\sigma_z = \sigma_z^* = 0$ 、z軸に垂直な境界面では、 $\sigma_x = \sigma_x^* = 0$ 。

したのが図5である。ここで、太矢印は各位置での光のポインティングベクトルを、点線は波面の法線ベクトルを表している。PMLにおいても境界面に対して大きな角度で入射した光はあまり吸収されずに反射されるが、このようなPMLで解析領域の四方を囲んでおけば、直交する別の境界面にあるPMLで結局吸収されてしまう(図6)。

なお、このとき、PMLの導電率・導磁率は一律ではなく、解析領域との境界でゼロとし、徐々に増加させるようにするのが普通である。例えば、PMLの厚さを ρ_m 、PMLの一番外側における導電率を σ_m とすると、PML境界面からの距離 ρ に対して、

$$\sigma(\rho) = \sigma_m \left(\frac{\rho}{\rho_m} \right)^M \quad (29)$$

とし、 $M=2,3,4$ を用いる方法がよく使われる。このとき、入射角 θ に対して光がPMLを往復した後、解析領域に戻ってきたときの光の振幅反射率は、

$$R(\theta) = \exp\left(-\frac{2}{M+1} \frac{\sigma_m \rho_m}{\sqrt{\epsilon/\mu}} \cos \theta\right) \quad (30)$$

で与えられる。実際の計算では、各標本点での σ はその標本点が代表する領域の平均値を用いる。 σ と σ^* では元の式の形は同じだが、電磁場の標本点の位置の違いにより、平均する領域が異なることに注意する必要がある。

以上を考慮し、z軸に垂直な境界面をもつPMLに関して式(23)~(26)を差分化すると、FDTD法の計算式は以下のように与えられる。

$$E_{yz}^{n+1}(i,k) = a(i,k) E_{yz}^n(i,k) + b(i,k) \times [H_x^{n+1}(i,k) - H_x^{n+1}(i,k-1)] \quad (31)$$

$$E_{yx}^{n+1}(i,k) = E_{yx}^n(i,k) - \frac{\Delta t}{\epsilon(i,k) \Delta x} \times [H_z^{n+1}(i,k) - H_z^{n+1}(i-1,k)] \quad (32)$$

$$H_x^{n+1}(i,k) = a^*(i,k) H_x^n(i,k) + b^*(i,k) \times [E_{yx}^n(i,k+1) + E_{yz}^n(i,k+1) - E_{yx}^n(i,k) - E_{yz}^n(i,k)] \quad (33)$$

$$H_z^{n+1}(i,k) = H_z^n(i,k) - \frac{\Delta t}{\mu_z(i,k) \Delta x} \times [E_{yx}^n(i+1,k) + E_{yz}^n(i+1,k) - E_{yx}^n(i,k) - E_{yz}^n(i,k)] \quad (34)$$

ここで、

$$a(i,k) = \exp[-\sigma_{pz}(i,k) \Delta t / \epsilon(i,k)] \quad (35)$$

$$b(i,k) = \frac{1 - \exp[-\sigma_{pz}(i,k) \Delta t / \epsilon(i,k)]}{\sigma_{pz}(i,k) \Delta z} \quad (36)$$

$$a^*(i,k) = \exp[-\sigma_{px}^*(i,k) \Delta t / \mu_x(i,k)] \quad (37)$$

$$b^*(i,k) = \frac{1 - \exp[-\sigma_{px}^*(i,k) \Delta t / \mu_x(i,k)]}{\sigma_{px}^*(i,k) \Delta z} \quad (38)$$

PML内部では損失のため安定化条件の式(7)が使用できないことから、式(35)~(38)のような指数関数的な時間ステップを使用するのが一般的である。

解析領域とPMLの境界面上では $E_y = E_{yx} + E_{yz}$ として2つのFDTD法の式の組(9)-(11)と(31)-(34)を接続させ、結局、一連のプログラムとして計算を実行することができる。

4. その他の取り扱い

これまでに説明してきた内容を組み合わせれば、必要最小限のFDTD法の計算が実行できる。すなわち、ある対象物体に平面波が入射したとき、指定された観測点での電磁場の時間的な変化が得られるわけである。しかし、より複雑なこと、より効率的あるいは高精度な計算を求める場合には、さらにいろいろなテクニックを駆使する必要がある。ここではごく簡単な紹介に留めるので、詳細や具体的な運用に関しては参考書等を参照していただきたい*6。

