2次元 Helmholtz 方程式の transmission 境界値問題の 高速直接解法について

A FAST DIRECT SOLVER FOR TRANSMISSION BOUNDARY VALUE PROBLEMS FOR HELMHOLTZ' EQATION IN 2D

松本 安弘¹⁾,西村 直志²⁾

Yasuhiro MATSUMOTO and Naoshi NISHIMURA

京都大学情報学研究科 大学院生 (〒 605-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: ymatsumoto@acs.i.kyoto-u.ac.jp)
 京都大学情報学研究科 教授 (〒 605-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: nchml@i.kyoto-u.ac.jp)

This paper presents a fast direct solver for transmission problems for Helmholtz' equation in 2D. We show that the multi-trace formulation makes it possible to extend the fast direct solver of the Martinsson-Rokhlin type to transmission problems, although the PMCHWT formulation fails to do so. Some numerical examples are presented to validate the proposed approach.

Key Words: Fast direct solver, Transmission boundary value problem, Helmholtz' equation in 2D, Boundary integral equation methods, Interpolative decomposition

1. はじめに

物理や工学における問題を,偏微分方程式の初期値・境界 値問題としてモデル化する際,その解を直接構成することは 通常難しい.そのため応用の上では近似解を数値的に求める ことが重要となる.このとき,適する数値解法は扱う問題の 特性によって異なる.例えば散乱体に対して解析領域が無限 の広がりを持つ電磁波動散乱問題では,差分法や有限要素法 と異なり,無限遠での放射条件を厳密に扱える境界積分方程 式法が有効であることが知られている⁽¹⁾.

境界積分方程式法を離散化して得られた線形方程式を解く には、多重極法による層ポテンシャルの高速な評価とGMRES などの反復解法との組み合わせが有効であることが知られて いる.しかし、例えばGMRESの反復回数は係数行列の条 件数に大きく左右され、悪条件時には反復回数が大きくなっ てしまう.そのため、係数行列に適切な前処理を施すことで 反復回数を減じることが重要である.特にPMCHWT定式 化^(2,3,4)においては、Calderonの式⁽⁵⁾に基づく前処理に より、反復回数を極めて少なくできると報告されている⁽⁶⁾. ただし、有効な前処理の適用が難しい場合や、多数の右辺と 同一の係数行列に対して解を求める場合もあり、これらの条 件では反復解法の性質上、計算効率が低下することは明らか である.

上記のような特定の条件における反復解法の欠点を克服

するため、境界積分方程式の直接解法が研究されている. その例としては、非対角部分行列を ACA 等で低ランク化 した H 行列を構成し、H 行列用の和, 積を用いて高速に LU 分解する方法^(7,8)や,多重極モーメントや局所展開を 陽に書き下して構成した大規模疎行列を汎用ソルバで解く Palsの方法⁽⁹⁾, Interporative Decomposition⁽¹⁰⁾(ID)を用い た Martinsson and Rokhlin の方法⁽¹¹⁾ や, Pals の方法にお いて多重極モーメント等を, ID により数値的に求めた行列 で置き換える Ho and Greengard の方法⁽¹²⁾ などが挙げられ る. この内 H 行列による方法は,必ずしも合理的に実装さ れているとは言えない H 行列の和や積を使用する点に問題 があり、Pals および Ho and Greengard の方法は疎行列の汎 用ソルバに計算効率が大きく依存する.したがって,疎行列 用汎用ソルバに依存しない Martinsson and Rokhlinの方法 は,適用可能な問題の範囲が広く,環境によらず安定した計 算速度を持つと考えられるので有効である.この方法は波動 散乱場におけるディリクレ境界値問題やノイマン境界値問題 に対しての適用例はみられるが⁽¹³⁾, transmisson 境界値問 題への適用は Isakari⁽¹⁴⁾ らによる発表がある程度であり,特 に ID において, proxy と呼ばれる仮想境界を用いた高速化 についてはほとんど研究されていない.

本稿では、2次元 Helmholtz 方程式の transmission 境界値 問題に対する Martinsson and Rokhlin の方法の適用につい て考察する。その中で、transmission 境界値問題に対する積 分方程式として広く用いられている、PMCHWT 定式化によ

²⁰¹⁶年9月26日受付, 2016年10月21日受理



Fig. 1 Domain

る積分方程式^(2,3,4) に対して Martinsson and Rokhlin の方 法を適用するとそのアルゴリズムが破綻することを指摘し, その問題は multi-trace 型の積分方程式として定式化するこ とで回避できることを説明する.さらに,提案する定式化の 妥当性および有効性を数値計算例によって確認する.

