計算数理工学論文集 Vol. 17 (2017 年 12 月)，論文 No. 21-171215 JASCOME

2次元Helmholtz方程式の一周期transmission問題における interpolative decompositionに基づいた高速直接解法の性能比較

PERFORMANCE COMPARISON OF FAST DIRECT SOLVERS BASED ON INTERPOLATIVE DECOMPOSITION FOR ONE-PERIODIC TRANSMISSION PROBLEMS OF HELMHOLTZ' EQUATION IN 2D

松本　安弘 [1)]，西村　直志 [2)]

Yasuhiro MATSUMOTO and Naoshi NISHIMURA

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

This paper presents comparison of the fast direct solvers for one-periodic transmission problems for Helmholtz' equation in 2D. The fast direct solvers for the boundary element method based on interpolative decomposition consist of two major types, i.e., the Martinsson-Rokhlin type compressing the resulting linear equations into multi-levels and the Ho-Greengard type which constructs a sparse matrix. There is not much study on the comparison of these methods. In this paper, these methods are applied into one-periodic transmission problems with the help of multi-trace boundary integral equation. Some numerical examples are presented to compare the computational times of these methods.
Key Words: Fast direct solvers, Transmission problems, Helmholtz' equation in 2D, Boundary element methods, Interpolative decomposition

1. はじめに

負の屈折率などの自然界には存在しない特異な物性を発揮するメタマテリアルが注目されている [(1)]．メタマテリアルの特異な物性は，波長より微細な周期構造によって実現されることが多く，無限の解析領域中に周期的に配置された有限の大きさの透過性散乱体に対する transmission 問題の効率的な数値解法の需要が高まっている．有望な数値解法の一つとして，周期多重極境界要素法 [(2)] が知られている．この方法では，線形方程式のソルバーとして GMRES などの反復解法を用いることを前提としているが，その反復回数に比例して計算時間が増加する．この問題を解決するため係数行列に前処理を施すことで線形方程式の収束特性を改善して反復回数を減じるための研究が行われ，特に Calderon の式を考慮した手法により，GMRES の反復回数を著しく減少させることができると報告されている [(3, 4)]．一方で，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には，反復回数が増加し，膨大な計算時間がかかることが予想される．また，同一の係数行列に対して多数の右辺が存在するような問題を解く場合には，それぞれの右辺に対して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多くの計算時間がかかることが予想される．

近年，上述の反復解法の欠点の克服を目的として，計算の大部分を右辺に依存することなく実行できる高速直接解法の研究が活発化している．境界要素法の高速直接解法は，係数行列の非対角部分の効率的な評価方法の違いによって，大きく次の 3 つに分類される．

1. interpolative decomposition[(5)] に基づく方法．線形方程式を多階層に圧縮する Martinsson-Rokhlin の方法 [(6)] や interpolative decomposition によって得られる圧縮された行列表現を並べて巨大な疎行列を構成し，汎用ソルバで解く Ho-Greengard の方法 [(7)] などがある．
2. 多重極展開に基づく方法．層ポテンシャルの多重極モーメントや局所展開等を陽に書き下し，巨大な疎行列を構成し汎用ソルバで解く Pals の方法 [(8)] や，同じ疎行列に対して独自の直接解法を展開した Ambikasaran-Darve の方法 [(9)] がある．
3. ACA[(10)] 等に基づく方法．$\mathcal{H}$ 行列の LU 分解 [(10)] を用いた方法 (例えば松本・西村 [(11)]) や，HODLR 行列を用いた方法 [(12)] などがある．

2017 年 9 月 25 日受付，2017 年 11 月 08 日受理

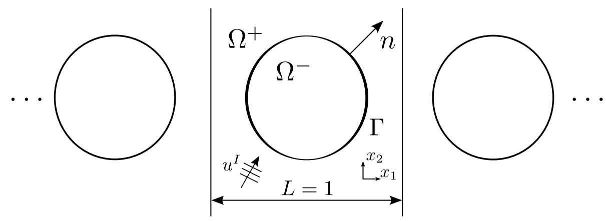

Fig. 1　Periodic domain

このように，いくつかの高速直接解法が提案されているが，高速直接解法同士の性能を比較した研究は筆者の知る限りあまり多くなく，例えば松本らの研究 [13] が報告されている程度である．

