

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 16 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2011～2013

課題番号：23560068

研究課題名(和文) Maxwell方程式の周期多重極法における前処理法と基底関数に関する研究

研究課題名(英文) Studies on preconditioning and basis functions in periodic fast multipole methods for Maxwell's equations

研究代表者

西村 直志 (Nishimura, Naoshi)

京都大学・情報学研究科・教授

研究者番号：90127118

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円、(間接経費) 990,000円

研究成果の概要(和文)：本研究は、周期的な誘電体による電磁波散乱問題の積分方程式を用いた数値的高速解法である周期高速多重極法において、線形方程式の前処理方法や、基底関数、積分方程式の定式化の見直し等によって更なる高速化を追求した。電磁波動散乱問題に現れるある積分方程式の二乗は良条件であり、使用する基底関数に工夫をすればこの性質は離散化方程式にも遺伝する。本研究では基底関数やテスト関数に適切な双対基底を用いることで、線形方程式の良条件化を実現した。また、他の良条件の積分方程式の定式化を模索し、フォトニック結晶の解析に現れるほとんど周期的な構造による波動散乱問題の解法や、領域積分方程式の効率の良い前処理法を開発した。

研究成果の概要(英文)：This study aims at further accelerating the periodic FMM, which is a fast method for solving electromagnetic scattering problems for periodic structures, by improving preconditioners for linear equations, basis functions and integral equation formulations. The square of certain integral operators in electromagnetic scattering problems are well-conditioned, and so are their numerical counterparts as one uses the right basis functions. We were able to obtain an efficient solver of periodic scattering problems using this idea. We also investigated other well-conditioned integral equation formulations and developed a solution method for almost periodic structures found in photonic crystal applications, as well as an efficient preconditioner for volume integral equations.

研究分野：工学

科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎 工学基礎

キーワード：Maxwell方程式 周期境界値問題 高速多重極法 前処理法 基底関数

## 1. 研究開始当初の背景

境界要素法(境界要素法)は工学に現れる境界値問題の数値解法の一つであり、特に波動散乱問題の解法として優れている。得られる係数行列が密であるため計算時間が膨大となり、大規模問題に適さないとされたが、高速多重極法というブレークスルーを得て、計算時間は大幅に短縮した。ただし、線形方程式の反復解法の利用が必須であり、有効な前処理法の開発が重要になった。しかし、現在まで決定版と言えるものは得られていない。有力な前処理法の一つとしてCalderonの式によるものが知られている。これは、従来型の境界要素法にいわゆるCalderonの式を上手く使うと、解くべき積分方程式の作用素の「コンパクト作用素を除いた逆」が構成できる事を利用したもので、反復回数を大幅に減少することが可能である。その研究はChristiansenらの数学的な考察に端を発し、その後米国の電気工学のグループにおいても研究が行われている。しかし、我々は、これらの研究ではこの方法本来の性能が十分に発揮されていないと考える。

一方、我々は電磁波の数値計算に多重極境界要素法を使用し、特に誘電体の周期散乱問題で成果を上げてきた。その過程で、Helmholtz方程式の通常境界積分方程式とこれを微分して得られる積分方程式を連立して解く解法(いわゆるPMCHWT定式化)において、Calderonの式を用いると、散乱体の内外での物質定数が等しいとき(均質)には、得られる前処理作用素が元の積分作用素の厳密な逆になることに気づいた。さらに、このことを利用した予備的研究において、連立積分方程式の並べ方を工夫すると、均質の場合には、積分方程式に現れる作用素が自分自身の逆に一致することにも気づいた。これはHelmholtz方程式を含む多くの問題において、離散化に選点法を用いる限り、前処理をしなくても十分収束性のよい積分方程式があり得ることを

