

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

PRECONDITIONING BASED ON CALDERON'S FORMULAE

IN THE PERIODIC FMM WITH THE GALERKIN METHOD FOR HELMHOLTZ' EQUATION

新納 和樹¹⁾, 西村 直志²⁾

Kazuki NIINO and Naoshi NISHIMURA

1) 京都大学情報学研究科複雑系科学専攻 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: niino@acs.i.kyoto-u.ac.jp)

2) 京都大学情報学研究科複雑系科学専攻 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: nchml@i.kyoto-u.ac.jp)

Periodic FMM (fast multipole method) is a fast algorithm to solve periodic boundary value problems numerically. For further enhancements of the efficiency of the periodic FMM, it is important to improve convergence of iterative solvers such as GMRES or BiCG. In this paper, we present a preconditioner based on Calderon's formulae to accelerate convergence of iterative solvers in the periodic FMM for Helmholtz' equation discretised with Galerkin's method. This preconditioner can be implemented more easily and make convergence faster than conventional ones. We also make several numerical experiments with this preconditioner.

Key Words: Boundary Integral Equation Method, Calderon's Formulae, Preconditioning, Krylov subspace method, Galerkin's method, periodic FMM, Helmholtz' equation

1. 序論

フォトニック結晶やメタマテリアルといった周期構造を持つ光学材料は、ストップバンドや負の屈折率などの興味深い性質を示すことが知られ、近年注目を集めている。そのためこの様な光学材料を解析するための、周期構造における波動散乱問題の高速解法の開発が応用上重要な課題となっている。周期波動散乱問題の解法として、有限差分時間領域 (FDTD) 法がよく利用されるが、境界要素法と周期多重極法とを組み合わせた、高速多重極境界要素法も有効であることが Otani and Nishimura⁽¹⁾ などによって示されている。

境界要素法は、放射条件などの無限遠における条件を近似することなく取り入れることで、散乱問題を精度良く扱える解法である。これと高速多重極法を組み合わせることで、問題を高速に解くことができる。また高速多重極法では、領域をセルと呼ばれる単位領域で分割する。そのため周期境界値問題において、ユニットセルと高速多重極法のセルを同一視することにより、周期性を持つ問題に対しても高速に計算を行うことが可能となる。この方法は高速周期多重極法と呼ばれ、これによって周期境界値問題を効率よく扱うことができる。しかしながら、高速多重極法では境界積分方程式を離散

化して得られる線形方程式を反復解法で解くことが必須であるので、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。

一方、GMRES や BiCG といった Krylov 部分空間を用いた線形方程式の反復解法では前処理行列を係数行列に乗ずることで、係数行列の性質を良くし、収束を速める前処理と呼ばれる手法が知られている⁽²⁾。前処理に関する研究は様々なものが提案されているが、Calderon の式を用いた前処理手法は有力なものの一つである。これは境界要素法に特化した前処理であり、Steinbach and Wendland によって Laplace 方程式に関する前処理として提案された⁽³⁾。また Christiansen and Nédélec はこれを Helmholtz 方程式に拡張した⁽⁴⁾。Antoine and Boubendir は Calderon の式の方法が特に多領域問題に有効であることを指摘し、2次元 Helmholtz 方程式の非周期において良好な収束性能の改善が得られることを数値的に示した⁽⁵⁾。これらの結果を受け、著者らのグループでは Helmholtz 方程式を支配方程式とする周期境界値問題における Calderon の式に基づく前処理に関する研究を行い、周期境界値問題においても Calderon の式に基づく前処理が有効であることと、周期、非周期に依らず、前処理行列を用いずに方程式と未知数を適当に並び替えるだけで、前処理行列を用いた従来の Calderon の式に基づく前処理以上に収束を速

2010 年 9 月 29 日受付, 2010 年 11 月 2 日受理

[†]Dedicated to the memory of Prof. Masataka TANAKA

めることができることを発見した。しかし離散化手法として選点法を用いており、精度の面で課題を残した⁽⁶⁾。

そこで本研究では、Galerkin 法における Calderon の式に基づく前処理について論ずる。離散化手法として Galerkin 法を用いる場合、方程式と未知数の並び替えによって前処理を行うことはできないが、方程式と未知数を適当に並び替えた上で簡単な前処理行列を用いるだけで、選点法のとときと同様、従来法よりも速く反復法を収束させることができる。この前処理行列は離散化に用いる基底から得られる Gram 行列であり、反復法を用いることで簡単に逆行列を求めることができる。