さらに周期領域における transmission 問題への適用に限って考えると，計算コストの大きい周期 Green 関数の評価回数を少なくできるかどうかが重要な指標となる．1. の interpolative decomposition に基づく方法は，proxy と呼ばれる仮想境界を用いた計算において通常の基本解が使えるため，周期構造を効率的に評価できると考えられ，2. の多重極展開に基づく方法でも，周期多重極法 [2] と同様に周期単位を多重極法における level 0 セルと同一視することで，計算を効率化できる．一方で，3. の ACA 等に基づく方法は純数値的な方法であり，多くの計算に周期 Green 関数を用いる必要があり，他の方法に比較して多くの計算時間を必要とすると考えられる．また，2. の方法は多重極モーメント等の計算のため，解く問題の支配方程式ごとに異なるプログラムの実装が必要となることに対し，1. の方法は支配方程式が異なってもその基本解を入れ替えるだけでよく，プログラムの実装が簡単であるという利点がある．そこで本稿では，1. の interpolative decomposition に基づく高速直接解法である Martinsson-Rokhlin の方法と Ho-Greengard の方法とを 2 次元 Helmholtz 方程式の 1 周期 transmission 問題に適用し，その計算時間に関する性能比較を行う．筆者の知る限り，それぞれの方法の 1 周期 transmission 問題への適用例としては Ho-Greengard の方法は Greengard らの [14] の例があるが，Martinsson-Rokhlin の方法に関しては Gillman らが論文 [15] の中で若干触れている程度である．

本稿ではまず，非周期 transmission 問題における松本らの方法 [16] を拡張し，multi-trace 境界積分方程式 [17] を用いて Martinsson-Rokhlin の方法を 1 周期 transmission 問題に適用する．また Ho-Greengard の方法に関しても，前者との比較のため，multi-trace 境界積分方程式を用いた定式化を行う．さらに，いくつかの数値計算例によって両者の性能比較を行う．

2. 定式化

2.1. 周期領域における transmission 問題の定式化

2.1.1. 支配方程式

2 次元 Helmholtz 方程式の周期領域における transmission 問題の定式化を行う．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 $(x=(x_1,x_2), -L/2<x_1<L/2, x_2\in R)$ 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．簡単のため，x_1 方向に周期長さ $L=1$ とする．このとき，Ω^+，Ω^- において Helmholtz 方程式

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

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

を満たす解 $u(x)$ を，Γ 上での境界条件

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

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

と周期境界条件

$$u(L/2,x_2)=e^{i\beta}u(-L/2,x_2) \tag{5}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x_1}(L/2,x_2)=e^{i\beta}\frac{\partial u}{\partial x_1}(-L/2,x_2) \tag{6}$$

および，Ω^+ での散乱波 $u^s=u-u^I$ に対する放射条件のもとで解く問題を考える．ここに，$q^\pm=\dfrac{1}{\varepsilon^\pm}\dfrac{\partial u^\pm}{\partial n}$，であり，$\Omega^\pm$ において $k^\pm=\omega\sqrt{\varepsilon^\pm\mu^\pm}$ は波数，ω は周波数，$\varepsilon^\pm$，$\mu^\pm$ は誘電率，透磁率である．簡単のため，誘電率と透磁率はそれぞれの領域にわたって一様とする．$u^\pm$ は $\Omega^\pm$ から Γ への u の極限値であり，n は Γ 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，β は位相差である．

2.1.2. 境界積分方程式

transmission 問題を記述する境界積分方程式としては．PMCHWT 定式化による積分方程式などが知られている．ただし Martinsson-Rokhlin の方法 [6] を用いる際には，PMCHWT 定式化による積分方程式を用いると，内外の誘電率が等しいときに $(\varepsilon^+=\varepsilon^-)$，高速直接解法のアルゴリズムが破綻することが指摘されている [16]．そのため本研究でも，式 (1)〜(6) に対応する積分方程式として，次に示すような multi-trace 境界積分方程式 [17] を用いる．

$$\mathcal{D}^+u^+(x)-\varepsilon^+\mathcal{S}^+q^+(x)-\frac{u^-}{2}(x)=-u^I(x) \tag{7}$$

$$\frac{1}{\varepsilon^+}\mathcal{N}^+u^+(x)-\mathcal{D}^{+*}q^+(x)-\frac{q^-}{2}(x)=-\frac{1}{\varepsilon^+}\frac{\partial u^I}{\partial n}(x) \tag{8}$$

$$\frac{u^+}{2}(x)+\mathcal{D}^-u^-(x)-\varepsilon^-\mathcal{S}^-q^-(x)=0 \tag{9}$$

$$\frac{q^+}{2}(x)+\frac{1}{\varepsilon^-}\mathcal{N}^-u^-(x)-\mathcal{D}^{-*}q^-(x)=0 \tag{10}$$

