

\mathcal{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

A FAST DIRECT SOLVER OF PERIODIC BOUNDARY VALUE PROBLEMS FOR HELMHOLTZ' EQUATION IN 2D BASED ON THE \mathcal{H} MATRIX ARITHMETICS

松本 安弘¹⁾, 新納 和樹²⁾, 西村 直志³⁾

Yasuo MATSUMOTO, KAZUKI NIINO and Naoshi NISHIMURA

- 1) 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)
2) 京都大学 情報学研究科 助教 (〒605-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: niino@acs.i.kyoto-u.ac.jp)
3) 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)

We present a fast direct solver for singly periodic problems for Helmholtz' equation in 2D. The proposed approach decomposes the periodic Green's function into two sums, one converging rapidly in the real space and another converging rapidly in the wavenumber space with the help of Kummer's transformation and/or its modified version. The layer potentials are also decomposed into two parts accordingly. The two matrices obtained this way allow \mathcal{H} matrix representations in a natural manner and their sum and the LU decomposition of this sum can be computed using the \mathcal{H} matrix arithmetics, thus enabling one to formulate a fast direct solver. The effectiveness of the proposed method is demonstrated with some numerical examples including eigenvalue problems solved with the SS method.

Key Words: boundary integral methods, fast direct solver, Kummer's transformation, periodic boundary value problems

1. 序論

近年, 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有する光学材料に関心が集まっており, 周期的な構造に対する波動散乱問題を解くことの需要が増大している. 周期波動散乱問題としては, 境界積分方程式法と周期多重極法とを組み合わせて得られる線形方程式のソルバに反復解法を用いる手法が知られている⁽¹⁾. この手法を用いる場合, 反復解法の反復回数に比例して計算時間が増加するので, 係数行列の前処理を行い, 反復回数の低減を図るのが普通である. 特に, 波動散乱問題を境界積分方程式を用いて解く場合には, Calderon 前処理に代表される適切な前処理を施すことでその反復回数を極めて少なくできることが報告されている⁽²⁾. しかし, このような有効な前処理法が確立されていない問題を反復解法で解く場合, 反復回数が非常に大きくなり, 膨大な計算時間がかかることが予想される. 例えば, Maxwell 方程式の transmission 問題を Müller の定式化で解くときがそのような例であり, 実際, 解の一意性が保証されているにも

関わらず, 使用する定数の値によっては極端に収束が遅くなることが知られている⁽³⁾. また, 同一の係数行列に対して多くの右辺が存在するような問題を解く場合, それぞれの右辺に対し反復解法を繰り返すこととなり, 単一の右辺に対して問題を解く場合に比べて多くの計算時間がかかることが予想される.

これらの反復解法の欠点は, 高速直接解法により克服できるものと考えられる. 実際, 高速直接解法では反復解法を用いずに離散化線形方程式を解くため, 係数行列の反復解法に対する収束特性が悪い場合でも有効であるものと思われる. また高速直接解法ではその計算の大部分を右辺に依存しない形で行うため, 右辺が多く存在するような問題に非常に有効であると考えられる.

周期波動散乱問題に対する高速直接解法はすでにいくつかの研究グループにより提案されている^(4, 5). これらの方法は Martinsson and Rokhlin⁽⁶⁾により提案された高速多重極法を応用した直接解法の流れを汲んでいる. 本研究では高速直接解法のもう一つの流れである \mathcal{H} 行列^(7, 8, 9)の LU 分解

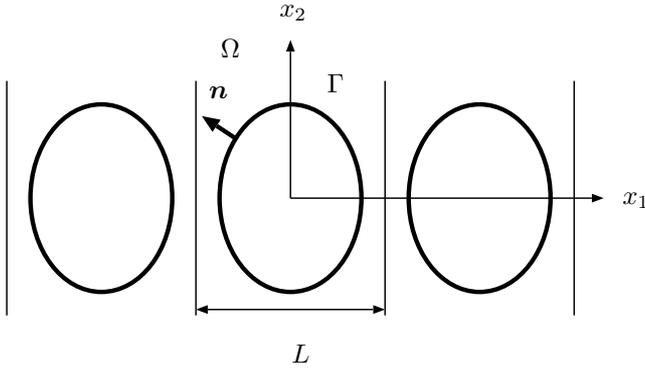


Fig. 1 x_1 -periodic domain

を用いた方法を提案する. \mathcal{H} 行列の LU 分解は Martinsson and Rokhlin⁽⁶⁾ による手法に比べ, 問題の種類を問わず使うことができる利点がある. なお, わが国でも \mathcal{H} 行列の LU 分解を用いて Helmholtz 方程式の通常の散乱問題を解いた例がある⁽¹⁰⁾.

本研究では収束の遅い周期 Green 関数を計算するために Kummer 変換⁽¹¹⁾ を用いる. このとき, 周期 Green 関数の積分は 2 つの部分に分けることができ, それぞれの離散版が別の方法で容易に低ランク近似できることを示す.