2. 問題の定式化

2.1. 支配方程式

2次元 Helmholtz 方程式の transmission 境界値問題の定式 化を行う. Fig.1 のように、2次元の無限領域の中に滑らかな 境界 Γ を持つ有界領域 Ω^- を考え、その外部を Ω^+ とする. このとき、 Ω^+ 、 Ω^- において Helmholtz 方程式

$$\Delta u + (k^+)^2 u = 0, \quad \text{in } \Omega^+ \tag{1}$$

$$\Delta u + (k^{-})^{2} u = 0, \quad \text{in } \Omega^{-}$$
(2)

を満たす解 u を, 境界 Γ 上での境界条件

$$u^+ = u^-, \quad \text{on } \Gamma \tag{3}$$

$$q^+ = q^-, \quad \text{on } \Gamma \tag{4}$$

および、 Ω^+ での散乱波 $u^s = u - u^I$ に課される放射条件の もとで解く問題を考える.ここに、

$$q^{+} = \frac{1}{\varepsilon^{+}} \frac{\partial u^{+}}{\partial n}$$
$$q^{-} = \frac{1}{\varepsilon^{-}} \frac{\partial u^{-}}{\partial n}$$

であり、 Ω^+ において $k^+ = \omega \sqrt{\varepsilon^+ \mu^+}$ は波数、 ω は周波数、 ε^+ 、 μ^+ は誘電率、透磁率であり、また Ω^- においても同様 に $k^- = \omega \sqrt{\varepsilon^- \mu^-}$ は波数、 ε^- 、 μ^- は誘電率、透磁率であり、 誘電率と透磁率はそれぞれの領域にわたって一様であるとす る. u^+ 、 u^- はそれぞれ Ω^+ 、 Ω^- からГへのuの極限値であ り、nはГから Ω^+ に向いた外向きの単位法線ベクトルとす る.また u^I は入射波である.

2.2. 境界積分方程式

式(1)~(4)に対応する境界積分方程式は,

$$\left(\varepsilon^{+}\mathcal{S}^{+} + \varepsilon^{-}\mathcal{S}^{-}\right)q\left(x\right) - \left(\mathcal{D}^{+} + \mathcal{D}^{-}\right)u\left(x\right) = u^{I}\left(x\right) \qquad (5)$$

$$-\left(\mathcal{D}^{+*}+\mathcal{D}^{-*}\right)q\left(x\right)+\left(\frac{1}{\varepsilon^{+}}\mathcal{N}^{+}+\frac{1}{\varepsilon^{-}}\mathcal{N}^{-}\right)u\left(x\right)$$
$$=-\frac{1}{\varepsilon^{+}}\frac{\partial u^{I}}{\partial n}\left(x\right) \qquad (6)$$

と表される.式 (5), (6) は PMCHWT 定式化^(2, 3, 4) による 積分方程式と呼ばれ,式(1)~(4)のような transmission 問題 に対応する,解の一意性と存在が保証された境界積分方程式 の一つである.

ここに S^- , D^- , D^{-*} , N^- は, それぞれ

$$\mathcal{S}^{-}v(x) = \int_{\Gamma} G^{-}(x-y)v(y)\mathrm{d}S_{y}$$
(7)

$$\mathcal{D}^{-}v(x) = \int_{\Gamma} \frac{\partial G^{-}(x-y)}{\partial n_{y}} v(y) \mathrm{d}S_{y}$$
(8)

$$\mathcal{D}^{-*}v(x) = \int_{\Gamma} \frac{\partial G^{-}(x-y)}{\partial n_{x}} v(y) \mathrm{d}S_{y}$$
(9)

$$\mathcal{N}^{-}v(x) = \text{p.f.} \int_{\Gamma} \frac{\partial^2 G^{-}(x-y)}{\partial n_x \partial n_y} v(y) \mathrm{d}S_y \tag{10}$$

で定義される層ポテンシャルであり、 $\frac{\partial}{\partial n_x}, \frac{\partial}{\partial n_y}$ はそれぞれ境 界 Γ 上の $x \in R^2, y \in R^2$ における法線微分を表し、 G^- は

$$G^{-}(x-y) = \frac{i}{4}H_{0}^{(1)}(k^{-}|x-y|)$$

で表される波数 k^- の 2 次元 Helmholtz 方程式の基本解で ある.ここに, $H_0^{(1)}$ は 0 次の第 1 種 Hankel 関数である.ま た,式 (10) の積分は特異積分の有限部分の意味である.ま た S^+ , D^+ , D^{+*} , N^+ はそれぞれ式 (7)~(10) の被積分核を 波数 k^+ の基本解 G^+ に置き換えたものである.

