

2次元 Helmholtz 方程式の 1 周期 transmission 問題に対する Burton-Miller の定式化を用いた高速直接解法

A FAST DIRECT SOLVER USING THE BURTON-MILLER FORMULATION 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: y.m.2234@gmail.com)

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)

It is known that a naive use of the fast direct solver of the Martinsson-Rokhlin type in one-periodic transmission problems of Helmholtz' equation in 2D with standard integral equations leads to a breakdown of the algorithm when the material contrast is low. In our previous study, we showed that this breakdown can be avoided by means of the multi-traces boundary integral equations⁽⁷⁾. However, this method has a problem of increasing both the number of unknowns and the computational time compared to well-known formulation such as PMCHWT. This paper proposes a modified fast direct solver which uses the Burton-Miller integral equation and a new construction of proxies in order to reduce the number of unknowns and the computational time. We validate the proposed approach with several numerical experiments.

Key Words: Fast direct solvers, Transmission problems, Helmholtz' equation in 2D, Boundary element methods, Burton-Miller integral equation

1. はじめに

周期 transmission 問題は、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よる入射波の反射、屈折、透過を扱い、物理学、工学上多くの応用を有している。最近の興味深い適用例として、例えば、負の屈折率などの自然界には存在しない特異な物性を示すメタマテリアル⁽¹⁾ の設計を挙げることができる。周期 transmission 問題の数値解法として、遠方における人工的な吸収境界条件を必要としない境界要素法が有効と考えられる。ただし境界要素法では、離散化後の線形方程式の係数行列が密となるため、未知数の数が大きな問題を解く際には高速解法の併用が必須である。

周期 transmission 問題に対する境界要素法を用いた高速解法としては、例えば周期多重極境界要素法⁽²⁾ など、離散化後の線形方程式を GMRES などの反復解法を用いて解く手法が主流であるが、高速直接解法も有望と考えられる。その理由は、係数行列のスペクトル特性の変化に対して計算時間が安定し、また計算の大部分を右辺に依存せず実行可能であるため同一の係数行列に対し複数の右辺が存在する問題も

高速に解くことが期待できるなど、高速直接解法が反復解法にない特徴を持つためである^(3, 4)。

周期問題を効率よく扱うことができ、実装が容易である高速直接解法として、Martinsson-Rokhlin 型の直接解法⁽³⁾ と Ho-Greengard 型の直接解法⁽⁵⁾ とが挙げられる。両者の性能を比較した結果によると、計算時間および使用メモリの双方において、Martinsson-Rokhlin 型の直接解法がより有望であることが示されている⁽⁴⁾。また Martinsson-Rokhlin 型の解法に関する先行研究において、transmission 問題に広く用いられる PMCHWT 定式化の積分方程式を用いると、内外の物質パラメータのコントラストが小さい時に解法のアルゴリズムが破綻するが、multi-trace 境界積分方程式⁽⁶⁾を用いることで、この問題を解決できることが示されている⁽⁷⁾。ただし multi-trace 境界積分方程式は、その未知数の数が元の transmission 問題の未知数の数の 2 倍となるため、計算時間が増加する課題を有する。

そこで本研究では、2次元 Helmholtz 方程式の 1 周期 transmission 問題に対する Martinsson-Rokhlin 型の直接解法のさらなる性能改善のため、Burton-Miller の積分方程式⁽⁸⁾を用いたアルゴリズムの構築について検討する。性能改善に

Burton-Miller の積分方程式を用いる理由は次の通りである。transmission 問題に対する PMCHWT 定式化や Müller 定式化の積分方程式は、元の transmission 問題の固有値とは異なる見かけの固有値を持つ。ただし解く問題によっては、虚部が非常に小さい見かけの固有値を持つことがあり、その見かけの固有値に近い実数周波数では、解の精度が悪化する場合があることが報告されている⁽⁹⁾。また、multi-trace 境界積分方程式の見かけの固有値は PMCHWT 定式化と同一のため、PMCHWT 定式化と同様の解の精度の悪化が発生する恐れがある。一方、Burton-Miller の積分方程式は見かけの固有値が実軸から離れており、数値解の悪化が生じにくい。計算負荷の大きい前処理を用いない限り反復解法における収束は遅い⁽¹⁰⁾。しかし、高速直接解法では線形方程式の係数行列のスペクトル特性に依らず高速に計算できることが期待できる。従って、Burton-Miller の積分方程式は高速直接解法において非常に有効であると考えられる。また、Martinsson-Rokhlin 型解法では、遠くの境界要素との相互影響を proxy⁽³⁾ と呼ばれる局所的な仮想境界を用いた評価により高速化を実現する。しかし transmission 問題では複数領域を扱うため、proxy を用いて同時に複数の層ポテンシャルを評価する必要があり、異なる積分方程式に対する proxy の適用方法は同一ではない。そのため Burton-Miller の積分方程式に対応した proxy の適用方法を合わせて検討する。