示唆している。しかし、Maxwell方程式においてはGalerkin法の使用がほぼ必須である上に基底関数の選択が困難であるため、良好な収束性を実現するには至っていない。実際、正しい基底関数の取り方を行わないと、Calderonの式によって加速出来ない線形方程式を得るか(我々の周期多重極法はこれに該当していた)、Calderonの式に対応できる積分方程式を離散化しようとしてもそれは非正則となり、数値解を得ることは不可能かのいずれかである。研究開始当初には、電気工学の研究者たちもPMCHWT定式化においてCalderonの式に基づいた前処理法の研究を始めており、Maxwell方程式の散乱問題の積分方程式による解法において定番となっているRWG(Raviart-Thomasとも言う)基底と、これに双対なBuffa-Christiansenの(BC)基底の組み合わせが検討されていたが、我々の知る限り、Maxwell方程式の2つの積分方程式の試行関数と試験関数にこれらを正しく使用した例はなかった。丁度そのころ、我々は双対性に関する考察を行うことにより、Maxwell方程式の積分方程式における正しい基底関数の選択に関する知見を得、Calderonの式を有効に利用するためには試験関数の取り方に一工夫することが必要であることを認識した。以上が本研究開始当時の研究背景である。

## 2. 研究の目的

本研究の最初の目的は、PMCHWT定式化において我々が正しいと考える基底関数の使用法を我々の周期多重極法において実装し、Calderon前処理の効果を実証することにある。特に周期構造に特徴的な、解の非一意性や、漏洩モードに伴う種々のアノマリ周辺において、Calderon前処理がどのような効果を有するかを検討する。しかし、実装において、RWGとBCを正しく組み合わせたとしても、いくつかの問題点が予想される。まず、領域形状に角(稜線)がある場合、これらは解の不連

続線になり，RWG とBC では不連続線(すなわち要素境界)の位置が異なっているので，表面電流，磁流ともに正しい不連続性を有する離散化を行うことが出来ない．これは解の精度を大きく低下させる要因であると予想される．また，計算力学の有限要素法では種々の基底関数が用いられていることを想起すると，そもそもMaxwell 方程式の解法において，許容される基底のうち最低の精度を有するRWG基底が標準になっている事自体，奇異と言わざるを得ない．この様にしてMaxwell 方程式の境界要素法において使用される基底関数は必ずしも合理的に選ばれておらず，これを根本的に見直すことが必要であるとの結論に至った．以上が本研究のもう一つの目的である．

このようにして開発した種々の計算技法をMaxwell 方程式の周期多重極法がもっとも有用であると考えられるメタマテリアルやフォトニック結晶の解析に適したプログラムに実装することが本研究の当初の最終目的である．しかし本研究では，研究の進展に伴って必ずしも当初の研究目的に拘泥することなく，ごく簡単な前処理によって高速計算が可能になる良条件の積分方程式の定式化や，得られた知見が適用可能な種々の応用問題を積極的に研究対象に加えて，広く電磁波問題の積分方程式の数値計算における基底と前処理の問題に取り組んだ．

### 3．研究の方法

平成23年度は双線形四角形要素を取り上げ，Maxwell 方程式の非周期境界値問題における通常の(多重極でない)積分方程式法においてこれを実装した．さらにCalderonの式による前処理法を定式化し，数値実験によりその効果を確かめた．その際，考える積分作用素の2乗が良条件方程式を与えることを考慮すると，一旦Gram行列の逆を乗ずることにより，離散化された線型方程式を元の積分作用素の

スペクトルの性質をよりよく反映したものにした上で自分自身を前処理行列に用いることが有効であると考えられる．しかし，GMRESを用いてKrylov部分空間法によって求解を行なう場合，自分自身を前処理に用いるより単にGram行列を前処理行列に使う方が速く求解に至ることがこれまでの研究から予想される．本研究では以上の事柄を数値実験によって確認する．平成24年度はまず2次元TEモードの場合について，Müllerの定式化に基づく1周期波動散乱問題の高速多重極法を定式化し，その数値的特徴を数値実験によって調べる．更に，その結果を3次元Maxwell方程式の場合に拡張する．平成25年度はCalderonの式とPMCHWT定式化を用いた高速計算手法について，最も実用性の高いものを抽出する．さらに前年度までに開発した前処理法を活用し，周期性に乱れのある構造による波動散乱問題の解法を検討する．最後に，本研究で開発された前処理技術を領域積分方程式の場合に適用する．