なお、本稿では実装の容易さから、得られた積分方程式は 区分一定基底を用いた選点法により離散化した.式(5),(6) を離散化すると、次のように行列表示できる.

$$\begin{pmatrix} D^+ + D^- & -(\varepsilon^+ S^+ + \varepsilon^- S^-) \\ \frac{1}{\varepsilon^+} N^+ + \frac{1}{\varepsilon^-} N^- & -(D^{+*} + D^{-*}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -u^I \\ -\frac{1}{\varepsilon^+} \frac{\partial u^I}{\partial n} \end{pmatrix}$$
(11)

ここに, S^- 等は S^- 等を離散化した行列であり,u等はu(x)等を離散化したベクトルである.

3. 高速直接解法

3.1. ID を用いた高速直接解法のアルゴリズム

本節では、参照の便宜のため、式(11)に対する ID を用いた Martinsson and Rokhlin の方法⁽¹¹⁾について述べる.この方法は、与えられた線形方程式を ID を用いて圧縮し、圧縮された線形方程式を解いて得られる解を元の線形方程式の解に変換することで問題を解く.その特徴は圧縮された線形方程式の係数行列と、解の変換に関わる行列とを一度計算しておけば、別の右辺に対しても再度使用できることである.

まず,境界 $\Gamma \in N$ 個の区分一定要素に離散化し,それら を二分木の要領で境界セグメントに区分けする.すると,初 めの状態を深さ0として,深さlのときに 2^{l} 個の境界セグメ ントに区分けされる.簡単のため,ひとつの境界セグメント の中に含まれる境界要素の数はmで等しく, $N = 2^{l}m$ であ るとする.このとき,線形方程式(11)は $2^{l} \times 2^{l}$ のブロック 行列とみなせる.

元の線形方程式を Ax = f と書き,その *i* 番目の行ブロッ クの右辺に関する式を $A_ix_i + \sum_{j \neq i}^{2^l} A_{ij}x_j = f_i$ と書く (*i*, *j* は整数).ここに, A_i は係数行列の対角部分行列である.係 数行列の非対角部分行列 $A_{ij}(i \neq j)$ は遠くの境界要素同士の 影響を評価した値であるから,基本解の性質より低周波では 比較的変化が少ないため, ID により $A_{ij} = U_i R_{ij} V_j$ と低ラ ンク近似可能であり,

$$A_i x_i + \sum_{j \neq i} U_i R_{ij} V_j x_j = f_i \tag{12}$$

と表される. R_{ij} は A_{ij} から選ばれたいくつかの行および列 スケルトンから構成された行列であり, U_i および V_j は ID で作成された行列である. 各行列やベクトルについての詳細 は後述する.

式 (12) を x_i に関して整理すると,

$$x_{i} = A_{i}^{-1} (f_{i} - U_{i} \sum_{j \neq i} R_{ij} V_{j} x_{j})$$
(13)

となる. $y_i \equiv V_i x_i$ として、両辺に左から V_i を乗じると、

$$y_i = V_i A_i^{-1} f_i - V_i A_i^{-1} U_i \sum_{j \neq i} R_{ij} y_j$$

となる. $\tilde{A}_i \equiv (V_i A_i^{-1} U_i)^{-1}$ とおき,両辺に左から \tilde{A}_i を乗じて,

$$\tilde{A}_i y_i + \sum_{j \neq i} R_{ij} y_j = \tilde{A}_i V_i A_i^{-1} f_i \tag{14}$$

が得られ,式(12)は式(14)へと圧縮される.圧縮後の式(14) に現れる非対角部分行列の R_{ij} は, A_{ij} の行および列スケル トンにより構成されているため,再度低ランク近似可能であ ることに注意する.式(14)は,隣合う境界セグメントをま とめて一つとみなし, $2^{l-1} \times 2^{l-1}$ 個のブロック行列を係数行 列とする線形方程式に組み直すことで,式(12)と同様に再 度圧縮可能になる.

また式 (14) で解かれた y_i から元の式 (12) の解 x_i を求め るには,式 (13), (14) より,

$$x_{i} = (A_{i}^{-1} - A_{i}^{-1} U_{i} \tilde{A}_{i} V_{i} A_{i}^{-1}) f_{i} + A_{i}^{-1} U_{i} \tilde{A}_{i} y_{i}$$
(15)

とすればよい. この式も, 求めた x_i を一階層深い l での y_i と読みかえることにより, 再帰的に用いることができる. 以 上により, 多階層に圧縮された線形方程式 (14) を解いて y_i を求め,式 (15) を繰り返し用いることで元の線形方程式の 解 x_i が得られる.

なお後述の数値計算では、 $(V_i A_i^{-1} U_i)^{-1}$ の計算や圧縮され た線形方程式の求解には Lapack ルーチンを用いた.

