608 電磁波散乱問題における Calderón の式に基づく前処理について

On the preconditioning based on Calderón's formulae for electromagnetic scattering problems

非 新納 和樹 (京都大学) 正 西村 直志 (京都大学)

Kazuki NIINO, Kyoto University, Yoshida-honmachi, Sakyo-ku, Kyoto, Kyoto

Naoshi NISHIMURA, Kyoto University, Yoshida-honmachi, Sakyo-ku, Kyoto, Kyoto

Key word: Boundary Integral Equation Method, Calderón's Formulae, Preconditioning, Krylov subspace method

1 序論

周期構造を含む波動散乱問題の解法として、高速多重極境界要素法は強力な解法である¹⁾。この解法では境界積分方程式を離散化して得られる線型方程式を反復解法で解く事が必須であるので、反復回数のコントロールが手法の効率を大きく左右する。反復回数をコントロールするための前処理に関する研究は様々なものが提案されているが、Steinbach and Wendland によって提案された Calderón の式を用いた前処理手法は有力なものの一つである²⁾。

従来、Calderón の式を用いた前処理法は積分作用素の離散化方程式に相当する前処理行列を用いて行われてきた。一方、新納・西村は Helmholtz 方程式の PMCHWT 定式化において、選点法を用いた離散化では、solver として GMRES を用いた場合、式の並べ方に注意すれば、前処理無しで Calderón 前処理法と同等の効果が得られることを示した³⁾。また、Galerkin 法においても Gram 行列を前処理行列とすることによって同様な前処理が可能であることを示した⁴⁾。Maxwell 方程式の PMCHWT 定式化においては、既に従来型の Calderón 前処理が試されており、RWG 基底⁵⁾とその双対基底である BC 基底⁶⁾を組み合わせた手法が提案されている⁷⁾。また我々はより自然に双対基底が導入できる roof top 関数を用いた Calderón の式を用いた前処理を開発し、立方体形状を持つ誘電体における数値例において、この前処理が有効であることを検証した⁸⁾。本稿では、roof top 関数を用いた前処理を、境界形状が曲面を含む場合にまで拡張し、その有効性を検証する。

2 定式化

なめらかな境界 Γ を有する $\mathbb{R}^3$ の有界な領域 Ω^- を考え、 $\Omega^+ = \mathbb{R}^3 \setminus \Omega^-$ とする。考える問題は

$$\nabla \times \mathbf{E} = i\omega\mu^\pm \mathbf{H}, \quad \nabla \times \mathbf{H} = -i\omega\varepsilon^\pm \mathbf{E} \quad \text{in } \Omega^\pm$$

$$\mathbf{E}^+ \times \mathbf{n} = \mathbf{E}^- \times \mathbf{n} (= \mathbf{m}), \quad \mathbf{n} \times \mathbf{H}^+ = \mathbf{n} \times \mathbf{H}^- (= \mathbf{j}) \quad \text{on } \Gamma$$

の解を求めるものである。ここに $\mathbf{E}$ と $\mathbf{H}$ は、電場と磁場、 ω は周波数 (諸量の時間依存性は $e^{-i\omega t}$ とする)、 $\varepsilon^\pm$ と $\mu^\pm$ は $\Omega^\pm$ の誘電率と透磁率である。 $\mathbf{E}^\pm$ などは $\mathbf{E}$ などの $\Omega^\pm$ から Γ への極限値を表す。また、外部領域である Ω^+ では散乱波 $\mathbf{E}^{\text{sca}}, \mathbf{H}^{\text{sca}}$ に対して放射条件を要求する。ここに $(\mathbf{E}^{\text{sca}}, \mathbf{H}^{\text{sca}}) = (\mathbf{E} - \mathbf{E}^{\text{inc}}, \mathbf{H} - \mathbf{H}^{\text{inc}})$ であり、 $\mathbf{E}^{\text{inc}}$ と $\mathbf{H}^{\text{inc}}$ は入射波である。

境界 Γ の外向き法線ベクトルを $\mathbf{n}$ とし、

$$\Psi_{kl} = e_{kjl} \partial_j \frac{e^{ik|x|}}{4\pi|x|}, \quad \Phi_{kl} = \left(\delta_{kl} + \frac{1}{k^2} \partial_k \partial_l \right) \frac{e^{ik|x|}}{4\pi|x|}$$

とする。さらに

$$P(x, y) = \mathbf{n}(x) \times \Psi(x - y), \quad Q(x, y) = \mathbf{n}(x) \times \Phi(x - y),$$

とおき、これらの核関数と、その Γ 上の接ベクトル場 $\mathbf{t}$ への作用

$$P\mathbf{t}(x) = \int_{\Gamma} P(x, y) \cdot \mathbf{t}(y) dS_y \quad x \in \Gamma$$