以下では、Burton-Miller の積分方程式に対応した Martinsson-Rokhlin 型の高速直接解法の定式化を示し、proxy を用いた高速化手法の適用方法についても詳しく述べる。さらに、アルゴリズムの妥当性および計算時間の短縮について数値計算例により確認する。

2. 問題の定式化

2.1. 1 周期 transmission 問題

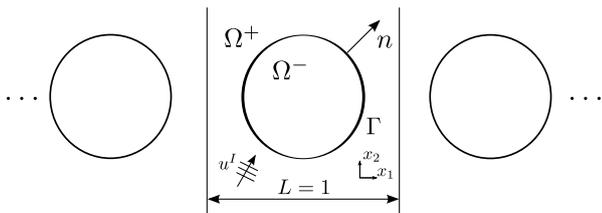


Fig. 1 Periodic domain

2次元 Helmholtz 方程式の1周期 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 ($x = (x_1, x_2)$, $-L/2 < x_1 < L/2$, $x_2 \in \mathbb{R}$) 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。 x_1 方向の周期長を L とする。このとき、 Ω^+ , Ω^- において Helmholtz 方程式

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

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

を満たす解 $u(x)$ を、 Γ 上での境界条件

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

と周期境界条件

$$u(L/2, x_2) = e^{i\beta} u(-L/2, x_2) \quad (4)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x_1}(L/2, x_2) = e^{i\beta} \frac{\partial u}{\partial x_1}(-L/2, x_2) \quad (5)$$

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求める問題を考える。ここに、 Ω^\pm において $k^\pm = \omega \sqrt{\epsilon^\pm \mu^\pm}$ は波数、 ω は周波数、 ϵ^\pm , μ^\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律とし、内外の透磁率 $\mu^\pm = 1$, 周期単位長 $L = 1$ とする。また $u^\pm(x)$ は Ω^\pm から Γ への $u(x)$ の極限值、 $q^\pm(x) = \frac{1}{\epsilon^\pm} \frac{\partial u^\pm(x)}{\partial n}$ であり、 n は Ω^+ に向けた Γ 上の単位法線ベクトルである。また u^I は入射波、 β は位相差である。

2.2. 境界積分方程式

著者らが先行研究で提案した手法⁽⁴⁾では、Martinsson-Rokhlin 型の直接解法⁽³⁾のアルゴリズムを破綻なく実行するため、式(1)~(5)に対応する積分方程式として、次に示す multi-trace 境界積分方程式⁽⁶⁾を用いていた。

$$\begin{pmatrix} \mathcal{D}^+ & -\epsilon^+ \mathcal{S}^+ & -\frac{\mathcal{I}}{2} \\ \frac{1}{\epsilon^+} \mathcal{N}^+ & -\mathcal{D}^{+*} & -\frac{\mathcal{I}}{2} \\ \frac{\mathcal{I}}{2} & & \mathcal{D}^- & -\epsilon^- \mathcal{S}^- \\ & \frac{\mathcal{I}}{2} & \frac{1}{\epsilon^-} \mathcal{N}^- & -\mathcal{D}^{-*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^+(x) \\ q^+(x) \\ u^-(x) \\ q^-(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -u^I(x) \\ -\frac{1}{\epsilon^+} \frac{\partial u^I}{\partial n}(x) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (6)$$