本論文の構成は次の様である。第2節では3次元 Helmholtz 方程式を支配方程式とする周期境界値問題とこの問題の Galerkin 法を用いた境界要素法による解法の定式化について述べ、第3節では Calderon の式に基づく前処理の定式化を行う。第4節で数値計算結果を示し、第5節では結論と今後の課題を記す。

2. 定式化

本節では3次元における Helmholtz 方程式を支配方程式とする周期境界値問題と、この問題に対する境界要素法の定式化を行う。

2.1. 3次元 Helmholtz 方程式

考える領域 $D \subset \mathbb{R}^3$ を

$$D = (-\infty, \infty) \otimes [-L/2, L/2] \otimes [-L/2, L/2].$$

と定義する。

領域 D は N_d 個の部分領域に、 $D = \overline{D_1 \cup D_2 \cup \dots \cup D_{N_d}}$ と分割される (Fig. 1)。ここに D_1 は入射波が入射する領域であり、無限領域であるとする。

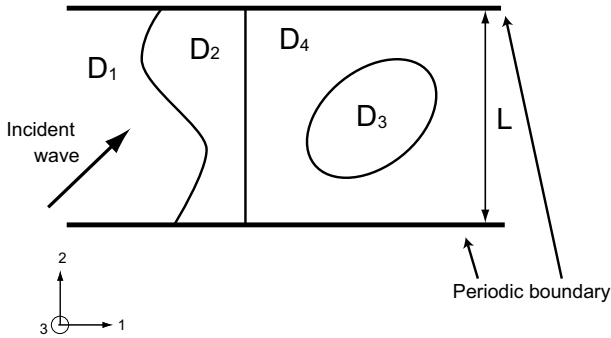


Fig. 1 Periodic boundary value problems.

各領域 D_i 上で、Helmholtz 方程式

$$\Delta u + k_i^2 u = 0$$

を満たす関数 u を、境界 $\partial D_i \cap \partial D_j$ 上での境界条件

$$u_i = u_j \\ \frac{1}{\varepsilon_i} \frac{\partial u_i}{\partial n} = \frac{1}{\varepsilon_j} \frac{\partial u_j}{\partial n}$$

周期境界上での周期境界条件

$$u(x_1, L/2, x_3) = e^{i\beta_2} u(x_1, -L/2, x_3) \\ u(x_1, x_2, L/2) = e^{i\beta_3} u(x_1, x_2, -L/2) \\ \frac{\partial u}{\partial x_2} \left(x_1, \frac{L}{2}, x_3 \right) = e^{i\beta_2} \frac{\partial u}{\partial x_2} \left(x_1, -\frac{L}{2}, x_3 \right) \\ \frac{\partial u}{\partial x_3} \left(x_1, x_2, \frac{L}{2} \right) = e^{i\beta_3} \frac{\partial u}{\partial x_3} \left(x_1, x_2, -\frac{L}{2} \right)$$

および無限領域において、 u (D_1 では散乱波 $u^s = u - u^I$) に対する放射条件のもとで求める問題を考える。ここに u_i は u の領域 D_i から ∂D_i への極限值、 k_i は領域 D_i 上での波数、 u^I は入射波、 β_i ($i = 2, 3$) は位相差、 ε_i は領域 D_i 上で定義された定数とする。 \mathbf{n} は境界上で定義される法線を表し、向きはあらかじめ定められているとする。

2.2. 境界要素法

上記の問題に対応する境界積分方程式は

$$\sum_{j=1}^{N_d} \text{sgn}_j(\mathbf{x}) \left\{ \varepsilon_j S^j(\text{sgn}_j w) - \mathcal{D}^j u \right\} = \text{sgn}_1(\mathbf{x}) u^I(\mathbf{x}) \quad (1)$$

$$\sum_{j=1}^{N_d} \left\{ \mathcal{D}^{*j}(\text{sgn}_j w) - \frac{1}{\varepsilon_j} \mathcal{N}^j u \right\} = \text{sgn}_1(\mathbf{x}) \frac{1}{\varepsilon_1} \frac{\partial u^I}{\partial \mathbf{n}}(\mathbf{x}) \quad (2)$$