### 4．研究成果

平成23年度は，PMCHWT定式化による境界積分方程式に区分線型4角形要素を用い，誘電体の表面電流，磁流に別々の双対基底を用い，電場，磁場積分方程式をそれぞれ別の双対基底でテストすることで離散化を行なった．このように離散化を行なうと，得られた方程式をGram行列で前処理するだけでCalderonの式による前処理効果が得られる．本研究ではこのことを数値実験を通して実証し，その成果はNiino and Nishimura (IJNM, 2012)に示されている．この研究は従来から知られているRWG基底とBC基底という双対ペアに比べて構成が非常に簡単な四角形要素を使用していることが特徴である．また，双一次関数を用いるので，RWGに比べて未知関数を記述する自由度も幾分増える．さらに前処理のために離散化された積分方程式を利用する必

要がない点においても画期的である。ただし、予想されたように領域に角がある場合、精度が上がらないという問題点があることが確認された。しかも問題は角点だけに留まらず、滑らかな散乱体の場合においても、要素形状に良好でないものがある場合、精度の悪化が検出された。

当初の計画では平成 24 年には前年度の研究結果を高速化する予定であったが、限られた研究時間中に高速解法の開発まで行うために、PMCHWT 型の定式化と並んで良条件の積分方程式を与えることで知られている Müller の方法を取り上げ、その数値的特性に関する研究を先に行うことがより適切と判断した。まず、簡単のために 2 次元問題を取り上げ、主に TE モードの場合を考察した。周期問題において GMRES の収束に要する反復回数を数値実験によって求めた。この結果、Müller の定式化を用いると Calderon の式の前処理効果を考慮した PMCHWT 定式化よりも幾分速く解の収束が得られることが多いことが示された。しかし、ある種の物質定数を用いた場合、Müller の方法では係数行列が甚だしく悪条件化することがあることも判明した。元来、Müller の方法は見かけの固有値現象を生ずることがなく、Fredholm の 2 型の積分方程式を与えるので、良条件の線型方程式を導くと考えられてきた。しかし、理論的に解が一意であっても数値的に良条件方程式が得られるとは限らず、本研究の結果は Müller の積分方程式を用いたとしても必ずしも高精度の数値結果が得られるとは限らないことを示している。この現象を説明するために、解析的な取り扱いが可能である円形境界に対する非周期問題を考え、得られる係数行列の条件式を調べたところ、周期問題の積分方程式の数値解が悪化する場合と、解析的に扱った非周期問題の係数行列の悪条件化が起る場合はほぼ一致することが分かった。さらに、同じような問題は PMCHWT 定式

化でも発生し得るが、PMCHWT では正負の固有値がペアで現れることを考慮すると、数値解の悪化は PMCHWT より Müller においてより顕著であることが予想され、実際、数値結果はそのような傾向を示していることが確かめられた。さらに、周期問題に特有のアノマリ周辺における線型方程式の悪条件化については、Müller, PMCHWT とともに大きな問題には至らないことが確かめられた。これらの結果の一部は三澤・西村(計算数理工学論文集, 2012) に述べられている。

続いて、Maxwell 方程式の 3 次元周期散乱問題において Müller の定式化の数値的特性を検討した。積分方程式の離散化には Nystrom 法を用いた。数値実験の結果、TE モードの場合と同様に Müller の方法は PMCHWT 定式化を上回る計算効率を示した。しかし物質定数を特殊な値に設定すると、Müller の定式化は著しく悪条件化することが判明した。この現象の原因は TE モードの場合と同様に球の非周期問題の場合には解析的な取り扱いによってほぼ説明がつくが、これだけでは説明ができない場合も見出されており、現状では完璧な理解には至っていない。また、3 次元 Maxwell 方程式の場合も、Müller の方法によってアノマリ周辺の線型方程式の悪条件化はある程度回避できることが示された。ただし TE モードの場合に比較して線型方程式の求解に要する反復回数はアノマリの影響をより強く受ける場合があることも見出された。これらの結果の論文発表は現在準備中である。典型的な例を図 1, 2 に示す。図 1 は 1 層の 2 周期球形散乱体(周期 1, 球の誘電率=2.56, 外部の誘電率=1, 透磁率=1, 鉛直下方より平面波入射)によるエネルギー透過率であり、図 2 はそのときの Müller の方法による反復回数と、同じく PMCHWT 定式化による結果を示している。PMCHWT 定式化では Calderon の式による前処理は用いていない。このことから、Müller の方法による反復