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

$$\mathcal{S}^- v(x) = \int_{\Gamma} G^-(x-y) v(y) dS_y \quad (7)$$

$$\mathcal{D}^- v(x) = \int_{\Gamma} \frac{\partial G^-(x-y)}{\partial n_y} v(y) dS_y \quad (8)$$

$$\mathcal{D}^{-*} v(x) = \int_{\Gamma} \frac{\partial G^-(x-y)}{\partial n_x} v(y) dS_y \quad (9)$$

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

で定義される層ポテンシャル、 \mathcal{I} は恒等作用素であり、 $\frac{\partial}{\partial n_x}$, $\frac{\partial}{\partial n_y}$ 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、 $G^-(x-y) = \frac{i}{4} H_0^{(1)}(k^- |x-y|)$ は波数 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)中の p.f. は発散積分の有限部分を意味する。また \mathcal{S}^+ , \mathcal{D}^+ , \mathcal{D}^{+*} , \mathcal{N}^+ はそれぞれ式(7)~(10)の積分核を波数 k^+ の周期 Green 関数 $G^+ = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{i}{4} H_0^{(1)}(k^+ |x - (y + m e_1)|) e^{im\beta}$ 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る。

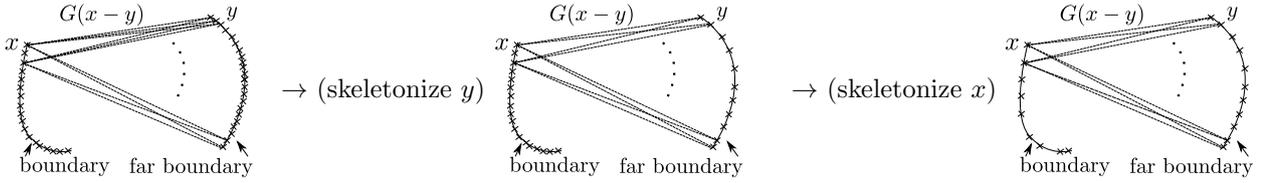


Fig. 2 Skeletonization

一方, Burton-Miller の積分方程式 (8) は, 次式で示される.

$$\begin{pmatrix} (\mathcal{D}^+ - \frac{\tau}{2}) + \alpha \mathcal{N}^+ & -\varepsilon^+(S^+ + \alpha(\mathcal{D}^{*+} + \frac{\tau}{2})) \\ (\mathcal{D}^- + \frac{\tau}{2}) & -\varepsilon^- S^- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(x) \\ q(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -u^I(x) - \alpha \frac{\partial u^I(x)}{\partial n} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (11)$$

ここに, $u(x) = u^+(x) = u^-(x)$, $q(x) = q^+(x) = q^-(x)$, $\alpha = i/k^+$ である. 式 (6), (11) から, multi-trace 境界積分方程式の未知数は u^\pm , q^\pm の 4 つであることに對し, Burton-Miller の積分方程式では未知数は u , q の 2 つであることがわかり, 数値計算時間の短縮が期待できる. なお, 本研究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.

2.3. 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, Ewald の方法 (11) はその一つである. Ewald の方法では, 周期 Green 関数を実変数域で早く収束する級数項と周波数域で早く収束する級数項の和に分割して計算する. 2 つの級数項はどちらも指数的に収束するため, Ewald の方法は非常に効率の良い算法として知られる.

注意として, Ewald の方法には級数項の収束速度をコントロールするための (単一の) 任意パラメータがあり, 通常は 2 つの級数項の収束速度が同等となるよう決定されることが多い. しかし, この方法で任意パラメータを決定する場合, 高周波問題において, 波数に比較して任意パラメータが小さくなる. その結果, 波数と任意パラメータとの比を含む, 実変数域で早く収束する級数項の収束が遅くなる. その対策として, 波数 k^+ の増加に伴い, Ewald の任意パラメータの大きく取ることで, 比較的高周波の問題においても収束速度を改善できる (12). 詳細は, 文献 (11, 12) を参照されたい.