となる。ただし、 $\mathbf{x} \in \partial D$ 。ここに、 $S^j, \mathcal{D}^j, \mathcal{D}^{*j}, \mathcal{N}^j$ は、それぞれ

$$S^j(\text{sgn}_j v) = \int_{\partial D_j} G_j^p(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \text{sgn}_j(\mathbf{y}) v(\mathbf{y}) dS_{\mathbf{y}} \quad (3)$$

$$\mathcal{D}^j v = \int_{\partial D_j} \text{sgn}_j(\mathbf{y}) \frac{\partial G_j^p(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\partial n_{\mathbf{y}}} v(\mathbf{y}) dS_{\mathbf{y}} \quad (4)$$

$$\mathcal{D}^{*j}(\text{sgn}_j v) = \int_{\partial D_j} \text{sgn}_j(\mathbf{x}) \frac{\partial G_j^p(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\partial n_{\mathbf{x}}} \text{sgn}_j(\mathbf{y}) v(\mathbf{y}) dS_{\mathbf{y}} \quad (5)$$

$$\mathcal{N}^j v = \int_{\partial D_j} \text{sgn}_j(\mathbf{x}) \text{sgn}_j(\mathbf{y}) \frac{\partial^2 G_j^p(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\partial n_{\mathbf{x}} \partial n_{\mathbf{y}}} v(\mathbf{y}) dS_{\mathbf{y}} \quad (6)$$

と定義される積分作用素、 $\partial D = \cup_j \partial D_j$ 、 w, u は未知関数であり、それぞれ

$$u = u_i = u_j, \quad w = \frac{1}{\varepsilon_i} \frac{\partial u_i}{\partial n} = \frac{1}{\varepsilon_j} \frac{\partial u_j}{\partial n} \quad \text{on } \partial D_i \cap \partial D_j$$

である。また、 $\text{sgn}_j(\mathbf{x})$ は \mathbf{x} における法線が D_j から見て外向きのとき 1、内向きのとき -1、その他のとき 0 の値を取る符号関数である。したがって式 (1)、(2) の各項において $\text{sgn}_j(\mathbf{x}) n_x$ 、 $\text{sgn}_j(\mathbf{y}) n_y$ が、領域 D_j から見た外向き法線ベクトルになっており、 $\mathbf{x} \in \partial D_1$ のときに限り右辺が非零となる。また式 (1)、(2) における総和は実質的に \mathbf{x} が存在する境界点に接する領域に関する和となることに注意する。さらに G_j^p は Helmholtz 方程式の周期グリーン関数であり、

$$G_j^p(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \sum_{\xi \in \mathcal{L}} e^{i\beta \cdot \xi} G_j(\mathbf{x} - \mathbf{y} - \xi) \\ G_j(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \frac{e^{ik_j |\mathbf{x} - \mathbf{y}|}}{4\pi |\mathbf{x} - \mathbf{y}|}$$

と表される。 \mathcal{L} は $\mathcal{L} = \{(0, \xi_2, \xi_3) | \xi_2 = pL, \xi_3 = qL, p, q \in \mathbb{Z}\}$ なる格子点である。

2.3. 境界積分方程式の離散化

本研究では、積分方程式の離散化に Galerkin 法を用いる。境界を三角形メッシュを用いて離散化し、頂点の数を N_h とする。 $t_n(\mathbf{x})$ を n 番目の頂点で値が1、その他の頂点で0となる様な区分線形要素とし、これを用いて境界積分方程式 (1)、(2) を Galerkin 法で離散化すると、以下の式が得られる:

$$\sum_{m=1}^{N_h} (S_{nm}q_m - D_{nm}u_m) = u_n^I \quad (7)$$

$$\sum_{m=1}^{N_h} (D_{nm}^*q_m - N_{nm}u_m) = \frac{1}{\varepsilon_1}q_n^I \quad (8)$$

ここに u_n^I, q_n^I は、それぞれ

$$u_n^I = \int_{\partial D_1} t_n(\mathbf{x}) \text{sgn}_1(\mathbf{x}) u^I(\mathbf{x}) dS$$

$$q_n^I = \int_{\partial D_1} t_n(\mathbf{x}) \frac{\partial u^I(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{n}} dS,$$

$S_{nm}, D_{nm}, D_{nm}^*, N_{nm}$ は、それぞれ

$$S_{nm} = \sum_{j=1}^{N_d} \varepsilon_j S_{nm}^j, \quad D_{nm} = \sum_{j=1}^{N_d} D_{nm}^j$$

$$D_{nm}^* = \sum_{j=1}^{N_d} D_{nm}^{*j}, \quad N_{nm} = \sum_{j=1}^{N_d} \frac{1}{\varepsilon_j} N_{nm}^j,$$