提案する \mathcal{H} 行列の LU 分解と Kummer 変換を組み合わせた高速直接解法の数値的検証として, まず解析的に解が得られる問題を解くことで提案手法の妥当性を確認する. さらに, 高速直接解法は, 反復法では収束の悪い問題でも高速に解を得ることができることを示す. 最後に多数の右辺を扱う問題の例として, ブロック SS 法への適用例を示し, 提案手法の有効性を確認する.

2. 定式化

本節では 2 次元 Helmholtz 方程式の 1 周期境界値問題とその周期 Green 関数の計算方法, また対応する積分方程式とその離散化, 及び高速直接解法について述べる.

2.1. 支配方程式

Fig. 1 のように x_1 方向に周期性を持つ 2 次元の無限領域を考え, x_1 方向の周期長さを L とする. 周期単位は滑らかな境界 Γ と, その外部 Ω から成る. Γ 上の外向き (Ω 方向に向いた) 単位法線ベクトルを \mathbf{n} とする. このとき, 領域 Ω において Helmholtz 方程式

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

を満たす解 u を, Γ 上の適当な境界条件と周期境界条件

$$u(L/2, x_2) = e^{i\beta} u(-L/2, x_2), \quad (1)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x_1}(L/2, x_2) = e^{i\beta} \frac{\partial u}{\partial x_1}(-L/2, x_2) \quad x_2 \in \mathbb{R} \quad (2)$$

及び, Ω における散乱波 $u^s = u - u^I$ に対する放射条件のもとで求める問題を考える. ここに, $k = \omega\sqrt{\varepsilon\mu}$ は波数, ω は周波数, ε, μ はそれぞれ Ω での誘電率, 透磁率 (定数) である. $u^I = e^{ik\hat{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{x}}$ は入射波である (平面波とする). ここに $\hat{\mathbf{k}}$

は単位ベクトルである. 式 (1) に現れる β は位相差であり, $\beta = k\hat{\mathbf{k}}_1 L$ と表される. 以下では簡単のため, 周期単位長さ $L = 1$ とし, また透磁率は全領域で $\mu = 1$ であるとする.

2.2. 積分方程式

前節で定義した問題の解は

$$u(\mathbf{x}) = u^I(\mathbf{x}) + \mathcal{D}u(\mathbf{x}) - \varepsilon \mathcal{S}q(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in \Omega$$

と書ける. ここに $\mathcal{S}q$ は Ω の周期 Green 関数 G^p を核とする一重層ポテンシャル, $\mathcal{D}u$ は同じく二重層ポテンシャルであり, $q = 1/\varepsilon \partial u / \partial n$ である. これより $\mathbf{x} \in \Gamma$ において, Burton-Miller の積分方程式

$$\begin{aligned} u^I(\mathbf{x}) + \alpha q^I(\mathbf{x}) \\ = \left(\frac{1}{2} - \mathcal{D} - \frac{\alpha}{\varepsilon} \mathcal{N} \right) u(\mathbf{x}) + \left(\varepsilon \mathcal{S} + \frac{\alpha}{2} + \alpha \mathcal{D}^* \right) q(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (3)$$

が得られる. ここに $\mathcal{D}^*, \mathcal{N}$ はそれぞれ \mathcal{S}, \mathcal{D} の法線微分であり, Γ での特異積分は有限部分の意味である. また, α は虚部がゼロでない定数である

2.3. 層ポテンシャルの \mathcal{H} 行列表現

周期 Green 関数の計算は必ずしも容易ではなく, 種々の算法が提案されている. 本節ではそれらのうち Kummer 変換, ないしはその修正版を用いて, 周期 Green 関数を核とする層ポテンシャルの \mathcal{H} 行列表現を得る方法について論ずる.

2.3.1. Kummer 変換

Kummer 変換⁽¹¹⁾ は, 周期 Green 関数 G^p を収束の速い 2 つの級数 G_1^p, G_2^p の和に変形することで計算を加速するものである. G_1^p, G_2^p はそれぞれ次の形である.

$$\begin{aligned} G_1^p(\mathbf{x}) &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} K_0(k|\mathbf{x} - m\mathbf{e}_1|) e^{i\beta m} \\ G_2^p(\mathbf{x}) &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left(\frac{e^{-\sqrt{\xi_m^2 - k^2}|x_2|}}{2\sqrt{\xi_m^2 - k^2}} - \frac{e^{-\sqrt{\xi_m^2 + k^2}|x_2|}}{2\sqrt{\xi_m^2 + k^2}} \right) e^{i\xi_m x_1} \end{aligned} \quad (4)$$

ここに $\xi_m = \beta + 2m\pi$, K_0 は 0 次の第 2 種の変形ベッセル関数である. K_0 は遠方で指数関数的に減少するので, G_1^p の級数の収束は速い. 一方, G_2^p の項は $O(m^{-3})$ の速さで減衰するので, 収束は十分速い.