ここに $\mathcal{S}^-$, $\mathcal{D}^-$, $\mathcal{D}^{-*}$, $\mathcal{N}^-$ は, それぞれ

$$\mathcal{S}^-v(x)=\int_\Gamma G^-(x-y)v(y)\mathrm{d}S_y \tag{11}$$

$$\mathcal{D}^-v(x)=\int_\Gamma \frac{\partial G^-(x-y)}{\partial n_y}v(y)\mathrm{d}S_y \tag{12}$$

$$\mathcal{D}^{-*}v(x)=\int_\Gamma \frac{\partial G^-(x-y)}{\partial n_x}v(y)\mathrm{d}S_y \tag{13}$$

$$\mathcal{N}^-v(x)=\text{p.f.}\int_\Gamma \frac{\partial^2 G^-(x-y)}{\partial n_x\partial n_y}v(y)\mathrm{d}S_y \tag{14}$$

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 上の層ポテンシャルの評価点 x，積分点 y における法線微分を表し，$G^-(x-y)=-\dfrac{i}{4}H_0^{(2)}(k^-|x-y|)$ は波数 k^- の 2 次元 Helmholtz 方程式の内向き基本解である．ここに，$H_0^{(2)}$ は 0 次の第 2 種 Hankel 関数である．また，式 (14) 中の p.f. は特異積分の有限部分を表す．また $\mathcal{S}^+$, $\mathcal{D}^+$, $\mathcal{D}^{+*}$, $\mathcal{N}^+$

はそれぞれ式 (11)〜(14) の被積分核を波数 k^+ の周期 Green 関数 $G^+ = \displaystyle\sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{i}{4} H_0^{(1)}(k^+|x-(y+me_1)|)e^{im\beta}$ に置き換えたものである．ここに e_1 は x_1 方向の単位ベクトルであり，$H_0^{(1)}$ は 0 次の第 1 種 Hankel 関数である．G^+，G^- に対して外向き，内向きの基本解を使い分ける定式化は，複素固有振動数 ω を求める際に有効である [18] が，全て外向きとする解法と比較して反復法の反復回数が増えることがある．そのため，この定式化において直接解法を用いることの利点は大きいものと考えられる．

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 (7)〜(10) を離散化すると，次のように行列表示できる．

$$\begin{pmatrix} D^+ & -\varepsilon^+ S^+ & -\frac{I}{2} & \\ \frac{1}{\varepsilon^+} N^+ & -D^{+*} & & -\frac{I}{2} \\ \frac{I}{2} & & D^- & -\varepsilon^- S^- \\ & \frac{I}{2} & \frac{1}{\varepsilon^-} N^- & -D^{-*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} {u_i}^+ \\ q_i^+ \\ u_i^- \\ q_i^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -u^I \\ -\frac{1}{\varepsilon^+}(\frac{\partial u^I}{\partial n}) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{15}$$

ここに，S^- 等は $\mathcal{S}^-$ 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．また，I は単位行列である．

2.1.3. 周期 Green 関数

周期 Green 関数 G^+ は定義通りに数値計算すると，その級数の収束が非常に遅い．そのため種々の算法が提案されており，Kummer 変換はその一つである [19]．本論文では超特異核 $\mathcal{N}$ への適用が可能な修正された Kummer 変換を用いる．詳細は，文献 [11] を見られたい．

2.2. 高速直接解法

ここでは，高速直接解法の原理である interpolative decomposition (ID)[5] を用いた線形方程式の非対角ブロック行列の低ランク近似と，その応用である Martinsson-Rokhlin の方法 [6] および Ho-Greengard の方法 [7] への multi-trace 境界積分方程式の適用について簡単に述べる．