$S_{nm}^j, D_{nm}^j, D_{nm}^{*j}, N_{nm}^j$ は、それぞれ

$$S_{nm}^j = \int_{\partial D_j} t_n(\mathbf{x}) \text{sgn}_j(\mathbf{x}) (S^j(\text{sgn}_j t_m))(\mathbf{x}) dS_x$$

$$D_{nm}^j = \int_{\partial D_j} t_n(\mathbf{x}) \text{sgn}_j(\mathbf{x}) (\mathcal{D}^j t_m)(\mathbf{y}) dS_x$$

$$D_{nm}^{*j} = \int_{\partial D_j} t_n(\mathbf{x}) (\mathcal{D}^{*j}(\text{sgn}_j t_m))(\mathbf{x}) dS_x$$

$$N_{nm}^j = \int_{\partial D_j} t_n(\mathbf{x}) (\mathcal{N}^j t_m)(\mathbf{x}) dS_x,$$

と定義される。

S_{nm} を (n, m) 成分に持つ行列を S とし、同様に D, D^*, N も定義する。さらに $\mathbf{u}, \mathbf{q}, \mathbf{u}^I, \mathbf{q}^I$ をそれぞれ、 u_m, q_m, u_m^I, q_m^I を第 m 成分に持つベクトルとすると、式 (7)、(8) は

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (9)$$

と書き直せる。ただし

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -D & S \\ -N & D^* \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{q} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}^I \\ \frac{1}{\varepsilon_1} \mathbf{q}^I \end{pmatrix}$$

である。

2.4. 周期高速多重極法

周期高速多重極法は、観測点 \mathbf{x} から離れた点の与える影響をまとめて計算することで、式 (1)、(2) の左辺を高速に計算するアルゴリズムである。詳しくは Otani and Nishimura⁽⁷⁾などを参照されたい。

3. 前処理

本小節では上で導いた式 (9) を反復法で解く際に用いる前処理について述べる。

3.1. Calderon の式

積分作用素 (3)、(4)、(5)、(6) について、以下の関係式が成り立つ:

$$\frac{\mathcal{I}}{4} = -S^j \mathcal{N}^j + \mathcal{D}^j \mathcal{D}^j, \quad 0 = S^j \mathcal{D}^{*j} - \mathcal{D}^j S^j \quad (10)$$

$$\frac{\mathcal{I}}{4} = \mathcal{D}^{*j} \mathcal{D}^{*j} - \mathcal{N}^j S^j, \quad 0 = -\mathcal{D}^{*j} \mathcal{N}^j + \mathcal{N}^j \mathcal{D}^j \quad (11)$$

ただし、 \mathcal{I} は単位作用素を表す。この式は Helmholtz 方程式の周期境界値問題における Calderon の式である。

3.2. 選点法における Calderon の式に基づく前処理

式 (10)、(11) は

$$\begin{pmatrix} -\mathcal{D}^j & S^j \\ -\mathcal{N}^j & \mathcal{D}^{*j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\mathcal{D}^j & S^j \\ -\mathcal{N}^j & \mathcal{D}^{*j} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\mathcal{I}}{4} & 0 \\ 0 & \frac{\mathcal{I}}{4} \end{pmatrix}$$

と書き直すことができる。この式は積分作用素

$$\begin{pmatrix} -\mathcal{D}^j & S^j \\ -\mathcal{N}^j & \mathcal{D}^{*j} \end{pmatrix} \quad (12)$$

が自身の逆作用素であることを表している。さらに、以下の関係が成り立つことが知られている:

$$\begin{pmatrix} -\sum_j \mathcal{D}^j & \sum_j \frac{1}{\varepsilon_j} S^j \\ -\sum_j \varepsilon_j \mathcal{N}^j & \sum_j \mathcal{D}^{*j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\sum_j \mathcal{D}^j & \sum_j \frac{1}{\varepsilon_j} S^j \\ -\sum_j \varepsilon_j \mathcal{N}^j & \sum_j \mathcal{D}^{*j} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{I} & 0 \\ 0 & \mathcal{I} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathcal{K}_1 & \mathcal{K}_2 \\ \mathcal{K}_3 & \mathcal{K}_4 \end{pmatrix} \quad (13)$$