3. 高速直接解法

3.1. Martinsson-Rokhlin 型解法の基本的な考え方

本研究で用いる Martinsson-Rokhlin 型解法による高速化の基本的な考え方を述べる. 積分方程式 (6), (11) に現れる基本解 $G^-(x-y)$ および周期 Green 関数 $G^+(x-y)$ は, 評価点 x と積分点 y との距離 $|x-y|$ が大きいとき滑らかである. そのため, 遠くのすべての境界要素同士の相互影響を厳密に評価する必要はなく, 代表的な境界要素同士の相互影響を評価しておけば, 残りの影響は補間によって求めればよい. この代表的な境界要素をスケルトンと呼び, 境界要素のスケル

トン化の概念図を Fig.2 に示す.

Martinsson-Rokhlin 型の直接解法では, interpolative decomposition (13) (ID) と呼ばれる, スケルトンを用いた係数行列の低ランク近似手法を用いる. ID を計算するためには, proxy と呼ばれる局所的な仮想境界を用いた高速化手法と rank-revealing QR 分解 (14) (rrQR 分解) とを用いる. proxy の適用は個々の問題の特性を考慮して行う必要があり, Burton-Miller の積分方程式に對した proxy の具体的な適用方法は節 3.3 にて述べる.

3.2. Burton-Miller の積分方程式に對した Martinsson-Rokhlin 型解法の定式化

ID による線形方程式の非対角部分の低ランク近似に基づき, 線形方程式を多階層に圧縮して解く Martinsson-Rokhlin 型解法について述べる. 式 (11) を離散化した線形方程式を $Ax = f$ とおき, A , x , f はそれぞれ次の通りとする.

$$A = \begin{pmatrix} (\mathcal{D}^+ - \frac{I}{2}) + \alpha \mathcal{N}^+ & -\varepsilon^+(S^+ + \alpha(\mathcal{D}^{*+} + \frac{I}{2})) \\ (\mathcal{D}^- + \frac{I}{2}) & -\varepsilon^- S^- \end{pmatrix} \\ x = \begin{pmatrix} u \\ q \end{pmatrix}, \quad f = \begin{pmatrix} -u^I - \alpha \frac{\partial u^I}{\partial n} \\ 0 \end{pmatrix}$$

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, I は単位行列である.

ここで, 境界 Γ に例えば二分木構造を導入することで, 境界 Γ をいくつかのセグメントに分割すると, その i 番目の行ブロックに関する上記の線形方程式は次のようになる.

$$A_i x_i + \sum_{j \neq i} A_{ij} x_j = f_i \quad (12)$$

ここに i, j は整数であり, セグメント番号を表し, A_i, A_{ij} はそれぞれ線形方程式の対角ブロック行列および非対角ブロック行列である. このとき, A_{ij} を ID を用いて,

$$A_i x_i + \sum_{j \neq i} U_i R_{ij} V_j x_j = f_i \quad (13)$$

と低ランク近似する. ここに, $A_i, R_{ij}, U_i, V_j, x_i, f_i$ はそれぞれ次式の通りである.

$$A_i = \begin{pmatrix} (\mathcal{D}_i^+ - \frac{I}{2}) + \alpha \mathcal{N}_i^+ & -\varepsilon^+(S_i^+ + \alpha(\mathcal{D}_i^{*+} + \frac{I}{2})) \\ (\mathcal{D}_i^- + \frac{I}{2}) & -\varepsilon^- S_i^- \end{pmatrix} \\ R_{ij} = \begin{pmatrix} \mathcal{D}_{p_i^1 p_j^3}^+ + \alpha \mathcal{N}_{p_i^1 p_j^3}^+ & -\varepsilon^+(S_{p_i^1 p_j^4}^+ + \alpha \mathcal{D}_{p_i^1 p_j^4}^{*+}) \\ \mathcal{D}_{p_i^2 p_j^3}^- & -\varepsilon^- S_{p_i^2 p_j^4}^- \end{pmatrix} \\ U_i = \begin{pmatrix} U_{p_i^1} \\ U_{p_i^2} \end{pmatrix}, \quad V_j = \begin{pmatrix} V_{p_j^3} \\ V_{p_j^4} \end{pmatrix}$$

$$x_i = \begin{pmatrix} u_i \\ q_i \end{pmatrix}, \quad f_i = \begin{pmatrix} -u_i^I - \alpha \frac{\partial u_i^I}{\partial n} \\ 0 \end{pmatrix}$$

また R_{ij} はスケルトン同士の影響の評価行列であり, A_{ij} から選ばれたいくつかの行 p_i^1, p_i^2 および列 p_j^3, p_j^4 に対応する A_{ij} の成分から構成される. U_i および V_j は, ID により作成された行列であり, その成分は R_{ij} を補間して A_{ij} を計算するための係数である.