2.3.2. 修正された Kummer 変換

積分方程式 (3) は, 周期 Green 関数の 2 回法線微分を含んでいる. このため, $|x_2 - y_2| = 0$ における G_2^p の 2 回微分の遠方で減少オーダーは G_2^p のそれよりさらに悪化して $O(m^{-1})$ となり, 級数が絶対収束しなくなる. この問題は G_1^p, G_2^p をそれぞれ次の形に修正し, 収束性を改善することで回避できる.

$$\begin{aligned} G_1^p(\mathbf{x} - \mathbf{y}) &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left(\frac{5}{6\pi} K_0(k|\mathbf{x} - \mathbf{y} - m\mathbf{e}_1|) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{3\pi} K_0(2k|\mathbf{x} - \mathbf{y} - m\mathbf{e}_1|) \right) e^{i\beta m} \end{aligned} \quad (6)$$

$$G_2^p(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{2} \frac{e^{-\sqrt{\xi_m^2 - k^2}|x_2 - y_2|}}{\sqrt{\xi_m^2 - k^2}} - \frac{5}{6} \frac{e^{-\sqrt{\xi_m^2 + k^2}|x_2 - y_2|}}{\sqrt{\xi_m^2 + k^2}} + \frac{1}{3} \frac{e^{-\sqrt{\xi_m^2 + 4k^2}|x_2 - y_2|}}{\sqrt{\xi_m^2 + 4k^2}} \right) e^{i\xi_m(x_1 - y_1)} \quad (7)$$

この修正により、 $|x_2 - y_2| = 0$ のときの G_2^p の 2 回微分の減少オーダーは $O(m^{-3})$ まで改善される。式 (6), (7) を合わせて修正された Kummer 変換と呼ぶことにする。

2.3.3. cluster tree と admissibility 条件

本論文では次のようにして境界要素の cluster tree を作る。まず、全要素の集合をレベル 0 の cluster X_0 と呼ぶ。あるレベル l の cluster X について、それを含む軸平行な面積最小の箱形領域 $Q_X \subseteq \mathbb{R}^2$ を取る。 Q_X を X の bounding box と呼ぶ。 Q_X の長い方の辺を 2 等分して 2 つの軸平行な箱形領域を得、全境界要素を要素の中心がいずれの箱に含まれるかで 2 つのレベル $l+1$ の cluster に分ける。 X_0 から出発して、以下これを繰り返すことにより、境界要素の cluster の 2 分木構造を得る。

2.3.4. 層ポテンシャル

次に、積分方程式 (3) に現れる各ポテンシャル関数に Kummer 変換を用いた場合の離散化の低ランク近似について考える。今、導入した cluster tree の同レベルに属する 2 つの cluster X, Y について、1 重層ポテンシャルの取扱いを考える。 cluster X (Y) に含まれる代表点 \mathbf{x}^i (\mathbf{y}^j) に対して離散化された 1 重層ポテンシャル S^{ij} を

$$S^{ij} = \int_Y G_1^p(\mathbf{x}^i - \mathbf{y}) \phi_j(\mathbf{y}) dS_{\mathbf{y}} + \int_Y G_2^p(\mathbf{x}^i - \mathbf{y}) \phi_j(\mathbf{y}) dS_{\mathbf{y}} \\ = (S^{ij})_{G_1} + (S^{ij})_{G_2}$$

と書く。ここに、 $(S^{ij})_{G_1}, (S^{ij})_{G_2}$ は

$$(S^{ij})_{G_1} = \int_Y G_1^p(\mathbf{x}^i - \mathbf{y}) \phi_j(\mathbf{y}) dS_{\mathbf{y}} \\ (S^{ij})_{G_2} = \int_Y G_2^p(\mathbf{x}^i - \mathbf{y}) \phi_j(\mathbf{y}) dS_{\mathbf{y}} \quad (8)$$

であり、 ϕ_j は \mathbf{y}^j に付随する基底関数である。式 (8) は、 $\mathbf{y} = (y_1, y_2)$ として、 $x_2 > y_2$ ($\forall \mathbf{y} \in Y$) または $x_2 < y_2$ ($\forall \mathbf{y} \in Y$) が成り立つとき

$$\int_Y G_2^p(\mathbf{x}^i - \mathbf{y}) \phi_j(\mathbf{y}) dS_{\mathbf{y}} \\ \approx \sum_{m=-M}^M \left(p_m^1(\mathbf{x}^i) q_m^1(\mathbf{y}^j) - p_m^2(\mathbf{x}^i) q_m^2(\mathbf{y}^j) \right) \quad (9)$$