ここに $\mathcal{K}_1, \mathcal{K}_2, \mathcal{K}_3, \mathcal{K}_4$ はコンパクト作用素である⁽⁵⁾。これより、式 (12) を選点法で離散化して得られる行列 \tilde{A}_j は

$$\tilde{A}_j^2 \approx I,$$

を満たすことがわかる。したがって、式 (1)、(2) を選点法で離散化して得られる方程式

$$\tilde{\mathbf{A}}\mathbf{x} = \tilde{\mathbf{b}} \quad (14)$$

を解く際に、係数行列自身を前処理行列として利用することができる。

さらに係数行列自身を前処理行列として利用できる場合、GMRES を反復解法として用いると、式 (14) を前処理行列無しで解いた方がより少ない反復回数で収束することが知られている。これは前処理行列を用いた場合と用いなかった場合の Krylov 部分空間を比較することで説明することができる。詳しくは新納、西村⁽⁶⁾を参照されたい。

3.3. Galerkin 法における Calderon の式に基づく前処理

本小節では Galerkin 法を用いた際の Calderon の式に基づく前処理について述べるが、まず Galerkin 法の場合、上記の選点法における方法がそのまま適用できないことを示す。

ζ, η^j を、境界 ∂D_j 上で定義され、 $\eta^j(\mathbf{x}) = \text{sgn}_j(\mathbf{x}) S^j(\text{sgn}_j \zeta)$ を満たす関数とする。さらに ζ, η^j は区分線形要素 t_n を用いて

$$\zeta(\mathbf{x}) \approx \sum_{n=1}^{N_h} \zeta_n t_n(\mathbf{x})$$

$$\eta^j(\mathbf{x}) \approx \sum_{n=1}^{N_h} \eta_n^j t_n(\mathbf{x})$$

と展開されるとする。このとき

$$\begin{aligned} \sum_{m=1}^{N_h} S_{nm}^j \zeta_m &\approx \int_{\partial D_j} t_n(\mathbf{x}) \text{sgn}_j(\mathbf{x}) (\mathcal{S}^j(\text{sgn}_j \zeta))(\mathbf{x}) dS_x \\ &= \int_{\partial D_j} t_n(\mathbf{x}) \eta^j(\mathbf{x}) dS_x \\ &\approx \int_{\partial D_j} t_n(\mathbf{x}) \sum_{m=1}^{N_h} \eta_m^j t_m(\mathbf{x}) dS_x \\ &= \sum_{m=1}^{N_h} \eta_m^j \int_{\partial D_j} t_n(\mathbf{x}) t_m(\mathbf{x}) dS_x \end{aligned}$$

となり、

$$\tilde{\eta}_n^j := \sum_{m=1}^{N_h} S_{nm}^j \zeta_m \approx \sum_{m=1}^{N_h} T_{nm} \eta_m^j \quad (15)$$

なる関係が得られる。ここに T_{nm} は

$$T_{nm} = \int_{\text{supp}.t_n \cap \text{supp}.t_m} t_n(\mathbf{x}) t_m(\mathbf{x}) dS_x.$$

と定義される。ただし、 $\text{supp}.f$ は関数 f の台を表す。式 (15)

より、一般に $\eta_n^j \neq \tilde{\eta}_n^j$ であり、したがって

$$(\mathcal{S}^j \zeta)(\mathbf{x}) \neq \sum_{n=1}^{N_h} \tilde{\eta}_n^j t_n(\mathbf{x})$$

となる。以上をまとめると

$$\begin{aligned} \sum_{m=1}^{N_h} D_{nm}^j \sum_{l=1}^{N_h} S_{ml}^j \zeta_l &= \sum_{m=1}^{N_h} D_{nm}^j \tilde{\eta}_m^j \\ &\approx \int_{\partial D_j} t_n(\mathbf{x}) (\mathcal{D}^j \mathcal{S}^j \zeta)(\mathbf{x}) dS_x. \end{aligned}$$

が得られる。この式は、行列 $D^j S^j$ が積分作用素 $\mathcal{D}^j \mathcal{S}^j$ を近似しないことを表している。この事実は他の作用素 $\mathcal{D}^j, \mathcal{D}^{*j}, \mathcal{N}^j$ の積についても同様に成り立つ。したがって離散化手法として Galerkin 法を用いた場合、式 (13) に形式的に行列を代入することで前処理を行うことはできない。

しかし、式 (15) の辺々、 j について和を取ると

$$S\zeta \approx T\eta$$

となる。ここに、 ζ, η はそれぞれ $\zeta_n, \sum_j \eta_n^j$ を第 n 要素を持つベクトル、 T は T_{nm} を (n, m) 成分を持つ行列である。行列 T は正則なので、逆行列を左から両辺にかけることで

$$\eta \approx T^{-1} S\zeta$$

となり、したがって

$$\begin{aligned} D^j T^{-1} S^j \zeta &= D^j \eta \\ &\approx \int_{\partial D_j} t_n(\mathbf{x}) (\mathcal{D}^j \mathcal{S}^j \zeta)(\mathbf{x}) dS_x \quad (16) \end{aligned}$$