2.2.1. ID による非対角部分行列の低ランク近似

式 (15) を $Ax = f$ とおく．境界 Γ をいくつかのセグメントに区分することで線形方程式を区分けして，その i 番目の行ブロックに関する式を

$$A_i x_i + \sum_{j \neq i} A_{ij} x_j = f_i \tag{16}$$

と書く．ここに i，j は整数であり，セグメント番号をあらわす．このとき，線形方程式の非対角ブロック行列 A_{ij} は，基本解の性質より低周波では低ランク近似可能であるため，ID を用いて，

$$A_i x_i + \sum_{j \neq i} U_i R_{ij} V_j x_j = f_i \tag{17}$$

と低ランク近似する．ここに，式 (15) より，$A_i, R_{ij}, U_i, V_j, x_i, f_i$ はそれぞれ次式で表される．

$$A_i = \begin{pmatrix} D_i^+ & -\varepsilon^+ S_i^+ & -\frac{I}{2} & \\ \frac{1}{\varepsilon^+} N_i^+ & -D_i^{+*} & & -\frac{I}{2} \\ \frac{I}{2} & & D_i^- & -\varepsilon^- S_i^- \\ & \frac{I}{2} & \frac{1}{\varepsilon^-} N_i^- & -D_i^{-*} \end{pmatrix}$$

$$R_{ij} = \begin{pmatrix} D^+_{p_i^1 p_j^5} & -\varepsilon^+ S^+_{p_i^1 p_j^6} & & \\ \frac{1}{\varepsilon^+} N^+_{p_i^2 p_j^5} & -D^{+*}_{p_i^2 p_j^6} & & \\ & & D^-_{p_i^3 p_j^7} & -\varepsilon^- S^-_{p_i^3 p_j^8} \\ & & \frac{1}{\varepsilon^-} N^-_{p_i^4 p_j^7} & -D^{-*}_{p_i^4 p_j^8} \end{pmatrix}$$

$$U_i = \begin{pmatrix} U_{p_i^1} & & & \\ & U_{p_i^2} & & \\ & & U_{p_i^3} & \\ & & & U_{p_i^4} \end{pmatrix},\ x_i = \begin{pmatrix} u_i^+ \\ q_i^+ \\ u_i^- \\ q_i^- \end{pmatrix}$$

$$V_j = \begin{pmatrix} V_{p_j^5} & & & \\ & V_{p_j^6} & & \\ & & V_{p_j^7} & \\ & & & V_{p_j^8} \end{pmatrix},\ f_i = \begin{pmatrix} -u_i^I \\ -\frac{1}{\varepsilon^+}(\frac{\partial u^I}{\partial n})_i \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

ここに R_{ij} は A_{ij} から選ばれたいくつかの行 p_i^1〜p_i^4 および列 p_j^5〜p_j^8 に対応する A_{ij} の成分から構成された行列であり，選ばれた行，列はそれぞれ行スケルトン，列スケルトンと呼ばれる．U_i および V_j は，注目しているセグメント Γ_1 と残りすべてのセグメント Γ_2 (Fig.2) との間の影響係数を rank-revealing QR 分解 [20] 等で圧縮して作成された行列である．R_{ij} が元の線形方程式の非対角部分行列のスケルトンとなっていることが ID の特徴である．なお Γ_2 のサイズは大きいので，U_i および V_j の計算には非常に時間がかかる．そのため Γ_1 と Γ_2 との間の影響の評価を，Γ_1 と，Γ_1 を 囲む proxy(仮想境界)Γ_p(Fig.2) および Γ_p の内部に含まれる Γ_2 部分 (以下，Γ'_p と呼ぶ) との間の影響の評価に置き換えることで U_i および V_i の計算を加速する [6]．その際，単に Gillman et al. の方法 [21] を拡張するのではなく，非周期問題における松本，西村の方法 [16] と同様に Table 1 のように取って，Γ'_p 部分の影響が大きく現れるようにした．この結果，Γ_1 の端部の要素がスケルトンとして選ばれるようになる．なお，proxy を用いた U_i，V_j の計算では，ポテンシャル論に基づいた考察により，周期単位長 L に比較して散乱体が小さい場合には，周期問題においても周期 Green 関数ではなく，非周期問題の場合と同様に基本解を用いることができると考えられる．ただし，散乱体が周期単位長と同程度に大きな場合には，Γ_p の内部に隣の周期単位の境界が含まれうることによる影響を考慮して，U_i，V_j の評価法を改良することが必要と考えられる．

2.2.2. Martinsson-Rokhlin の方法

ID による線形方程式の非対角部分の低ランク近似を利用して，線形方程式を多階層に圧縮して解く Martinsson-Rokhlin

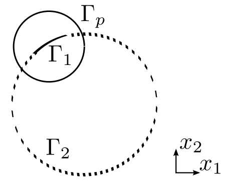

Fig. 2 Γ_1(solid arc), Γ_2(dashed line) and Γ_p(circle in solid curve)