などを同じ記号で書くことにすると、PMCHWT 定式化における境界積分方程式 (EFIE および MFIE) は次式となる。

$$\begin{aligned} (P^+ + P^-)\mathbf{m} - i\omega(\mu^+ Q^+ + \mu^- Q^-)\mathbf{j} &= -\mathbf{E}^{\text{inc}} \times \mathbf{n} \\ i\omega(\varepsilon^+ Q^+ + \varepsilon^- Q^-)\mathbf{m} + (P^+ + P^-)\mathbf{j} &= -\mathbf{n} \times \mathbf{H}^{\text{inc}} \end{aligned}$$

また、Maxwell 方程式における Calderón の式は

$$\frac{1}{4} = k^2 Q^2 + P^2, \quad PQ + QP = 0$$

となる⁹⁾。これは

$$\begin{pmatrix} P & -i\omega\mu Q \\ i\omega\varepsilon Q & P \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P & -i\omega\mu Q \\ i\omega\varepsilon Q & P \end{pmatrix} = \frac{I}{4}$$

とも書ける。

新納・西村⁴⁾は、Helmholtz 方程式の Galerkin 法による解法において、Gram 行列を用いて Calderón の前処理の効果を求めることが出来ることを示した。これを Maxwell 方程式に拡張するには次のようにすればよい。まず EFIE、MFIE は $H_{\text{div}}(\Gamma) \rightarrow H_{\text{div}}(\Gamma)$ であることに注意すると、

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{n} \times \mathbf{s}, (P^+ + P^-)\mathbf{m} - i\omega(\mu^+ Q^+ + \mu^- Q^-)\mathbf{j} + \mathbf{E}^{\text{inc}} \times \mathbf{n} \rangle &= 0 \\ \langle \mathbf{n} \times \mathbf{t}, i\omega(\varepsilon^+ Q^+ + \varepsilon^- Q^-)\mathbf{m} + (P^+ + P^-)\mathbf{j} + \mathbf{n} \times \mathbf{H}^{\text{inc}} \rangle &= 0 \end{aligned}$$

とするのが自然である。ここに、 $\mathbf{s}, \mathbf{t}$ は $H_{\text{div}}(\Gamma)$ に属する test 関数であり、 $\langle f, g \rangle = \int_{\Gamma} f \cdot g dS$ である。これより

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{s}, (\Psi^+ + \Psi^-)\mathbf{m} - i\omega(\mu^+ \Phi^+ + \mu^- \Phi^-)\mathbf{j} - \mathbf{E}^{\text{inc}} \rangle &= 0 \quad (1) \\ \langle \mathbf{t}, i\omega(\varepsilon^+ \Phi^+ + \varepsilon^- \Phi^-)\mathbf{m} + (\Psi^+ + \Psi^-)\mathbf{j} + \mathbf{H}^{\text{inc}} \rangle &= 0 \quad (2) \end{aligned}$$

を得る。さらに双対な基底 $\mathbf{t}$ と $\mathbf{s}$ を用いて $\mathbf{m}$ を基底関数 $\mathbf{t}$ で、 $\mathbf{j}$ を基底関数 $\mathbf{s}$ で離散化する。例えば $\mathbf{t}$ に RWG 基底を選べば $\mathbf{s}$ は BC 基底とすればよいが、この組み合わせに限るわけではない。式 (1) を離散化して $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ とすれば、前処理行列として Gram 行列

$$T = \begin{pmatrix} \langle (\mathbf{n} \times \mathbf{s})_i, \mathbf{t}_j \rangle & 0 \\ 0 & \langle (\mathbf{n} \times \mathbf{t})_i, \mathbf{s}_j \rangle \end{pmatrix}$$

を用いることにより、新納・西村⁴⁾の前処理法の Maxwell 版が得られる。このようにして定義した Gram 行列 T (正則である) を右前処理として用いる方法を前処理法 1 と呼ぶ。前処理法 1 の根拠は

$$\begin{pmatrix} P^+ + P^- & -i\omega(\mu^+ Q^+ + \mu^- Q^-) \\ i\omega(\varepsilon^+ Q^+ + \varepsilon^- Q^-) & P^+ + P^- \end{pmatrix} = S + K$$

Fig. 1 The conditions for a roof top function on curves Fig. 2 The dual basis

となることである。ここに S は Γ 上の特異積分作用素であり、固有値の集積点は

$$\frac{1}{4} \left(2 + \frac{\mu^+}{\mu^-} + \frac{\mu^-}{\mu^+} \right), \quad \frac{1}{4} \left(2 + \frac{\varepsilon^+}{\varepsilon^-} + \frac{\varepsilon^-}{\varepsilon^+} \right)$$

の2個のみである。この方法と類似の前処理法として $TA^{-1}T$ によって右前処理すると考えられる。これを前処理法2と呼ぶ。前処理法2の根拠は前処理法1と同じである。