となる。式 (9)、(13)、(16) より、係数行列 A は $T^{-1} A T^{-1} A \approx I + K'$ を満たす。ここに K' はコンパクト作用素を離散化して得られる行列である。さらに両辺に左から T 右から T^{-1} を乗じ、 $K = T K' T^{-1}$ とおくと

$$A T^{-1} A T^{-1} \approx I + K$$

となる。

したがって、Galerkin 法を離散化手法に用いた際には、方程式と未知数を適当に並び替えた上で、前処理行列として $T A^{-1} T$ を用いることで、Calderon の式に基づく前処理を行うことができる。さらに今、 $A T^{-1}$ の 2 乗が $I + K$ となることから、前処理行列として $T A^{-1} T$ を用いる代わりに、 T を用いる方が収束がより速くなることが分かる。この事実は第 3.2 節で述べた事実と同じ理由による。

3.4. 行列 T の計算

行列 T は対称、疎行列であるので、任意のベクトルとの積を $O(N_h)$ 程度の計算時間で計算することができる。したがって T の逆行列は反復解法によって高速に求めることができる。そこで式 (9) を解くための反復法として、FGMRES⁽²⁾ を用いる。FGMRES では、反復毎に異なる前処理行列を用いることができるため、 T^{-1} を反復解法を用いて計算することができる。

4. 数値計算結果

本研究では、以下の 6 種類の解法について数値計算を行い、反復解法の反復回数と計算時間の比較を行った。

approach 1 式 (9) を右前処理行列 T を用いた FGMRES で解く解法

approach 2 式 (9) を右前処理行列 $T A^{-1} T$ を用いた FGMRES で解く解法

approach 3 式 (9) を右前処理行列として高速多重極法の直接計算部分⁽¹⁾ を用いた FGMRES で解く解法

approach 4 式 (9) を前処理無しの GMRES で解く解法

以上の 4 種類の解法に加え、未知数と方程式を並び替えることの影響を見るために、以下に示す式 (9) と同値な方程式の解も求めた:

$$A_{\text{con}} \mathbf{x}_{\text{con}} = \mathbf{b}_{\text{con}} \quad (17)$$

ここに

$$A_{\text{con}} = \begin{pmatrix} S & -D \\ -D^* & N \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x}_{\text{con}} = \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{u} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_{\text{con}} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}^I \\ -\frac{1}{\varepsilon_1} \mathbf{q}^I \end{pmatrix}$$

である。この並び方は選点法において Antoine and Boubendir⁽⁵⁾ が用いたものと一致している。この方程式を用いた解法として

approach 5 式 (17) を右前処理行列高速多重極法の直接計算部分を用いた FGMRES で解く解法

approach 6 式 (17) を前処理無しの GMRES で解く解法の 2 解法を加え、以上 6 種類の解法に関して反復回数と計算時間の比較を行った。

式 (17) においても前処理行列として

$$T \begin{pmatrix} -N & -D^* \\ -D & -S \end{pmatrix}^{-1} T$$

を用いることで、Calderon の式に基づく前処理を行うことができるが、これは式 (9) に対して前処理行列 $TA^{-1}T$ を用いた Calderon の式に基づく前処理 (approach 2) と同値であるため行わなかった。

外側反復は全てリスタート無しの FGMRES または GMRES であり、許容誤差は 10^{-4} である。Calderon の式に基づく前処理における T^{-1} の計算には、許容誤差 10^{-15} 、最大反復回数 10 回の GMRES を用いた。これらの値は T^{-1} をできるだけ精度よく計算するために設定した。実際、 T^{-1} を反復法で計算すると、10 回の反復で十分残差が小さくなることわかる。一方、多重極法の直接計算部分を用いた前処理では、許容誤差 10^{-3} 、最大反復回数 10 回の GMRES を内側反復に用いた。これは多重極法の直接計算部分を用いる前処理では、スケールリングを行うことが目的であるので、逆行列を荒く計算すれば十分なためである。

4.1. 精度の確認

まず解析解が求められる問題を数値的に解くことで、数値解法の精度を確認した。Fig. 2 に表される周期領域を考える。単位領域 D は x_1 方向に並んだ球を 2 つ含み、2 つの球の中心間距離は 0.5、半径は共に 0.2 である。また、周期は $L = 1$ である。球の外側の領域を D_1 、球の内側の領域を D_2 とする。離散化の際の三角形要素の数は 316840 である。