Table 1　Evaluation pattern of proxy

	proposal	(extension of Gillman et al.[21])
U_{p^1}	$G^+(x-y)$	$G^+(x-y)$
U_{p^2}	$\displaystyle\int_{\Gamma_y}\frac{\partial^2 G^+(x-y)}{\partial n_x \partial n_y}\mathrm{d}S_y$	$\displaystyle\frac{\partial G^+(x-y)}{\partial n_x}$
U_{p^3}	$G^-(x-y)$	$G^-(x-y)$
U_{p^4}	$\displaystyle\int_{\Gamma_y}\frac{\partial^2 G^-(x-y)}{\partial n_x \partial n_y}\mathrm{d}S_y$	$\displaystyle\frac{\partial G^-(x-y)}{\partial n_x}$
V_{p^5}	$\displaystyle\int_{\Gamma_y}\frac{\partial^2 G^+(x-y)}{\partial n_x \partial n_y}\mathrm{d}S_y$	$\displaystyle\int_{\Gamma_y}\frac{\partial G^+(x-y)}{\partial n_y}\mathrm{d}S_y$
V_{p^6}	$\displaystyle\int_{\Gamma_y} G^+(x-y)\mathrm{d}S_y$	$\displaystyle\int_{\Gamma_y} G^+(x-y)\mathrm{d}S_y$
V_{p^7}	$\displaystyle\int_{\Gamma_y}\frac{\partial^2 G^-(x-y)}{\partial n_x \partial n_y}\mathrm{d}S_y$	$\displaystyle\int_{\Gamma_y}\frac{\partial G^-(x-y)}{\partial n_y}\mathrm{d}S_y$
V_{p^8}	$\displaystyle\int_{\Gamma_y} G^-(x-y)\mathrm{d}S_y$	$\displaystyle\int_{\Gamma_y} G^-(x-y)\mathrm{d}S_y$

の方法について，簡単に述べる．境界のセグメントへの分割に関して二分木構造を導入し，式 (17) を変形して次式のように圧縮する．

$$\tilde{A}_i y_i + \sum_{j \neq i} R_{ij} y_j = \tilde{A}_i V_i A_i^{-1} f_i \qquad (18)$$

ここに，$\tilde{A}_i \equiv (V_i A_i^{-1} U_i)^{-1}$，$y_i \equiv V_i x_i$ である．ここで，R_{ij} が元の線形方程式のスケルトンそのものであることから，式 (18) は隣合うセグメントを結合して番号を振り直し，proxy を用いた U_i，V_i の高速評価を再度実行できるように線形方程式の行，列ブロックを並べ替えることで，式 (16) と同様に再度圧縮可能となる．これを Fig.3 のように繰り返すことにより，式 (18) は Lapack ルーチン等により，わずかな計算コストで解くことができる．また式 (18) で得られた y_i から次式

$$x_i = (A_i^{-1} - A_i^{-1} U_i \tilde{A}_i^{-1} V_i A_i^{-1}) f_i + A_i^{-1} U_i \tilde{A}_i y_i \qquad (19)$$

を再帰的に用いて元の式 (16) の解 x_i を求めることができる．

2.2.3. Ho-Greengard の方法

Ho-Greengard の方法 [7] では，ID で計算される U_i，V_i を陽に並べ，巨大な疎行列を構成する．このとき，線形方程式の非対角部分のみを再帰的に圧縮し，$\tilde{A}$ の計算を行わない点が Martinsson-Rokhlin の方法と異なる．詳細は文献 [7] を参照されたいが，注意として，Martinsson-Rokhlin の方法での多階層圧縮時の線形方程式の並び替えと同等の操作のため，参考文献の式 (3.2)[7] において，単位行列を適切な置換行列

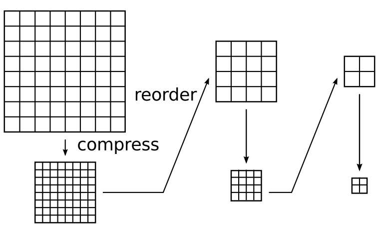

Fig. 3　Martinsson-Rokhlin type fast direct solver

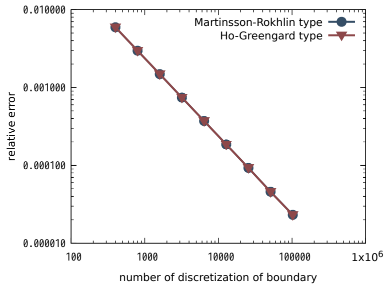

Fig. 4　Confirmation of the validity

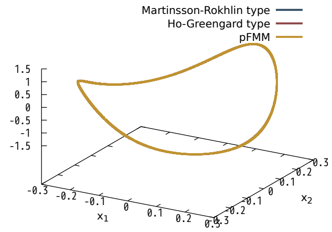

Fig. 5　Real part of u on Γ

で置き換える必要がある．なお圧縮を止める階層では，単位行列のままでよく，置き換えは必要はない．本稿では構成した疎行列の分解および前進，後退代入による求解には Intel MKL の Direct Sparse Solver Interface ルーチンを用いた．