3.2. PMCHWT 定式化の proxy を用いた高速化による 破綻

前小節の方法では、圧縮のステップにおける U, V の計 算時間がボトルネックとなる.実際,U,V を求めるために は、Fig.2 に示すように、ある注目する境界セグメントであ る Γ_1 に対し、残りの境界要素 Γ_2 からの影響を評価してこれ を rank-revealing QR 分解⁽¹⁵⁾ などによって圧縮して求める とよいが、この計算には非常に時間がかかる.しかしポテン シャル論に基づくと、この計算は、Fig.2 中に Γ_p として示す proxy と呼ばれる仮想境界を用いて、 Γ_p 上の境界要素と Γ_2



Fig. 2 Γ_1 (solid arc), Γ_2 (dashed curve), and Γ_p (circle in solid curve)

の Γ_p の内部に含まれる境界要素とからの影響の評価に置き 換えることが可能である^(11, 16). これにより, U, V を高速 に計算することができる.

今考えている PMCHWT 定式化による積分方程式 (11) で は、例えば $D^+ + D^-$ など、異なる波数を持ち、境界の内側 と外側においてそれぞれ別の微分方程式を満たす層ポテン シャルの和が現れている.これらの和への遠くからの影響 を proxy を用いてまとめて評価できないため、 $D^+ \ge D^-$ 等 をそれぞれ別々に近似評価しなければならない.そのため、 Martinsson and Rokhlin の方法 ⁽¹¹⁾ を transmission 境界値 問題に適用するには離散化された作用素の並べ方に工夫が 必要である.このことを踏まえると、式 (12) の $A_i, R_{ij}, U_i,$ V_i, x_i, f_i はそれぞれ、

$$\begin{split} A_{i} &= \begin{pmatrix} D_{i}^{+} + D_{i}^{-} & -\varepsilon^{+}S_{i}^{+} - \varepsilon^{-}S_{i}^{-} \\ \frac{1}{\varepsilon^{+}}N_{i}^{+} + \frac{1}{\varepsilon^{-}}N_{i}^{-} & -D_{i}^{+*} - D_{i}^{-*} \end{pmatrix} \\ R_{ij} &= \begin{pmatrix} D_{p1,p5}^{+} & -\varepsilon^{+}S_{p1,p6}^{+} & & & \\ \frac{1}{\varepsilon^{+}}N_{p2,p5}^{+} & -D_{p2,p6}^{+} & & & \\ & & D_{p3,p7}^{-} & -\varepsilon^{-}S_{p3,p8}^{-} \\ & & & \frac{1}{\varepsilon^{-}}N_{p4,p7}^{-} & -D_{p4,p8}^{-*} \end{pmatrix} \\ U_{i} &= \begin{pmatrix} U_{i}^{p1} & U_{i}^{p3} \\ & U_{i}^{p2} & U_{i}^{p4} \end{pmatrix}, V_{j} &= \begin{pmatrix} V_{j}^{p5} & & \\ V_{j}^{p6} \\ & V_{j}^{p7} \\ & & V_{j}^{p8} \end{pmatrix} \\ x_{i} &= \begin{pmatrix} u_{i} \\ q_{i} \end{pmatrix}, f_{i} &= \begin{pmatrix} -u_{i}^{I} \\ -\frac{1}{\varepsilon^{+}}(\frac{\partial u^{I}}{\partial n})_{i} \end{pmatrix} \end{split}$$

とすると自然である.ここに, $A_i \in C^{2m \times 2m}$, $U_i \in C^{2m \times 4k}$, $R_{ij} \in C^{4k \times 4k}$, $V_j \in C^{4k \times 2m}$, $k \ll m$ である. k は ID によ る $D_{ij}^+ = U_i^{p1} D_{p1,p5}^+ V_j^{p5}$ 等の分解時のランク (スケルトンの 数) であり, 簡単のためすべての深さ*l*において*k*は一定と するが, 深さ*l*ごとに容易に可変にできる.また, *p*1等は ID によるスケルトンの選び方を示しており, *p*1,*p*2 (*p*5,*p*6) は波 数 k^+ に関する行 (列) スケルトン, *p*3,*p*4 (*p*7,*p*8) は波数 k^- に関する行 (列) スケルトンの選び方である.例えば U_i^{p1} は, 波数 k^+ の一重層ポテンシャルと,二重層ポテンシャルの圧 縮に共通して使われるため, proxy からの影響を評価する関 数として何を用いるかが,最終的な数値解の精度に大きく関 わる.このことは,後に数値計算例にて確認する. しかし、上記のような定式化を行うと、内側の波数 k^- と 外側の波数 k^+ が等しい場合、圧縮された表現 (14) におい て \tilde{A}_i が存在せず、アルゴリズムを実行することができない、 実際、