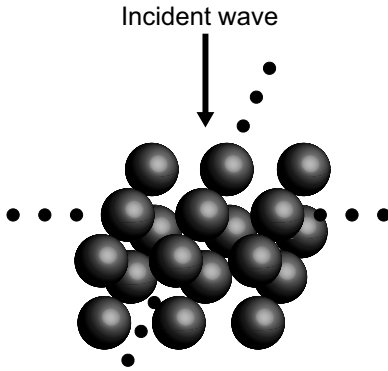


Fig. 2 The model of spheres of two layers.

$\varepsilon_j = 1, k_j = k (j = 1, 2)$ とすると、解は入射波に一致する。これを用いて数値解の精度を確認した。入射波は平面波とし、 $k = 6.0, \beta_2 = 1.0, \beta_3 = 0$ とした。

Table 1 は誤差

$$u_{\text{err}} = \frac{\int_{\Gamma} |u_{\text{cal}} - u_{\text{ana}}| dS}{\int_{\Gamma} |u_{\text{ana}}| dS}$$

$$q_{\text{err}} = \frac{\int_{\Gamma} |q_{\text{cal}} - q_{\text{ana}}| dS}{\int_{\Gamma} |q_{\text{ana}}| dS}$$

の値を前処理別に表にしたものである。ただし、 $u_{\text{cal}}, q_{\text{cal}}$ はそれぞれ $u, \frac{\partial u}{\partial n}$ の数値解、 $u_{\text{ana}}, q_{\text{ana}}$ はそれぞれ $u, \frac{\partial u}{\partial n}$ の解析解の値である。

Table 1 より、解法によらずある程度の精度が得られていることがわかる。

Table 1 Relative error.

	u_{err}	q_{err}
approach 1	5.50×10^{-5}	7.26×10^{-3}
approach 2	5.73×10^{-5}	7.06×10^{-3}
approach 3	5.74×10^{-5}	8.21×10^{-3}
approach 4	5.74×10^{-5}	7.20×10^{-3}
approach 5	6.51×10^{-5}	1.16×10^{-2}
approach 6	7.11×10^{-5}	1.27×10^{-2}

4.2. 計算時間

前小節と同様に、Fig. 2 の領域において平面波を入射する問題を考える。 $k_1 = 6, \varepsilon_1 = 1, k_2 = 6\sqrt{\varepsilon_2}$ とし、様々な値の ε_2 に対して数値解析を行い、反復解法の反復回数と計算時間を解法別にまとめたグラフがそれぞれ、Fig. 3、Fig. 4 である。

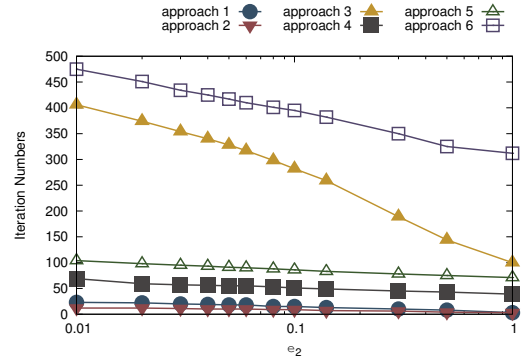


Fig. 3 Number of iterations of GMRES and FGMRES for the model of spheres.

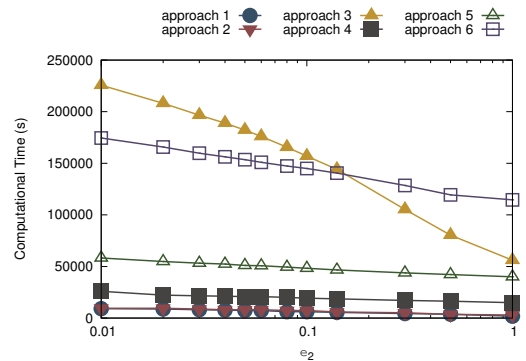


Fig. 4 Computational time for the model of spheres.