3. 数値計算例

2 つの高速直接解法の性能比較のため数値計算を行った．数値計算には京都大学のスーパーコンピュータシステム B を使用し，並列計算は行わず，すべて逐次計算とした．散乱体は半径 0.3 の円形散乱体を用い，また入射波 u^I は平面波，周波数は $\omega = 2\pi$ で，外部の誘電率は $\varepsilon^+ = 1$ で固定とし，透磁率は $\mu^\pm = 1$ とする．

高速直接解法に対する従来法として，反復解法である周期多重極境界要素法 (以下，pFMM と呼ぶ) を比較に用いた．反復解法の反復回数の低減のため，pFMM においては Calderon の式を考慮した PMCHWT 定式化 [3] を行った．なお pFMM における積分方程式中の層ポテンシャルの積分核にはすべて外向き基本解を用い，また反復解法には GMRES を用いた．境界 Γ の分割数を N とすると，離散化後の線形方程式の未知数の数はそれぞれ，高速直接解法での multi-trace 境界積分方程式では $4N$，pFMM での PMCHWT 定式化による積分方程式では $2N$ となる．そのため問題の大きさについては未知数の数ではなく，境界の分割数 N を用いて議論を行う．また Fig.2 における仮想境界 Γ_p の半径は，非周期問題の時 [16] と同様に，文献 [21] にならい Γ_1 を囲む最小の円の半径の 1.5 倍とした．

3.1. 実装の妥当性の確認

まず実装の妥当性を確認する．$N = 100 \times 2^i (i = 2, 3, \cdots, 10)$ とし，$\varepsilon^- = 1$ とした．このとき解析解は入射波そのものと

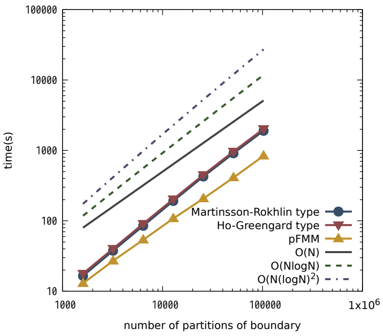

Fig. 6　N vs time

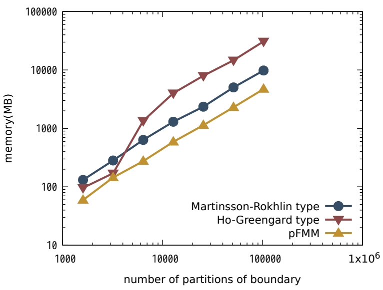

Fig. 7　N vs memory

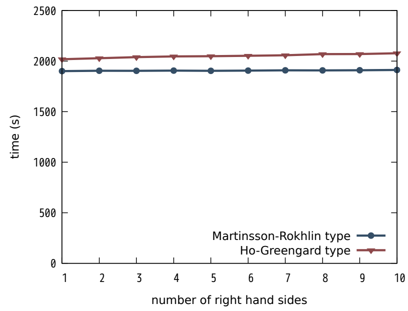

Fig. 8　Number of right hand sides vs time

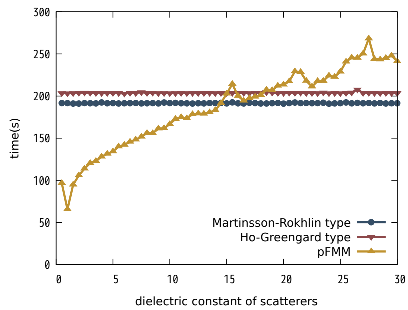

Fig. 9　Dielectric constant ε^- vs time(s)

なる．数値計算結果と解析解との相対誤差を Fig.4 に示す．Fig.4 から，Martionsson-Rokhlin の方法と Ho-Greengard の方法と両者が，境界の分割数が倍になるごとに，相対誤差が 1/2 になっていることがわかる．また数値解の精度については，両者ともほぼ同一であった．