$$A_i^{-1} = \begin{pmatrix} E_i^1 & E_i^2 \\ E_i^3 & E_i^4 \end{pmatrix}$$

として、 $V_i A_i^{-1} U_i$ を計算すると、

$$V_i A_i^{-1} U_i =$$

$$\begin{pmatrix} V_{i}^{p5}E_{i}^{1}U_{i}^{p1} & V_{i}^{p5}E_{i}^{2}U_{i}^{p2} & V_{i}^{p5}E_{i}^{1}U_{i}^{p3} & V_{i}^{p5}E_{i}^{2}U_{i}^{p4} \\ V_{i}^{p6}E_{i}^{3}U_{i}^{p1} & V_{i}^{p6}E_{i}^{4}U_{i}^{p2} & V_{i}^{p6}E_{i}^{3}U_{i}^{p3} & V_{i}^{p6}E_{i}^{4}U_{i}^{p4} \\ V_{i}^{p7}E_{i}^{1}U_{i}^{p1} & V_{i}^{p7}E_{i}^{2}U_{i}^{p2} & V_{i}^{p7}E_{i}^{1}U_{i}^{p3} & V_{i}^{p7}E_{i}^{2}U_{i}^{p4} \\ V_{i}^{p8}E_{i}^{3}U_{i}^{p1} & V_{i}^{p8}E_{i}^{4}U_{i}^{p2} & V_{i}^{p8}E_{i}^{3}U_{i}^{p3} & V_{i}^{p8}E_{i}^{4}U_{i}^{p4} \end{pmatrix}$$

$$(16)$$

となり、内側の波数 k^- と外側の波数 k^+ が等しいときは、 $U_i^{p1} = U_i^{p3}$, $U_i^{p2} = U_i^{p4}$, $V_i^{p5} = V_i^{p7}$, $V_i^{p6} = V_i^{p8}$ である ため、式 (16) の右辺の行列が特異となり、逆が存在せず、 $\tilde{A}_i = (V_i A_i^{-1} U_i)^{-1}$ を求めることができない、内外の波数が 異なるときでも、少なくとも内外のコントラストが小さい場 合は式 (16) の行列の条件数が大きくなり、高速多重極法を 用いた反復解法等に比較し、数値的な精度が悪化すると考え られる.

3.3. multi-trace 型の積分方程式による定式化

前小節における問題は,一箇所に3つ以上の領域が接して いる場合の定式化として発展した multi-trace 型の積分方程 式^(17, 18)

$$\mathcal{D}^{+}u^{+}(x) - \varepsilon^{+}\mathcal{S}^{+}q^{+}(x) - \frac{u^{-}}{2}(x) = -u^{I}(x) \quad (17)$$

$$\frac{1}{\varepsilon^{+}}\mathcal{N}^{+}u^{+}(x) - \mathcal{D}^{+*}q^{+}(x) - \frac{q^{-}}{2}(x) = -\frac{1}{\varepsilon^{+}}\frac{\partial u^{1}}{\partial n}(x) \quad (18)$$
$$\frac{u^{+}}{2}(x) + \mathcal{D}^{-}u^{-}(x) - \varepsilon^{-}\mathcal{S}^{-}q^{-}(x) = 0 \quad (19)$$

$$\frac{q^{+}}{2}(x) + \frac{1}{\varepsilon^{-}}\mathcal{N}^{-}u^{-}(x) - \mathcal{D}^{-*}q^{-}(x) = 0 \quad (20)$$

を応用することで回避できる.ここに、 u^+ は、解uの外側 から境界への極限であり、同様に u^- は、解uの内側から境 界への極限である.multi-trace型の積分方程式(17)~(20)を 式(12)の形式に離散化すると、 $A_i, R_{ij}, U_i, V_i, x_i, f_i$ はそれ ぞれ、

$$A_{i} = \begin{pmatrix} D_{i}^{+} & -\varepsilon^{+}S_{i}^{+} & -\frac{I}{2} \\ \frac{1}{\varepsilon^{+}}N_{i}^{+} & -D_{i}^{+*} & -\frac{I}{2} \\ \frac{I}{2} & D_{i}^{-} & -\varepsilon^{-}S_{i}^{-} \\ & \frac{I}{2} & \frac{1}{\varepsilon^{-}}N_{i}^{-} & -D_{i}^{-*} \end{pmatrix}$$
(21)
$$R_{ij} = \begin{pmatrix} D_{p1,p5}^{+} & -\varepsilon^{+}S_{p1,p6}^{+} & & \\ \frac{1}{\varepsilon^{+}}N_{p2,p5}^{+} & -D_{p2,p6}^{+*} & & \\ & & D_{p3,p7}^{-} & -\varepsilon^{-}S_{p3,p8}^{-} \\ & & \frac{1}{\varepsilon^{-}}N_{p4,p7}^{-} & -D_{p4,p8}^{-*} \end{pmatrix}$$
(22)