となる。ここに、 $p_m^1(\mathbf{x}^i), q_m^1(\mathbf{y}^j), p_m^2(\mathbf{x}^i), q_m^2(\mathbf{y}^j)$ はそれぞれ次の形となる。ただし、複号は $x_2^i - y_2 \geq 0$ の順とする。

$$p_m^1(\mathbf{x}^i) = \frac{e^{\mp\sqrt{\xi_m^2 - k^2}x_2^i + i\xi_m x_1^i}}{2\sqrt{\xi_m^2 - k^2}} \quad (10)$$

$$q_m^1(\mathbf{y}^j) = \int_Y e^{\pm\sqrt{\xi_m^2 - k^2}y_2 - i\xi_m y_1} \phi_j(\mathbf{y}) dS_{\mathbf{y}} \quad (11)$$

$$p_m^2(\mathbf{x}^i) = \frac{e^{\mp\sqrt{\xi_m^2 + k^2}x_2^i + i\xi_m x_1^i}}{2\sqrt{\xi_m^2 + k^2}} \quad (12)$$

$$q_m^2(\mathbf{y}^j) = \int_Y e^{\pm\sqrt{\xi_m^2 + k^2}y_2 - i\xi_m y_1} \phi_j(\mathbf{y}) dS_{\mathbf{y}} \quad (13)$$

また、 M は打ち切り項数であり、Kummer 変換を用いているので比較的小さい数とすることができる。式 (11), (13) に適当な数値積分公式を用いると、(9) は cluster X, Y に対する離散化された 1 重層ポテンシャルの低ランク近似を与えることになる。さらに、 $x_2 > y_2$ ($\forall \mathbf{y} \in Y$) も $x_2 < y_2$ ($\forall \mathbf{y} \in Y$) も成り立たない場合は例えば ACA を使うことによって $(S^{ij})_{G_2}$ を低ランク近似することができる。この際、 m が大きいときに、Kummer 変換の式は桁落ちする恐れがあるので、注意しなければならない。一方 $(S^{ij})_{G_1}$ についてはもとより核関数が振動しないので、ACA 等により容易に低ランク近似することができる。

2.3.5. admissibility 条件

非周期問題では、通常、二つの cluster X, Y の bounding box が $Q_X = [a_1, b_1] \times [a_2, b_2], Q_Y = [c_1, d_1] \times [c_2, d_2]$ であるとき、 X と Y が

$$\max(\text{diam}(Q_X), \text{diam}(Q_Y)) < \eta \text{dist}(Q_X, Q_Y) \quad (14)$$

を満たす場合に admissible と呼ばれる。ここに η は定数、 $\text{diam}(Q_X)$ ならびに $\text{dist}(Q_X, Q_Y)$ はそれぞれ

$$\text{diam}(Q_X) = \sqrt{\sum_{d=1}^2 (\text{diam}_d(Q_X))^2} \\ \text{dist}(Q_X, Q_Y) = \sqrt{\sum_{d=1}^2 (\text{dist}_d(Q_X, Q_Y))^2} \\ \text{diam}_d(Q_X) = (b_d - a_d) \\ \text{dist}_d(Q_X, Q_Y) = \text{dist}([a_d, b_d], [c_d, d_d])$$

である。また、 $\text{diam}_d(Q_X), \text{dist}_d(Q_X, Q_Y)$ はそれぞれ x_1, x_2 方向の cluster 直径、cluster 距離と呼ばれる。二つの cluster X と Y が admissible であるとき、これらの cluster 間の層ポテンシャルに低ランク近似を用いる。

本論文では、周期問題の特殊性を考慮して、次の 2 つの admissible 条件式 (14) を導入する：

admissibility 条件 1

$$\max(\text{diam}(Q_X), \text{diam}(Q_Y)) < \eta_1 \text{dist}^p(Q_X, Q_Y) \quad (15)$$

ここに、 $\text{dist}^p(Q_X, Q_Y)$ は

$$\text{dist}^p(Q_X, Q_Y) = \left(\min_{m=-1,0,1} (\text{dist}([a_1, b_1], [c_1 + m, d_1 + m]))^2 + (\text{dist}_2(Q_X, Q_Y))^2 \right)^{1/2}$$

で定義される。

admissibility 条件 2

$$\max(\text{diam}_2(Q_X), \text{diam}_2(Q_Y)) < \eta_2 \text{dist}_2(Q_X, Q_Y) \quad (16)$$