また $N = 12800$，$\varepsilon^- = 2$ としたとき，それぞれの数値解法により計算された境界 Γ 上の u の実部を Fig.5 に示す．Fig.5 から，高速直接解法と pFMM とでほぼ同じ解が得られていることがわかる，以上により，高速直接解法の実装の妥当性が確認できた．

3.2. 計算時間およびメモリ使用量に関する比較

次に $N = 100 \times 2^i (i = 4, 5, \cdots, 10)$ とし，$\varepsilon^- = 2$ としたときの，2 つの高速直接解法および pFMM の計算時間の比較を Fig.6 に示す．Fig.6 からは，2 つの高速直接解法は，概ね $O(N\log N)$ か $O(N(\log N)^2)$ 程度の計算量であるとわかる．また Martinsson-Rokhlin の方法は pFMM と比較すると，例えば $N = 102400$ のときは約 2.3 倍の計算時間となったが，直接解法であることを考慮すれば十分に実用と考えられる．なお Fig.6 において Martinsson-Rokhlin の方法は Ho-Greengard の方法と比較して計算時間が 5%程度短かった．

また，メモリ使用量の比較を Fig.7 に示す．Fig.7 から，分割数が大きいときのメモリの使用量は多い方から Ho-Greengard の方法，Martinsson-Rokhlin，pFMM の順となっている．特に Ho-Greengard の方法は $N = 4000$ 付近で急に使用量が増大している．Ho-Greengard の方法の使用メモリ量が多い理由として，汎用ソルバ中で疎行列を扱うために，多くの作業用メモリが必要となるためと考えられる．また，一方 pFMM では 20 回程度の少ない反復回数であったため，高速直接解法に比較して少ないメモリ使用量となったと考えられる．

3.3. 多数右辺に対する計算時間の比較

2 つの高速直接解法について，Fig.8 に，$N = 102400$，ε^- とし，右辺ベクトルを単純にコピーして本数を増加させた場合の，同一の係数行列に対して多数の右辺が存在する場合の計算時間の比較を示す．Fig.8 より，Martinsson-Rokhlin の方法の方が，Ho-Greengard の方法に比較して，右辺ベクトルの本数の増加に伴う計算時間の増加が緩やかであることがわかる．従って，同一の係数行列に対して多数の右辺が存在する場合には，Martinsson-Rokhlin の方法の方が有効であると考えられる．なお今回の条件下では，3 本以上の右辺ベクトルが存在する場合，pFMM よりも高速直接解法の方が早く問題を解くことができる．

3.4. 誘電率比に対する計算時間の比較

Fig.9 に，$N = 12800$，ε^- を 0.5 から 30 まで，0.5 刻みで変化させたときの計算時間を示す．Fig.9 から，pFMM では，Calderon の式を考慮しているため離散化誤差を除いて線形方程式の係数行列自身の 2 乗が逆行列となる $\varepsilon^- = 1 (= \varepsilon^+)$ のときに，計算時間が最小となり，内外の誘電率比が大きくなるに従って計算時間が増加する傾向があることに対して，2 つの高速直接解法は，ε^- の変化による線形方程式の性質の変化に対して計算時間がほとんど変化しない．従って，有効な前処理による反復解法の反復回数の低減が困難な場合には，高速直接解法を用いることで，より少ない計算時間で問題を解くことができると考えられる．なお pFMM の計算時間と Martinsson-Rokhlin の方法と計算時間がほぼ同じとなる $\varepsilon^- = 14.5$ のときに，pFMM における GMRES の反復回数は 48 回であった．

4. おわりに

interpolative decomposition[5] に基づく境界要素法の高速直接解法である，Martinsson-Rokhlin の方法 [6] と，Ho-Greengard の方法 [7] とを，multi-trace 境界積分方程式 [17] による定式化を用いて 2 次元 Helmholtz 方程式の一周期 transmission 問題に適用し，両者の数値計算性能を比較した．

数値計算により得られた結果および知見は次の通りである．

- 解析解と数値解との比較および周期多重極法 [3] による数値解との比較により，高速直接解法の実装の妥当性を確認した．
- 計算時間に関しては，Martinsson-Rokhlin の方法が Ho-Greengard の方法に比較してわずかに速い．
- 境界の分割数が多い問題では Ho-Greengard の方法は必要とするメモリ使用量が Martinsson-Rokhlin の方法と比較して多くなるため，大規模問題にはより少ないメモリで問題を解くことができる後者が有効である．
- 同一係数行列に対して多数の右辺が存在する場合は，右辺ベクトル本数の増加に伴う計算時間の増加が緩やかな Martinsson-Rokhlin の方法が有効と考えられる．
- 高速直接解法の計算時間は，境界の内外の誘電率比に影響を受けにくいため，有効な前処理による反復解法の反復回数の低減が困難な場合には，高速直接解法を用いることで，より少ない計算時間で問題を解くことができると考えられる．