FDTD法の計算の過程で直接得られるのは各標本点での電磁場の値である。問題によっては、ファーフールドでの電磁場が欲しい場合がある。このとき、遠く離れた対象物と観測点を包括する大きな解析領域を設定することは効率的ではない。このような場合、フーリエ変換を利用して、対象物近傍の電磁場からファーフールドの場を求める手法がある。

解析領域中に等間隔で電磁場の標本点を配置していると、対象物の構造によっては、部分的にその間隔が広すぎ

*6例えば、文献22)、26)が詳細かつ網羅的である。

たり狭すぎたりする場合は生じ、計算の効率や精度が悪くなることがある。この解決のためいくつかの手法が提案されている。まず、対象物の構造が標本点間隔よりも短い距離で変化しているような場合、その部分だけ標本点の配置を矩形以外の形に変形させ、その範囲内では解析的な計算を行うことで精度を上げることができる。これをサブセル法と呼んでいる。一方、対象物の存在する領域だけ標本点間隔を細かくとることによって、計算精度にあまり影響を与えずに計算効率を上げることも可能である。これをサブグリッド法と呼んでいる。

通常の標本点の配置は直交座標にしたがっているが、物体が軸対称であるなど、問題によっては円柱座標を使用したほうがよい場合がある。これには BOR (body of revolution) FDTD 法と呼ばれている手法が利用できる。

分散性媒質や非線形性媒質を取り扱う場合には、RC (recursive convolution) 法、あるいは ADE (auxiliary differential equation) 法などを使用する。FDTD 法はこれらの問題に関しても、既存の手法と比較して、より厳密で一般的な取り扱いが可能とされている²⁶⁾。

なお、FDTD 法自身についての最近の研究成果が文献 34) で紹介されている。

本稿では、FDTD 法の基本概念と使用方法を数式を追いながら説明してきた。簡単な 1 次元あるいは 2 次元の問題については、ここで述べられた知識だけでほぼ対応できると考える。興味のある方は、あまり深く思い悩まず、まず 1 次元の計算を試してみられることをお勧めする。いったんプログラムが走り出せば、後は、文献を見て、自分の考えている問題に関する技法を探し出し適用することはさほど困難ではない。

なお、最後に、インターネット上でアクセスできる下記のサイトを紹介しておく。特に、3 つめのページでは、FDTD 法関係の膨大な文献のデータベースを BibTeX 形式で構築し一般に公開しており非常に有用である。