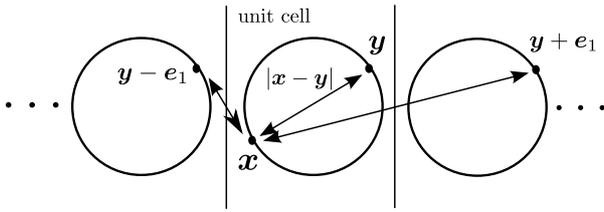


Fig. 2 Shortest $|x - y|$ as one considers replica cells

式 (15) の根拠は以下の通りである．周期 Green 関数の計算において G_1 の評価では Fig. 2 のように unit cell のレプリカ cell が周期方向に無限に並んでいると考えることができる．そのためある 2 つの点 x, y が unit cell の中で空間的に離れている場合でも，1 周期分だけ移動した両隣の cell の中にある $y \pm e_1$ と x との空間距離が離れているとは限らない．これを考慮し，cluster Y の bounding box を 1 周期分だけ動かして 3 つの距離をとり，そのうち最も小さい距離を採用したものが式 (15) である．

なお，以下の数値計算では $\eta_1 = 2$ を標準とした． η_2 は大きな値を用いてよく，ここでは 10^6 とした．

S^{ij} の \mathcal{H} 行列近似を求める際，2 つの方法が考えられる．まず，要素の cluster tree を導入し， $(S^{ij})_{G_1}$ に対しては admissibility 条件 1 と ACA を用いて \mathcal{H} 行列とする．次に $(S^{ij})_{G_2}$ に対しては admissibility 条件 2 と (9) (ないしはその修正 Kummer 版) を用いて \mathcal{H} 行列とする．これらの \mathcal{H} 行列の和を \mathcal{H} 行列四則演算を用いて評価することによって係数行列の \mathcal{H} 行列表現が得られる．これを以下では approach 1 と呼ぶ．

一方，こういった行列の構造を考慮せず，初めから係数行列に admissibility 条件 1 と ACA を用いることによっても係数行列の \mathcal{H} 行列表現を得ることができる．これを以下では approach 2 と呼ぶ．

2.4. 高速直接解法

一旦係数行列を \mathcal{H} 行列として表現すると，これを用いた行列ベクトル積の高速計算法と線形方程式の反復解法を組み合わせると高速解法が得られることはもちろん， \mathcal{H} 行列の四則演算を用いて LU 分解等の直接解法を高速に実行することも可能である．詳細は Bebendorf⁽⁷⁾ を参照されたい．

3. 数値計算結果

本節ではいくつかの周期波動散乱問題について，前節で示した高速直接解法 (approach 1, approach 2) を適用して得られた数値計算結果を示す．

3.1. 妥当性の検証—単一の円形散乱体

本節では提案手法の妥当性を検証するために単一の円形散乱体を考える．使用したパラメータは以下のとおり．周期長 $L = 1$ ，円の半径は 0.45，波数 $k = 10$ ， $\varepsilon = 1$ ，入射波の進行方向 $\hat{\mathbf{k}} = (\sin 1, -\cos 1)$ (角度の単位は radian)，境界条件は $u = u^I$ ，Burton-Miller の係数 $\alpha = i/k$ である．数値計算によって求めた境界での $\partial u / \partial n$ を解析解 ($\partial u^I / \partial n$) と比較した．

分割数が 1000 のとき，approach 1 (approach 2) の L_2

相対誤差は $7.191\text{E-}04$ ($7.190\text{E-}04$)，同じく 128000 のときは $3.303\text{E-}05$ ($1.533\text{E-}04$) であった．これより計算は妥当に行われているものと判断される．

次に未知数の数に対して全計算時間を plot した結果を Fig. 3 に示す．図より，計算時間が未知数の数 N の 1 乗よりやや大きい程度のベキに比例していることと，approach 1 の方が approach 2 より若干高速であることが分かる．

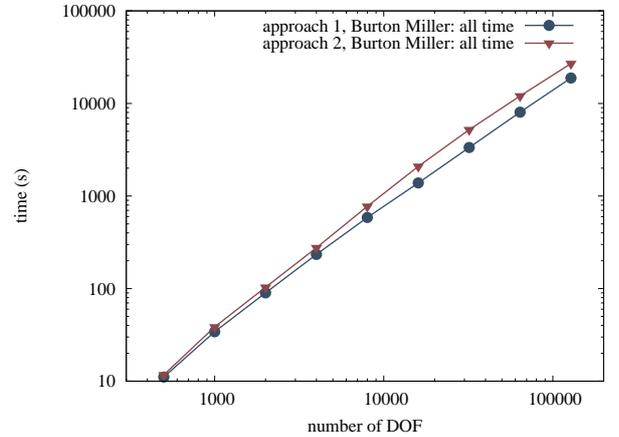


Fig. 3 Computational time vs DOF

3.2. transmission 問題の場合

提案する方法は transmission 問題の場合にも適用可能である．まず，問題を定義する．Fig. 1 において Γ の外側を $\Omega = \Omega_1$ とし， Γ の内側を Ω_2 とすると，

$$\Delta u + k_1^2 u = 0, \quad \text{in } \Omega_1$$

$$\Delta u + k_2^2 u = 0, \quad \text{in } \Omega_2$$

を満たす解 u を，境界条件

$$u_1 = u_2 (= u), \quad \text{on } \Gamma$$

$$\frac{1}{\varepsilon_1} \frac{\partial u_1}{\partial n} = \frac{1}{\varepsilon_2} \frac{\partial u_2}{\partial n} (= q), \quad \text{on } \Gamma$$