回数の減少効果が結論される。一方、図1で透過係数がほとんど0になっているアノマリにおいては、Müllerの方法を用いた場合でも反復回数の若干の増大が見られる。

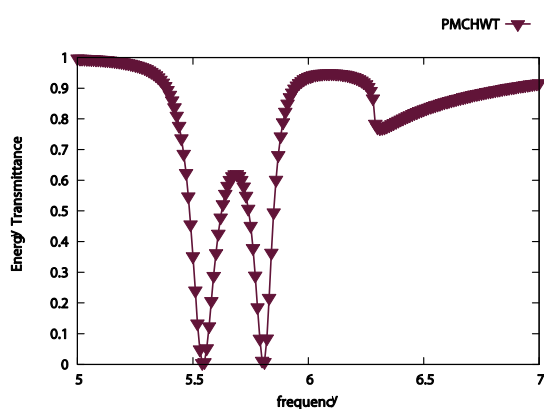


図1：1層の2周期球形散乱体による透過係数 vs 周波数

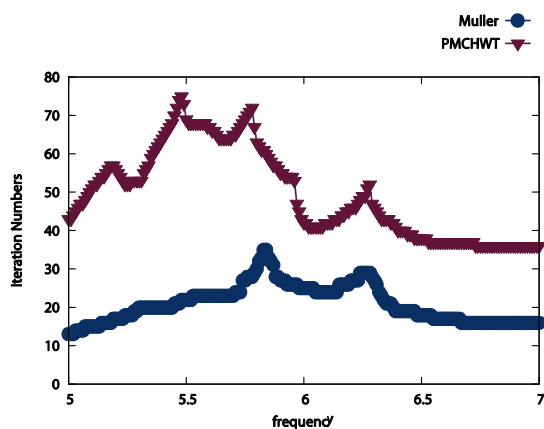


図2：1層の2周期球形散乱問題の反復回数 vs 周波数

以上の研究を通して Müllerの方法は周期 transmission 問題における定式化法として非常に有効な場合もあるが、一方信頼性にやや欠ける傾向があり、結局 PMCHWT 定式化に Calderon の式を考慮した前処理法を施す方法を超えるものではないことが結論された。

平成 25 年度は 3 次元 Maxwell 方程式の PMCHWT 定式化と Calderon の式を用いた前処理法の研究に戻り、まず双線型四角形要素を用いた数値計算法の解の精度の向上を検討した。Buffa らの研究成果からの類推で、双線型基底を用いた数値計算の精度が向上しない理由の一つは要素形状にあると考えられ、要素の角ができるだけ 90 度に近くなるように要素分割を行なった。しかし、幾分の

精度向上は見られたものの、顕著な解析精度の向上には至らなかった。このため、次善の策として表面電流と表面磁流を RWG 基底と BC 基底を用いて離散化し、電場積分方程式と磁場積分方程式を異なる基底 (すなわち RWG か BC か) を用いてテストすることによって線型方程式系を得た。こうして得られるシステムの性質と解の精度を数値実験によって検証した。その結果、BC 基底で展開した未知量は RWG で展開したものに比べると幾分精度が劣るものの、線型方程式の目立った悪条件化もなく、高速に、実用上許容される程度の誤差の範囲で数値解を得ることができた。これらの結果の論文発表は現在準備中である。なお、メタ材料を含む複雑な周期構造への適用は現在も進行中である。