<http://www.emclab.umn.edu/aces/>

<http://www.brunel.ac.uk/research/fdtd/>

<http://www.eecs.wsu.edu/~schneidj/fdtd-bib.html>

文 献

- 1) J. W. Goodman: *Introduction to Fourier Optics* (McGraw-Hill, New York, 1996) pp. 36-38.
- 2) 鶴田匡夫：続 光の鉛筆(新技術コミュニケーションズ, 1988) pp. 210-213.
- 3) 鶴田匡夫：応用光学 I (培風館, 1990) pp. 199-204.
- 4) C. J. Bouwkamp: "Diffraction theory," Rep. Prog. Phys., **17** (1954) 35-100.
- 5) 小柴正則：“光波の電磁界解析法”，光学，**27** (1998) 622-625.
- 6) 松田豊稔，奥野洋一：“周期回折格子の電磁気解析”，光学，**27** (1998) 626-631.
- 7) 藪 哲郎，沢新之輔：“光導波路の解析法”，光学，**27** (1998) 632-639.
- 8) 小嶋敏孝，何 一偉：“光ディスクの案内溝および記録マークによる光ビーム散乱の数値解析”，光学，**27** (1998) 640-646.
- 9) K. S. Yee: "Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media," IEEE Trans. Antennas Propag., **AP-14** (1966) 302-307.
- 10) K. L. Shlager and J. B. Schneider: "A selective survey of the finite-difference time-domain literature," IEEE Antennas Propag. Mag., **37** (1995) 39-56.
- 11) D. B. Davidson and R. W. Ziolkowski: "Body-of-revolution finite-difference time-domain modeling of space-time focusing by a three-dimensional lens," J. Opt. Soc. Am. A, **11** (1994) 1471-1490.
- 12) S. A. Basinger and D. J. Brady: "Finite-difference time-domain modeling of dispersive nonlinear Fabry-Perot cavities," J. Opt. Soc. Am. B, **11** (1994) 1504-1511.
- 13) H. A. Jamid and S. J. Al-Bader: "Finite-difference time-domain approach to guided waves," Electron. Lett., **29** (1993) 83-84.
- 14) P. M. Goorjian, A. Taflove, R. M. Joseph and S. C. Hagness: "Computational modeling of femtosecond optical solitons from Maxwell's equations," IEEE J. Quantum Electron., **28** (1992) 2416-2422.
- 15) R. M. Joseph, S. C. Hagness and A. Taflove: "Direct time integration of Maxwell's equations in linear dispersive media with absorption for scattering and propagation of femtosecond electromagnetic pulses," Opt. Lett., **16** (1991) 1412-1414.
- 16) J. B. Judkins and R. W. Ziolkowski: "Finite-difference time-domain modeling of nonperfectly conducting metallic thin-film grating," J. Opt. Soc. Am. A, **12** (1995) 1974-1982.
- 17) H. Ichikawa: "Electromagnetic analysis of diffraction gratings by the finite-difference time-domain method," J. Opt. Soc. Am. A, **15** (1998) 152-157.
- 18) 藤本正行，奥野洋一，松田豊稔：“超微細回折格子の回折特性算出”，Optics Japan '97 講演予稿集 (1997) pp. 101-102.
- 19) 市川裕之：“超微細回折格子によるフェムト秒パルスの回折について”，第 45 回応用物理関係連合講演会講演予稿集 (1998) p. 967.
- 20) H. Furukawa and S. Kawata: "Local field enhancement with an apertureless near-field-microscope probe," Opt. Commun., **148** (1998) 221-224.
- 21) 橋本 修，阿部琢美：FDTD 時間領域差分法入門 (森北出版, 1996)。
- 22) 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)。
- 23) 吉田則信：“有限領域差分法”，電磁波問題解析の実際，山下榮吉編 (コロナ社, 1993) pp. 41-91.
- 24) 吉田則信：“電磁界解析の基礎とアンテナ工学への応用 (II) 時間領域における電磁界解析法入門”，電子情報通信学会誌，**80** (1997) 75-82.
- 25) 宇野 亨：“電磁界解析の基礎とアンテナ工学への応用 (III) FDTD 法のアンテナ解析への応用”，電子情報通信学会誌，**80** (1997) 184-191.

- 26) A. Taflove: *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method* (Artech House, Norwood, 1995).
- 27) A. Taflove: "Review of the formulation and applications of the finite-difference time-domain method for numerical modeling of electromagnetic wave interactions with arbitrary structures," *Wave Motion*, **10** (1988) 547-582.
- 28) A. Taflove and K. R. Umashankar: "Review of FD-TD numerical modeling of electromagnetic wave scattering and radar cross section," *Proc. IEEE*, **77** (1989) 682-699.
- 29) A. P. Zhao, A. Räisänen and S. R. Cvetkovic: "A fast and efficient FDTD algorithm for the analysis of planar microstrip discontinuities by using a simple source excitation scheme," *IEEE Microwave Guided Wave Lett.*, **5** (1995) 341-343.
- 30) G. Mur: "Absorbing boundary conditions for the finite-difference approximation of the time-domain electromagnetic-field equations," *IEEE Trans. Electromagn. Comp.*, **EMC-23** (1981) 377-382.
- 31) J. -P. Berenger: "A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves," *J. Comput. Phys.*, **114** (1994) 185-200.
- 32) 安達三郎: 電磁波工学 (コロナ社, 東京, 1983) p. 25.
- 33) R. Holland and J. W. Williams: "Total-field versus scattered-field finite-difference codes: A comparative assessment," *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, **NS-30** (1983) 4583-4588.
- 34) Special Issue on Advanced Numerical Techniques in Electromagnetics, *IEEE Trans. Antennas Propag.*, **45** (1997) 313-572. なお, この特集の中には FDTD 法以外のものも含まれている.

(1998年6月18日受理)