3 数値計算例

半径 ℓ の球状の誘電体に真下から平面電磁波が入射した場合の解を求める。ただし、 $k\ell=1$, $\varepsilon^+=\mu^+=\mu^-=1$ とし、 $\varepsilon^-=1, 4$ の2ケースを考える。基底 t にroof top関数を用いると双対基底 s もroof top関数となり、容易に双対基底を構成できるが、球面上の4点は一般に同一平面上にあるとは限らないので、以下の様に曲面上に拡張されたroof top関数を構成する。

Fig. 1の様に、4点ABCDで定義された要素において、これを二つの三角形に分割(図中破線)し、この二つの三角形上での線形基底を考える。この線形基底は、辺AB上(図中白丸)で法線、接線成分が共に0、辺AD,BC上(図中白四角)で法線成分が0、辺CD上(図中黒丸)で法線成分が1、さらに辺BD上(図中黒三角)で、法線、接線成分が連続という条件を課すことで一意に定まる。この基底を貼り合わせることで、Fig. 2の様な基底 t と双対基底 s を構成することができる。構成法からこの基底の線形結合は、各辺上で法線成分が連続となっていることは明らかである。

この基底を用いて前節で示した前処理法1,2を用いた解析を行った。また比較のために、 m, j 両方の基底に t を用い、対角成分が大きくなるように次式をこの順に並べて離散化した方程式も取り扱った。

$$\langle t, i\omega(\varepsilon^+\Phi^+ + \varepsilon^-\Phi^-)m + (\Psi^+ + \Psi^-)j + H^{inc} \rangle = 0 \quad (3)$$

$$\langle t, (\Psi^+ + \Psi^-)m - i\omega(\mu^+\Phi^+ + \mu^-\Phi^-)j - E^{inc} \rangle = 0 \quad (4)$$

線形方程式の解法はFGMRES, 外側反復の許容誤差は 10^{-5} 、内側反復における T の逆行列の計算もGMRESを用い、許容誤差は 10^{-10} とする。

以下に外側反復の反復回数を示す。前処理無しやpoint Jacobiに比べ、前処理1では大幅に反復回数を削減できていることがわかる。また、前処理法2では内側反復の際にも行列ベクトル積を要するので、行列ベクトル積の回数は表の数字の倍である。したがって行列ベクトル積の回数で比較すると、前処理法2は前処理法1に比べほぼ同等かやや効率の落ちる前処理であると言える。

Table 1 The iteration number of the FGMRES ($\varepsilon^- = 1$)

前処理法	自由度				
	24	96	384	1536	6144
前処理無し(式(1))	18	94	362	> 1000	> 1000
前処理無し(式(3))	6	26	234	> 1000	> 1000
point Jacobi(式(3))	3	12	36	66	107
前処理法 1	5	7	19	11	15
前処理法 2	4	4	12	8	9

Table 2 The iteration number of the FGMRES ($\varepsilon^- = 4$)

前処理法	自由度				
	24	96	384	1536	6144
前処理無し(式(1))	18	94	362	> 1000	> 1000
前処理無し(式(3))	6	28	222	> 1000	> 1000
point Jacobi(式(3))	6	22	45	84	135
前処理法 1	6	14	24	20	22
前処理法 2	6	9	18	13	15

4 結論

roof top関数を基底として用いたCalderónの式に基づく前処理は、領域境界形状が曲面を持つ場合においても有効であることがわかった。

参考文献

- 1) Y. Otani and N. Nishimura. A periodic FMM for Maxwell's equations in 3D and its applications to problems related to photonic crystals. *Journal of Computational Physics*, Vol. 227, No. 9, pp. 4630-4652, 2008.
- 2) O. Steinbach and W.L. Wendland. The construction of some efficient preconditioners in the boundary element method. *Advances in Computational Mathematics*, Vol. 9, No. 1, pp. 191-216, 1998.
- 3) 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, Vol. 9, pp. 1-6, 2009.
- 4) 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について. 計算数理工学論文集, Vol. 10, pp. 39-44, 2010.
- 5) S. Rao, D. Wilton, and A. Glisson. Electromagnetic scattering by surfaces of arbitrary shape. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, Vol. 30, No. 3, pp. 409-418, 1982.
- 6) A. Buffa and S.H. Christiansen. A dual finite element complex on the barycentric refinement. *Mathematics of Computation*, Vol. 76, pp. 1743-1769, 2007.
- 7) S.H. Christiansen and J.C. Nédélec. A preconditioner for the electric field integral equation based on Calderon formulas. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Vol. 40, No. 3, pp. 1100-1135, 2003.
- 8) 西村直志, 新納和樹. Maxwell方程式のPMCHWT定式化におけるCalderónの式を用いた前処理について. 計算工学講演会論文集, Vol. 16, , 2011.
- 9) J.C. Nédélec. *Acoustic and Electromagnetic Equations: Integral Representations for Harmonic Problems*. Springer Verlag, 2001.