$$U_{i} = \begin{pmatrix} U_{i}^{p1} & & & \\ & U_{i}^{p2} & & \\ & & U_{i}^{p3} & \\ & & & U_{i}^{p4} \end{pmatrix}$$
(23)

$$V_{j} = \begin{pmatrix} V_{j}^{p5} & & & \\ & V_{j}^{p6} & & \\ & & V_{j}^{p7} & \\ & & & V_{j}^{p8} \end{pmatrix}$$
(24)

$$x_{i} = \begin{pmatrix} u_{i}^{+} \\ q_{i}^{+} \\ u_{i}^{-} \\ q_{i}^{-} \end{pmatrix}, f_{i} = \begin{pmatrix} -u_{i}^{I} \\ -\frac{1}{\varepsilon^{+}} (\frac{\partial u^{I}}{\partial n})_{i} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$
(25)

と書かれる.

この定式化において, 内側と外側の波数が等しい際, すなわ ち $\varepsilon^- = \varepsilon^+ (= \varepsilon)$ のときの \tilde{A}_i を考える.このとき, $S_i^+ = S_i^-$ であり, これを S_i と表記する. D_i , D_i^* , N_i も同様とする. A_i は行列 C_i を用いて,

$$A_i = \begin{pmatrix} C_i & -\frac{I}{2} \\ \frac{I}{2} & C_i \end{pmatrix}$$

と書ける.ここに,

$$C_i = \begin{pmatrix} D_i & -\varepsilon S_i \\ \frac{1}{\varepsilon} N_i & -D_i^* \end{pmatrix}$$

である.この時, Calderon の式⁽⁵⁾ により,

 $C_i^2 = \begin{pmatrix} \frac{I}{4} & 0\\ 0 & \frac{I}{4} \end{pmatrix}$

である (Calderon の式は離散化の影響により数値的には等号 が成立しないことに注意する). 従って,

$$\begin{pmatrix} 2C_i & I\\ -I & 2C_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_i & -\frac{I}{2}\\ \frac{I}{2} & C_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0\\ 0 & I \end{pmatrix}$$

より,

$$A_i^{-1} = \begin{pmatrix} 2C_i & I\\ -I & 2C_i \end{pmatrix}$$

であり, Ãは,

$$\begin{split} \tilde{A}_{i} &= (V_{i}A_{i}^{-1}U_{i})^{-1} \\ &= 2 \cdot \\ \begin{pmatrix} V_{i}^{p5}D_{i}U_{i}^{p1} & -\varepsilon V_{i}^{p5}S_{i}U_{i}^{p2} & \frac{1}{2}V_{i}^{p5}U_{i}^{p1} & 0 \\ \frac{1}{\varepsilon}V_{i}^{p6}N_{i}U_{i}^{p1} & -V_{i}^{p6}D_{i}^{*}U_{i}^{p2} & 0 & \frac{1}{2}V_{i}^{p6}U_{i}^{p2} \\ -\frac{1}{2}V_{i}^{p5}U_{i}^{p1} & 0 & V_{i}^{p5}D_{i}U_{i}^{p1} & -\varepsilon V_{i}^{p5}S_{i}U_{i}^{p2} \\ 0 & -\frac{1}{2}V_{i}^{p6}U_{i}^{p2} & \frac{1}{\varepsilon}V_{i}^{p6}N_{i}U_{i}^{p1} & -V_{i}^{p6}D_{i}^{*}U_{i}^{p2} \end{pmatrix}^{-1} \end{split}$$

と求められる.したがって, multi-trace 型の定式化 (21)~ (25)により, $V_i A_i^{-1} U_i$ の特異性は除去され, 問題なく \tilde{A}^{-1} を 得ることができる.また Calderon の式により, multi-trace 型の定式化と PMCHWT 定式化との等価性を示すことがで



Fig.3 Evaluation of U^{p1} etc. Fig.4 Evaluation of V^{p5} etc.