今後の課題としては，高速直接解法の 3 次元問題への適用や，円形散乱体以外の散乱体形状への適用などが挙げられる．また，周期 Green 関数の評価法についても改善の余地がある．例えば周期 Green 関数の算法として用いている Kummer 変換は，非周期方向の評価点と積分点との距離が 0 のときに級数の収束が遅くなるため，Ewald の方法 [19] を用いることで級数の収束の速さを改善することが考えられる．

参考文献

(1) F. Capolino, Metamaterials Handbook 1: Theory and Phenomena of Metamaterials, CRC Press, 2009.

(2) Y. Otani, N. Nishimura, An FMM for periodic boundary value problems for cracks for Helmholtz' equation in 2D, Int. J. Numer. Meth. Eng., 73, 381–406, 2008.

(3) K. Niino and N. Nishimura, Preconditioning based on Calderon's formulae for periodic fast multipole methods for Helmholtz' equation, J. Comp. Phys., 231.1, 66–81, 2012.

(4) H. Isakari, K. Niino, H. Yoshikawa, N. Nishimura, Calderon's preconditioning for periodic fast multipole method for elastodynamics in 3D, Int. J. Numer. Meth. Eng., 90(4), 484-505, 2012.

(5) H. Cheng, Z. Gimbutas, PG. Martinsson, V. Rokhlin, On the compression of low rank matrices, SIAM Journal on Scientific Computing, 26, 1389–1404, 2005.

(6) PG. Martinsson and V. Rokhlin, A fast direct solver for boundary integral equations in two dimensions, J. Comp. Phys., 205, 1–23, 2005.

(7) KL. Ho and L. Greengard, A fast direct solver for structured linear systems by recursive skeletonization, SIAM Journal on Scientific Computing, 34, 2507–2532, 2012.

(8) TP. Pals, Multipole for scattering computations: Spectral discretization, stabilization, fast solvers, PhD thesis of University of California at Santa Barbara, 2004.

(9) S. Ambikasaran and E. Darve, The inverse fast multipole method, arXiv preprint arXiv:1407.1572, 2014.

(10) M. Bebendorf, Hierarchical matrices, Springer Berlin Heidelberg, 2008.

(11) 松本安弘, 新納和樹, 西村直志, $\mathcal{H}$ 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, 計算数理工学論文集, 14, 79-84, 2014.

(12) S. Ambikasaran and E. Darve, An $\mathcal{O}(N\log N)$ fast direct solver for partial hierarchically semi-separable matrices, J. Sci. Comput., Vol. 57, no. 3, 477–501, 2013.

(13) 松本安弘, 西村直志, 2 次元 Helmholtz 方程式の境界値問題における interpolative decomposition に基づいた高速直接解法の性能比較, 計算工学講演会論文集, Vol. 22, 東京, 2017.

(14) L. Greengard, KL. Ho, JY. Lee, A fast direct solver for scattering from periodic structures with multiple material interfaces in two dimensions, J. Comp. Phys., 258, 738–751, 2014.

(15) A. Gillman and A. Barnett, A fast direct solver for quasi-periodic scattering problems, J. Comp. Phys., 248, 309–322, 2013.

(16) 松本安弘, 西村直志, 2 次元 Helmholtz 方程式の transmission 境界問題の高速直接解法について, 計算数理工学論文集, Vol. 16, 97–102, 2016.

(17) R. Hiptmair and C. Jerez-Hanckes, Multiple traces boundary integral formulation for Helmholtz transmission problems, Adv. Comput. Math., 37.1, 39–91, 2012.

(18) 三澤亮太, 西村直志, 見かけの複素固有値分布に基づいた 2 次元 Helmholtz 方程式の transmission 問題における単一境界積分方程式法の考察, 計算数理工学論文集, Vol. 16, 73–78, 2016.

(19) CM. Linton, The Green's function for the two-dimensional Helmholtz equation in periodic domains, Journal of Engineering Mathematics, 33, 377–401, 1998.

(20) M. Gu, SC. Eisenstat, Efficient algorithms for computing a strong rank-revealing QR factorization, SIAM Journal on Scientific Computing, 17, 848-869, 1996.

(21) A. Gillman, PM. Young, PG. 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.