および周期境界条件と Ω_1 における散乱波の放射条件の下で求める問題を考える．ここに u の添字 1,2 は $\Omega_{1,2}$ から Γ への極限を表す．

この問題の積分方程式は種々提案されている．このうち，PMCHWT 定式化は次式で与えられる．

$$-(\mathcal{D}_1 u + \mathcal{D}_2 u)(\mathbf{x}) + (\varepsilon_1 \mathcal{S}_1 q + \varepsilon_2 \mathcal{S}_2 q)(\mathbf{x}) = u^I(\mathbf{x}) \quad (17)$$

$$\left(\frac{1}{\varepsilon_1} \mathcal{N}_1 u + \frac{1}{\varepsilon_2} \mathcal{N}_2 u \right)(\mathbf{x}) - (\mathcal{D}_1^* q + \mathcal{D}_2^* q)(\mathbf{x}) = -\frac{1}{\varepsilon_1} \frac{\partial u^I}{\partial n}(\mathbf{x}) \quad (18)$$

ここに， $\mathcal{S}_{1,2}$ 等はそれぞれ $\Omega_{1,2}$ に対する層ポテンシャルであり， \mathcal{S}_2 等は核関数として Ω_2 の基本解 (周期 Green 関数ではない) を用いる．一方，Müller の積分方程式は次式で与え

られる:

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{1}{\varepsilon_1} \left(\mathcal{D}_1 - \frac{\mathcal{I}}{2} \right) u + \frac{1}{\varepsilon_2} \left(\mathcal{D}_2 + \frac{\mathcal{I}}{2} \right) u \right) (\mathbf{x}) + (\mathcal{S}_1 q - \mathcal{S}_2 q) (\mathbf{x}) \\ &= \frac{u^I}{\varepsilon_1} \end{aligned} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} & (-\mathcal{N}_1 u + \mathcal{N}_2 u) (\mathbf{x}) + \left(\varepsilon_1 \left(\mathcal{D}_1^* + \frac{\mathcal{I}}{2} \right) q - \varepsilon_2 \left(\mathcal{D}_2^* - \frac{\mathcal{I}}{2} \right) q \right) (\mathbf{x}) \\ &= \frac{\partial u^I}{\partial n} (\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (20)$$

ここに、 \mathcal{I} は恒等作用素である。

これらの定式化に approach 1 を適用する場合、例えば Müller の定式化においては \mathcal{S} の分解には $(\mathcal{S}_1)_{G_1} - \mathcal{S}_2$ の離散版を $(S^{ij})_{G_1}$ の代わりに用い、 $(\mathcal{S}_1)_{G_2}$ の離散版を $(S^{ij})_{G_2}$ の代わりに用いる。PMCHWT の場合も同様である。この方法は、特に散乱体が多数ある問題では有効に機能するものと考えられる。

最初に単一の散乱体を考える。入射波と散乱体の形状は Fig. 3 の場合と同じで、 $\varepsilon_1 = 3$, $\varepsilon_2 = 1$ とした。Fig. 4 は全計算時間を未知数の数に対して plot したものであり、こ

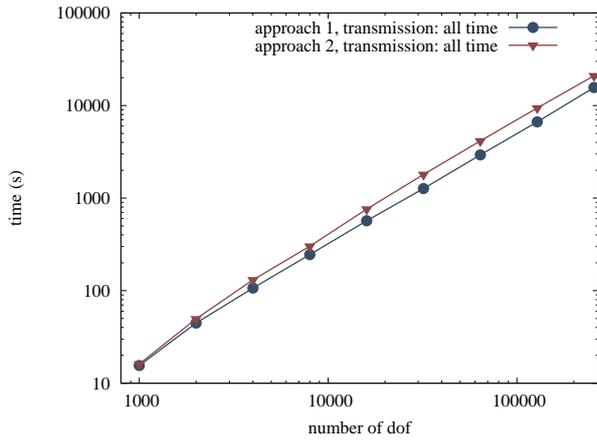


Fig. 4 Single scatterer. Computational time vs DOF

の場合も計算時間は Fig. 3 の場合とほぼ同程度であること、及び approach 1 が approach 2 より若干高速であることが分かる。

次に同じ散乱体を x_2 方向に中心間隔 1 で 10 個並べた場合の計算時間を全未知数の数 N に対して plot した結果を Fig. 5 に示した。同図も Fig. 4 とほぼ同じ傾向を示している。