Table 1 Evalution pattern of proxy

	proxy1	proxy2
U^{p1}	$G^+(x-y)$	$G^+(x-y)$
U^{p2}	$\frac{\partial G^+(x-y)}{\partial n_x}$	$\int_{\Gamma_y} \frac{\partial^2 G^+(x-y)}{\partial n_x \partial n_y} \mathrm{d}S_y$
U^{p3}	$G^{-}(x-y)$	$G^{-}(x-y)$
U^{p4}	$\frac{\partial G^-(x-y)}{\partial n_x}$	$\int_{\Gamma_y} \frac{\partial^2 G^-(x-y)}{\partial n_x \partial n_y} \mathrm{d}S_y$
V^{p5}	$\int_{\Gamma_y} \frac{\partial G^+(x-y)}{\partial n_y} \mathrm{d}S_y$	$\int_{\Gamma_y}^{y} \frac{\partial^2 G^+(x-y)}{\partial n_x \partial n_y} \mathrm{d}S_y$
V^{p6}	$\int_{\Gamma_y} G^+(x-y) \mathrm{d}S_y$	$\int_{\Gamma_y} G^+(x-y) \mathrm{d}S_y$
V^{p7}	$\int_{\Gamma_y} \frac{\partial G^-(x-y)}{\partial n_y} \mathrm{d}S_y$	$\int_{\Gamma_{y_e}} \frac{\partial^2 G^-(x-y)}{\partial n_x \partial n_y} \mathrm{d}S_y$
V^{p8}	$\int_{\Gamma_y} G^-(x-y) \mathrm{d}S_y$	$\int_{\Gamma_y} G^-(x-y) \mathrm{d}S_y$

きるので,積分方程式(17)~(20)から得られる解が一意であり, $u^+ = u^-$, $q^+ = q^-$ であることがわかる.

節3.1の多階層の方法を、この定式化による積分方程式に 適用する際は、線形方程式の圧縮、あるいは圧縮された解 を元の解に変換する時に、次の階層において multi-trace 型 の形式が保たれるように線形方程式の要素の並び替えを行 うことに注意する.以上により、multi-trace 型の定式化を 用いると、Martinsson and Rokhlin の高速直接解法⁽¹¹⁾を Helmholtz 方程式の transmission 問題に対して、圧縮アルゴ リズムの破綻を回避しつつ適用できることが示された.

4. 数值計算例

本節では,節 3.3 で述べた multi-trace 型の定式化による 高速直接解法の数値計算結果を述べる.解析解が得られる条 件において,2種類の proxy と問題の自由度数ごとの,計算 時間と数値解の精度を示す.

計算条件は次の通りである.境界形状は中心が $(x_1, x_2) =$ (0,0) で半径 r = 0.45 の正円とし,入射波を $u^I = J_1(k^+r)e^{i\theta}$ とすると,解析解を容易に求めることができる.ここに, J_1 は一次の Bessel 関数であり, θ は極座標表示における角度で ある.境界 Γ の外側の誘電率 $\varepsilon^+ = 1$,内側の誘電率 $\varepsilon_- = 4.0$, 外側の波数 $k^+ = 8.0$,内側の波数 $k^- = 4.0$ とし,リーフセ グメントの分割数 m = 100 とした.また二分木の深さ l は 2



Fig. 5 Computational time vs DOF



Fig. 6 Relative errors of solutions

~9, つまり問題の自由度数 N は 1600~204800 の 8 パター ンとし, ID による行, 列スケルトンの数はk = 40とした. Fig.2 における仮想境界 Γ_p の半径は, 文献⁽¹⁶⁾ にならい Γ_1 を囲む最小の円の半径の1.5 倍とし, Γ_p はその半径によら ず 70 の境界要素に分割した.そして、U^{p1} 等 (i は省略) を求 めるための, Γ_1 と, Γ_p および Γ_p の内部に含まれる Γ_2 (以 下、 Γ'_p と呼び、特記しない限り Γ'_p 部分も含めて Γ_p と呼称 する) との影響の評価については, Table 1 に示す 2 パター ンの関数を用いた. Table 1 における関数はそれぞれ, U^{p1} 等に関しては Fig.3 のように, Γ_p上に密度関数が置かれてい るときのポテンシャルを Γ_1 上で評価したもの,逆に V^{p5} 等 は Fig.4 のように, Γ₁ 上に密度関数が置かれているときのポ テンシャルを Γ_p 上で評価したものである.これらの図で,xはポテンシャルの評価点, y は密度関数が配置された境界要 素上の点とし, 法線 n_x および n_y は Fig.3, Fig.4 に示す向き とする.

各 proxy 評価パターンはそれぞれ, proxy1 は Gillman⁽¹⁶⁾ らの方法の自然な拡張であり, proxy2 は, proxy1 を改良し て, Γ'_p 部分の影響を大きく評価できるようにした方法であ る. proxy2 における改良の方針は次の通りである. 例えば V^{p5} , V^{p7} では, Γ_1 上に二重層ポテンシャルを配置し, Γ'_p 部 分上においてポテンシャルを計算すると、 Γ_1 上での法線方向 と、x - y との向きが直交に近くなるため、小さな値が計算 される.このため、ID による圧縮時に Γ'_p 部分に近い Γ_1 上 の境界要素がスケルトンとして選ばれにくくなり、ID によ る圧縮の精度が低下することが予想される.しかし、 Γ_1 上 の二重層ポテンシャルの法線微分を Γ'_p で評価する場合には、 小さな値が計算されることはないため、 $\Gamma_1 \ge \Gamma_2$ 部分との境 目付近の境界要素がスケルトンとして選択される.proxyの 改良の方針は、 U^{p2} 、 U^{p4} に関しても同様である.