一方、本研究で得られた周期境界値問題の前処理法の研究の応用として、ほとんど周期的な構造による波動散乱問題の解法の研究を行なった。対象とする構造は完全に 1 周期的な 2 次元構造から有限個の散乱体を取り除いた構造であり、これに TE モードの電磁波が入射した場合を考えた。考える問題に Floquet 変換を施すと境界上の解の Floquet 変換と、欠損している散乱体の表面の解を未知数とする積分方程式が得られ、更にこれらの解の Floquet 変換を介した拘束条件から解くべき関数方程式が得られる。これらはすべて周期境界値問題を解くために必要な道具があれば構成することができ、これまで開発してきた高速化手法が使える。しかも得られる関数方程式の離散版は良条件であって、さらなる良条件化をもたらす前処理行列を得ることも容易である。このようにしてフォトリック結晶などに現れる欠陥を含んだ周期構造による波動散乱問題の解法を得ることができた。これらの結果は森田・西村 (計算数理工学論文集, 2013) 及び、準備中の論文に述べられている。

本研究を通して得られた前処理法の技術

は境界積分方程式だけでなく領域積分方程式の解法に用いることもできる。一般に領域積分方程式は良条件問題を導くと考えられているが、現実の問題を解こうとすると多数の反復回数を要することが少なくなく、良好な前処理法の開発は重要である。そこで、3次元 Maxwell 方程式の2周期散乱問題における領域積分方程式を単位作用素 + コンパクト作用素の形に変形する作用素を求め、これの離散版を前処理行列として用いることにより、求解に要する反復回数を大幅に減らすことができることを示した。この結果は Misawa and Nishimura (IEEE TAP, 2014) に報告されている。

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者, 研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 4 件)

R. Misawa, N. Nishimura and MS. Tong, Preconditioning of periodic fast multipole method for solving volume integral equations, IEEE Trans. Antennas and Propagation, 2014 (accepted)

森田樹一郎, 西村直志, 殆ど周期的な構造における Helmholtz 方程式の境界値問題の解法の改良について, 計算数理工学論文集, vol.13, pp.43-48, 2013, <http://gpsun1.gee.kyoto-u.ac.jp/JASCOM E/denshi-journal/13/JA138.pdf>

三澤 亮太, 西村直志, 2次元 Helmholtz 方程式の1周期 transmission 問題における境界積分方程式の定式化について, 計算数理工学論文集, vol.12, pp.109-114, 2012, <http://gpsun1.gee.kyoto-u.ac.jp/JASCOM E/denshi-journal/12/JA1219.pdf>

K. Niino and N. Nishimura, Calderon preconditioning approaches for PMCHWT

formulations for Maxwell's equations, International Journal of Numerical Modelling: Electronic Networks, Devices and Fields, vol.25, pp.558-572, 2012, DOI: 10.1002/jnm.1834

[学会発表](計 14 件)

N. Nishimura, Solution of scattering problems for Helmholtz' equation in domains with disturbed periodicity, Integral equation methods: fast algorithms and applications, 2013年12月9日, Banff international research station, Canada

N. Nishimura, Recent developments of periodic FMM in Helmholtz' and Maxwell's equations, ICOME 2012, 2012年12月14日, Kyoto, Japan

N. Nishimura, Calderon preconditioners for transmission problems in elasticity and Maxwell's equations, 4<sup>th</sup> workshop on the BEM, 2012年5月16日, Saarland University, Saarbrücken, Germany

N. Nishimura, Calderon preconditioners for boundary integral equations in time harmonic wave problems, NSF workshop on the BEM, 2012年4月26日, University of Minnesota, Minneapolis, USA

[図書](計 0 件)

[産業財産権]

出願状況(計 0 件)

取得状況(計 0 件)

[その他]

特になし

#### 6. 研究組織

(1)研究代表者

西村直志 (Naoshi Nishimura)  
京都大学・情報学研究科・教授  
研究者番号: 90127118

(2)研究分担者

吉川 仁 (Hitoshi Yoshikawa)  
京都大学・情報学研究科・講師  
研究者番号: 90359836