式 (13) の両辺に $V_i A_i^{-1}$ を左から乗じ, さらに $\tilde{A}_i \equiv (V_i A_i^{-1} U_i)^{-1}$ を左から乗じることにより次式のように圧縮する.

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

ここに $y_i \equiv V_i x_i$ である. ここで, R_{ij} が元の線形方程式のスケルトンであることから, 式 (14) は隣合うセグメントを結合して番号を振り直し, 線形方程式の行, 列ブロックを並べ替えることで, 式 (12) と同様に再度圧縮可能となる. 以上のアルゴリズムを繰り返し適用し, 係数行列が十分圧縮された段階で式 (14) の解 y_i を求め, 次式

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

を再帰的に用いることで, 元の式 (12) の解 x_i を求める.

3.3. proxy を用いた高速化手法の適用方法

proxy を用いて U_i, V_j を具体的に構成する方法を考える. 以下では, 簡単のため U_i, V_j の添字を省略して U, V と書く.

3.3.1. V の構成方法

まず V の構成方法を考える. Fig.3 に示すように, 境界 Γ を分割して得られるあるセグメント Γ_1, Γ_1 を囲む仮想的な局所境界 Γ_p および Γ_p の内側に含まれる Γ から Γ_1 を除いた部分である Γ_p' を考える. ここに, Γ_p はその外部との相互影響を代理する役割から proxy と呼ばれる. Γ_1 が $\Gamma_p \cup \Gamma_p'$ に与える影響を, Burton-Miller の積分方程式の作用素と同様になるよう, 次式のように評価した行列を M_V とする.

$$M_V = \begin{pmatrix} D^+ + \alpha N^+ & -\varepsilon^+(S^+ + \alpha D^{*+}) \\ D^- & -\varepsilon^- S^- \end{pmatrix}_{\Gamma_p \cup \Gamma_p', \Gamma_1}$$

ここに, $[\Gamma_p \cup \Gamma_p', \Gamma_1]$ は Γ_p および Γ_p' に評価点 x を置き, Γ_1 上に積分点 y を置くことを意味し, 次式のように, M_V の左半分を M_V^L , 右半分を M_V^R とする.

$$M_V^L = \begin{pmatrix} D^+ + \alpha N^+ \\ D^- \end{pmatrix}_{\Gamma_p \cup \Gamma_p', \Gamma_1}$$

$$M_V^R = \begin{pmatrix} -\varepsilon^+(S^+ + \alpha D^{*+}) \\ -\varepsilon^- S^- \end{pmatrix}_{\Gamma_p \cup \Gamma_p', \Gamma_1}$$

このとき, M_V^L を次のように rrQR 分解して変形する.

$$\begin{aligned} M_V^L P^L &= \begin{pmatrix} Q_{V_1}^L & Q_{V_2}^L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_{V_1}^L & R_{V_2}^L \\ & R_{V_3}^L \end{pmatrix} \\ &\approx Q_{V_1}^L R_{V_1}^L \left(I \quad (R_{V_1}^L)^{-1} R_{V_2}^L \right) \quad \because \|R_{V_3}^L\| \approx 0 \\ M_V^L &\approx Q_{V_1}^L R_{V_1}^L ((P^L)^T \quad (R_{V_1}^L)^{-1} R_{V_2}^L (P^L)^T) \end{aligned}$$

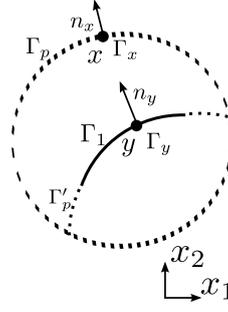


Fig. 3 Evaluation of V

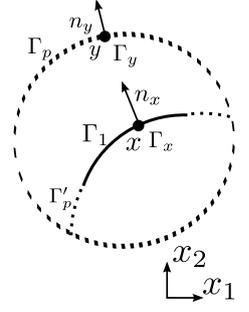


Fig. 4 Evaluation of U

ここに P^L は置換行列, $Q_{V_1}^L, Q_{V_2}^L$ はそれぞれ直交行列のブロック行列, $R_{V_1}^L, R_{V_2}^L, R_{V_3}^L$ はそれぞれ上三角行列のブロック行列である. 上式より V_{p^3} は,

$$V_{p^3} = ((P^L)^T \quad (R_{V_1}^L)^{-1} R_{V_2}^L (P^L)^T)$$

と得られる. 同様に V_{p^4} は M_V^R の rrQR 分解により得られる.