二分木の根を深さ *l* = 0 として, それぞれの自由度数に おいて最大深さから深さ *l* = 2 までを圧縮して線形方程式 を解いた場合の,各 proxy ごとの計算時間を Fig.5 に示し, 数値解と解析解との (*l*₂) 相対誤差を Fig.6 に示す. Fig.5 よ り,2つの proxy 評価パターンどちらでも,概ね *O*(*N*)の高 速計算を実現できていることがわかる.しかし, Fig.6 から, proxy1 では,自由度数が大きくなると,数値解の精度が悪 化することがわかる.このように,multi-trace型の定式化を 行った上で,proxy2の方法を用いることで,transmission境 界値問題を精度良く解くことができることが確認された.た だし,この proxy 評価法が最適であるかという議論は別途必 要である.

5. おわりに

本稿では、2次元 Helmholtz 方程式の transmission 境界値 問題に対し、multi-trace 型の積分方程式の定式化^(17, 18)を 導入することで、Martinsson and Rokhlin による高速直接解 法^(11, 13)が適用可能になることを示し、数値計算によりそ の妥当性を確認するとともに.proxyの取り方の解の精度へ の影響について考察した.

今後の課題としては,正円以外の複雑な散乱体形状や3次 元問題,周期境界値問題への適用検討が挙げられる.

参考文献

- N Nishimura : Fast multipole accelerated boundary integral equation methods. Applied Mechanics Reviews, 55, 299-324, 2002.
- (2) AJ Poggio, EK Miller : Integral equation solutions of three dimensional scattering problems. MB Assoc., 1970.
- (3) Y Chang, R Harrington: A surface formulation for characteristic modes of material bodies. IEEE transactions on antennas and propagation, 25, 789-795, 1977.
- (4) TK Wu and LL Tsai: Scattering from arbitrarily-shaped lossy dielectric bodies of revolution. Radio Science 12, 709-718, 1977.
- (5) JC Nédélec : Acoustic and Electromagnetic Equations. Springer, 2001.
- (6) K Niino, N Nishimura: Preconditioning based on Calderon's formulae for periodic fast multipole meth-

ods for Helmholtz' equation. Journal of Computational Physics, 231.1, 66-81. 2012.

- (7) M Bebendorf : *Hierarchical matrices*. Springer Berlin Heidelberg, 2008.
- (8) 松本安弘,西村直志,新納和樹: H 行列演算を用いた 2次元 Helmholtz 方程式の1周期境界値問題の高速直接 解法について.計算数理工学論文集,14,79-84,2014.
- (9) TP Pals: Multipole for scattering computations: Spectral discretization, stabilization, fast solvers. PhD thesis of University of California at Santa Barbara, 2004.
- (10) H Cheng, Z Gimbutas, PG Martinsson, V Rokhlin: On the compression of low rank matrices. SIAM Journal on Scientific Computing, 26, 1389-1404, 2005.
- (11) PG Martinsson, V Rokhlin: A fast direct solver for boundary integral equations in two dimensions. Journal of Computational Physics, 205, 1-23, 2005.
- (12) KL Ho, L Greengard : A fast direct solver for structured linear systems by recursive skeletonization. SIAM Journal on Scientific Computing, 34, 2507-2532, 2012.
- (13) PG Martinsson, V Rokhlin: A fast direct solver for scattering problems involving elongated structures. Journal of Computational Physics, 221, 288-302, 2007.
- (14) H Isakari, J Lee, T Matsumoto: A fast direct solver for the boundary element method with PMCHWT formulation. Proceedings of the 11th world congress on computational mechanics, July, 20-25, Barcelona, Spain, 2014.
- (15) M Gu, S C Eisenstat: Efficient algorithms for computing a strong rank-revealing QR factorization. SIAM Journal on Scientific Computing, 17, 848-869, 1996.
- (16) A Gillman, P M Young, P G Martinsson : A direct solver with O(N) complexity for integral equations on one-dimensional domains. Frontiers of Mathematics in China 7.2, 217-247, 2012.
- (17) X Claeys, R Hiptmair, C Jerez-Hanckes : Multi-trace boundary integral equations. Direct and inverse problems in wave propagation and applications, 51-100, 2012.
- (18) C Turc, V Domínguez, M Lyon: Comparisons of integral equations formulations for high frequency two-dimentional Helmholtz transmission problems in domeins with corners. Proceedings of the 12th international conference on mathematical and numerical aspects of wave propagation, Karlsruhe Institute of Technology, 2015.