まず直接計算部分を用いた前処理については、係数行列が A_{con} の解法 (approach 5) が A の場合 (approach 3) よりも収束が速いことがわかる。これは直接計算部分を用いた前処理がブロック対角行列を用いたスケールリングであるこ

とに起因しており、対角項の値が大きい S, N を対角部分に並べた A_{con} を係数行列に用いた方がスケーリングの効果が大きいためと考えられる。逆に、 A の対角部分に対応する D, D^* の対角成分の値は非常に小さく、収束が遅くなっている。一方、前処理無しの 2 解法を比べると、係数行列が A の解法 (approach 4) の方が A_{con} を用いた解法 (approach 6) と比べ、収束が速い。これはメッシュが一様なとき、approach 4 が Calderon の式に基づく前処理を用いた解法 (approach 1) と非常に近いと考えられる。実際、approach 4 に T を前処理行列として用いるだけで、approach 1 と全く同じ解法となる。また、Calderon の式に基づく前処理を用いた 2 解法 (approach 1、2) は、どちらの方法も直接計算部分を用いた前処理や前処理無しより計算時間が短いことがわかる。

Calderon の式に基づく前処理を用いた 2 解法を比較するため、同じグラフをこの 2 解法のみに対してプロットしたものが Fig. 5、Fig. 6 である。これより理論通り⁽⁶⁾ あらゆる ε_2 の値において、前処理行列として T を使う解法 (approach 1) の計算時間が $TA^{-1}T$ を使う解法 (approach 2) の計算時間よりも短いことがわかる。

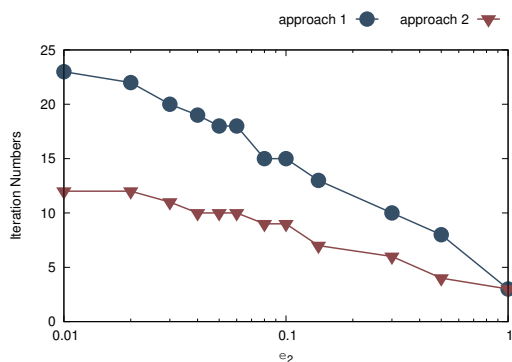


Fig. 5 Number of iterations of GMRES and FGMRES for the model of spheres.

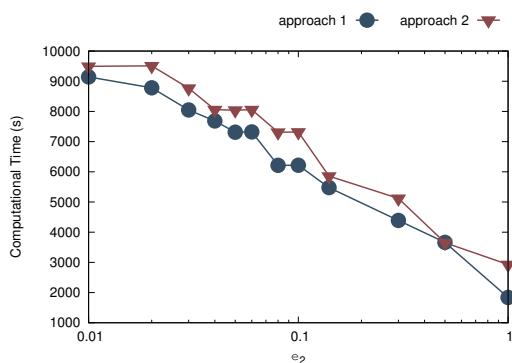


Fig. 6 Computational time for the model of spheres.

5. 結論

高速多重極法の直接計算部分を前処理行列に用いる方法 (approach 3、5) と比べ、Calderon の式に基づく前処理 (ap-

proach 1、2) は、収束速度を著しく改善することが分かった。また離散化手法として Galerkin 法を用いた場合、選点法を用いた場合の様に係数行列を並び替えるだけでは、前処理の効果が期待できない。しかし、離散化に用いた基底から得られる行列を前処理行列として用いるだけ (approach 1) で、従来の前処理行列を用いる Calderon の式に基づく前処理 (approach 2) よりも少ない反復回数で収束することがわかった。この前処理行列の逆行列は反復法を用いることで高速に計算することができる。また、本論文で提案する前処理手法は実装の面でも従来法より簡便である。

今後の課題として、より応用に即した複雑な領域形状を持つ問題において、提案する手法の効果を検討することが挙げられる。また、本手法の他の方程式への応用も重要な課題の 1 つである。

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) Y. Saad. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, USA, 2003.
- (3) O. Steinbach and WL Wendland. The construction of some efficient preconditioners in the boundary element method. *Advances in Computational Mathematics*, Vol. 9, No. 1, pp. 191–216, 1998.
- (4) S.H. Christiansen and J.C. Nédélec. Des préconditionneurs pour la résolution numérique des équations intégrales de frontière de l'acoustique. *Comptes Rendus de l'Academie des Sciences–Série I-Mathématique*, Vol. 330, No. 7, pp. 617–622, 2000.
- (5) X. Antoine and Y. Boubendir. An integral preconditioner for solving the two-dimensional scattering transmission problem using integral equations. *International Journal of Computer Mathematics*, Vol. 85, No. 10, pp. 1473–1490, 2008.
- (6) 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.
- (7) Y. Otani and N. Nishimura. An FMM for periodic boundary value problems for cracks for Helmholtz equation in 2D. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 73, No. 3, p. 381, 2008.