3.2.1. 反復解法の収束が遅い係数行列に対する計算時間

高速直接解法の利点として、反復法では収束の遅い問題でも高速に解けることが考えられる。このことを検証するために、反復解法の収束が遅い係数行列に対し、approach 2 による高速直接解法と point-Jacobi 法で前処理を施した反復解法 (GMRES) とで離散化線形方程式を解き、かかった計算時間を比較した。高速直接解法として approach 2 を用いたのは、approach 1, 2 の計算時間に大差がないことと、approach 1 より 2 の方が遅い傾向があるので、遅い方でも反復法より高速計算が可能かどうか調べるためである。積分方程式は、次

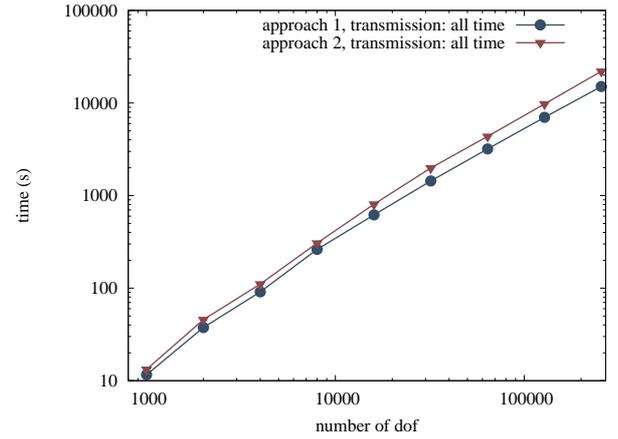


Fig. 5 Ten scatterers. Computational time vs DOF

式の PMCHWT 定式化による積分方程式 (21), (22) とした。

$$(\varepsilon_1 \mathcal{S}_1 q + \varepsilon_2 \mathcal{S}_2 q) (\mathbf{x}) - (\mathcal{D}_1 u + \mathcal{D}_2 u) (\mathbf{x}) = u^I (\mathbf{x}) \quad (21)$$

$$-(\mathcal{D}_1^* q + \mathcal{D}_2^* q) (\mathbf{x}) + \left(\frac{1}{\varepsilon_1} \mathcal{N}_1 u + \frac{1}{\varepsilon_2} \mathcal{N}_2 u \right) (\mathbf{x}) = -\frac{1}{\varepsilon_1} \frac{\partial u^I}{\partial n} (\mathbf{x}) \quad (22)$$

これらは式 (17), (18) と並びかたが違うだけであるが、この順で離散化したとき、式 (17), (18) は高速に収束するが、(21), (22) の場合は問題の自由度を大きくするに従って、離散化線形方程式の係数行列の条件数が大きくなることが知られている⁽²⁾。散乱体は半径 0.4 の円形散乱体とし、問題の自由度を 20000、周波数 $\omega = 10$ 、外部領域の誘電率 $\varepsilon_1 = 1$ としたときに内部領域の誘電率 ε_2 を 0.1 から 3 まで 0.1 ずつ変化させ、数値計算を行った。このとき反復解法の反復回数は 300 から 600 程度であった。Fig. 6 に approach 2、及び反復解法のそれぞれが線形方程式を解くのに要した時間 (すな

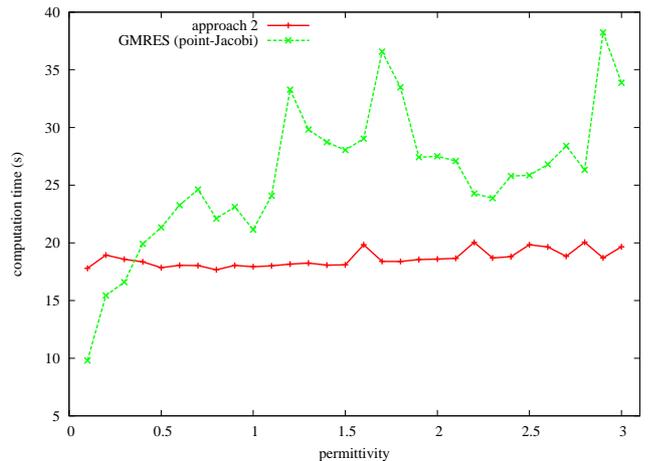


Fig. 6 Computational time for solving the linear equation vs ε_2 . $\varepsilon_1 = 1$

わち \mathcal{H} 行列作成に要する時間を含まない) を示した。Fig. 6 から、反復解法よりも直接解法の方がおおむね線形方程式を速く解けていることがわかる。また、直接解法は誘電率の比

の変化に対して、その計算時間があまり変化しないこともわかる。

3.2.2. 多くの右辺が存在する問題—SS法への応用

高速直接解法ではその計算の大部分を右辺に依存しない形で行い、LU分解された線形方程式を解く計算時間は著しく短いため、同一の係数行列に対して右辺が多く存在する問題に対して特に有効であると考えられる。そのような例として、SS法⁽¹²⁾を用いた固有値問題の数値計算が挙げられる。

SS法はパラメータ p を含む線形方程式の解の一意性がなくなる p の値 (固有値) を求める数値計算法であり、境界積分方程式法にも適用可能である⁽¹³⁾。本論文では、具体的には系 (19), (20) の解が一意でなくなる β の値を求める。そのためにはある β の関数を複素平面上で β について周回積分する必要がある。その際、被積分関数の計算には、積分点ごとに系 (19), (20) を、一般には複数の (ブロック SS 法) ランダムな右辺に対して解くことを要する。このために直接解法を応用することが有効であると考えられる。

考える散乱体は半径 0.3 の単一の円形散乱体とし、自由度数を 1000、周波数 $\omega = 2\pi$ 、外部領域の誘電率 $\epsilon_1 = 1$ 、内部領域の誘電率 $\epsilon_2 = 2$ とした。さらに、SS法の積分経路は中心 (0.5, 0)、半径 0.4 の円とし、積分点数は 32 とした。SS法で各積分点ごとに解く問題の右辺のランダムベクトルの数を 1 及び 256 として問題の固有値を計算し、その全体の計算時間を計測した。計算方法としては計算時間を「安全側」に見積もるために approach 2 を用いた。この結果、右辺が 1 個の場合の計算時間は 1772.4 (s)、256 の場合は 1778.2(s) とほとんど差がなく、提案する手法がブロック SS 法において有効であることが分かった。得られた固有値は、いずれの場合も一個で、その値は $0.5932199 + 0.03446900i$ であった。

4. 結論

本研究では、 H 行列の LU 分解と Kummer 変換による周期 Green 関数の計算を組み合わせた 2 次元 Helmholtz 方程式の境界値問題に対する高速直接解法を提案した。また、Kummer 変換を用いることによって、直接、周期ポテンシャル関数の一部分の低ランク近似を計算することが可能であることを示した。これらの手法について数値計算を行い、提案手法の妥当性を確認した。さらに transmission 問題 (条件があまりよくない問題を含む) や SS 法を用いた固有値問題の解法においても提案手法が有効であることを確かめた。

なお、本研究では、提案した低ランク近似法の一定の有用性を示すことはできたが、現状では ACA などの純粋に数値的な方法に比べて絶対的な優位性を示すまでには至っているとは言い難い。今後、例えば Ewald の方法等のより効率のよい周期 Green 関数の計算法を並用してさらに効率の向上が図れるかどうか検討する予定である。

- (1) Y. Otani, N. Nishimura. *An FMM for periodic boundary value problems for cracks for Helmholtz' equation in 2D*. Int. J. Num. Meth. Eng., 73, 381–406, 2008.
- (2) K. Niino, N. Nishimura. *Preconditioning based on Calderon's formulae for periodic fast multipole methods for Helmholtz' equation*. J. Comp. Phys., 31, 66–81. 2012.
- (3) 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, 12, 109–114, 2012.
- (4) L. Greengard, K. L. Ho, and J. Y. Lee. *A fast direct solver for scattering from periodic structures with multiple material interfaces in two dimensions*. J. Comp. Phys., 258, 738–751, 2014.
- (5) A. Gillman and A. Barnett. *A fast direct solver for quasi-periodic scattering problems*. J. Comp. Phys., 248, 309–322, 2013.
- (6) P.G. Martinsson and V. Rokhlin. *A fast direct solver for boundary integral equations in two dimensions*. J. Comp. Phys., 205, 1–23, 2005.
- (7) M. Bebendorf. *Hierarchical matrices*. Springer, Berlin Heidelberg, 2008.
- (8) L. Grasedyck and W. Hackbusch. *Construction and arithmetics of H-matrices*. Computing, 70.4, 295–334, 2003.
- (9) S. Börm, L. Grasedyck, and W. Hackbusch. *Hierarchical matrices*. Lecture notes 21, 2003.
- (10) 伊海田 明宏, 斎藤隆泰, 廣瀬 壮一. ACA 境界要素法を用いた時間調和 SH 波の多重散乱解析, 計算数理工学論文集, 12, 85–90, 2012.
- (11) C. M. Linton. *The Green's function for the two-dimensional Helmholtz equation in periodic domains*. J. Eng. Math., 33, 377–401, 1998.
- (12) J. Asakura, T. Sakurai, H. Tadano, T. Ikegami and K. Kimura. *A numerical method for nonlinear eigenvalue problems using contour integrals*. JSIAM Letters, 1, 52–55, 2009.
- (13) 野瀬 大一郎, 西村 直志. 2 次元 Helmholtz 方程式の周期境界値問題に現れる固有値問題に対する Sakurai-Sugiura 法と周期多重極法を用いた数値計算, 日本応用数学会論文誌, 24, 185–201, 2014.