3.3.2. U の構成方法

次に, U の構成方法は次の通りである. Fig.4 において, $\Gamma_p \cup \Gamma_p'$ が Γ_1 に与える影響を次式のように評価した行列をそれぞれ M_U^+, M_U^- とする.

$$M_U^+ = \left(\frac{i}{4} \frac{\partial^2}{\partial n_x \partial n_y} H_0^{(1)}(k^+ |x - y|) \right)_{\Gamma_1, \Gamma_p \cup \Gamma_p'}$$

$$M_U^- = \left(\frac{i}{4} H_0^{(1)}(k^- |x - y|) \right)_{\Gamma_1, \Gamma_p \cup \Gamma_p'}$$

ここに M_U^+ は, 文献⁽⁷⁾ と同様の考え方により, Γ_p 部分の影響が大きく現れるように選んだ. 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. このとき, M_U^+ を rrQR 分解して次式のように変形する.

$$\begin{aligned} (M_U^+)^T P^+ &= \begin{pmatrix} Q_{U_1}^+ & Q_{U_2}^+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_{U_1}^+ & R_{U_2}^+ \\ & R_{U_3}^+ \end{pmatrix} \\ &\approx Q_{U_1}^+ R_{U_1}^+ \left(I \quad (R_{U_1}^+)^{-1} R_{U_2}^+ \right) \quad \because \|R_{U_3}^+\| \approx 0 \\ M_U^+ &\approx ((P^+)^T \quad (R_{U_1}^+)^{-1} R_{U_2}^+ (P^+)^T) (Q_{U_1}^+ R_{U_1}^+)^T \end{aligned}$$

ここに P^+ は置換行列, $Q_{U_1}^+, Q_{U_2}^+$ はそれぞれ直交行列のブロック行列, $R_{U_1}^+, R_{U_2}^+, R_{U_3}^+$ はそれぞれ上三角行列のブロック行列である. 上式より $U_{p_1^1}$ は, 次のように得られる.

$$U_{p_1^1} = ((P^+)^T \quad (R_{U_1}^+)^{-1} R_{U_2}^+ (P^+)^T)$$

同様に $U_{p_2^2}$ も M_U^- の rrQR 分解により得られる.

4. 数値計算結果

本研究では 1 周期 transmission 問題に対し, 提案手法である Burton-Miller の積分方程式を用いた定式化による高速直接解法と著者らの先行研究で提案した multi-trace 境界積分方程式を用いた定式化による高速直接解法⁽⁴⁾ (以後, 従来法と呼ぶ) とを用いて数値計算を行い, 精度や速度を比較した. ここに, 各数値計算に共通の条件は次の通り. 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, すべ

て逐次計算とした．また入射波 u^I は平面波とし，外部の誘電率 $\epsilon^+ = 1$ とした．leaf の要素数は 100 で固定とし，rrQR 分解の打ち切り項数は 50 で固定とした．Ewald の方法は，計算中の級数に対する新たな項の絶対値の比が 10^{-9} 未満の場合に収束したと判定した．また行列の木構造には二分木を用い，その根を level 0 としたとき，level 1 まで圧縮した．

なお，節 4.3 では Calderon の式を考慮した PMCHWT 定式化⁽¹⁵⁾ による周期多重極法 (pFMM) との比較も行なった．多重極展開の項数は文献⁽¹⁶⁾ の経験式を用いて決定し，反復解法には GMRES を用い，収束判定誤差は 10^{-8} とした．

また，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，Burton-Miller および PMCHWT では $2N$ ，multi-trace では $4N$ となることから，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．

4.1. 提案手法の妥当性の確認

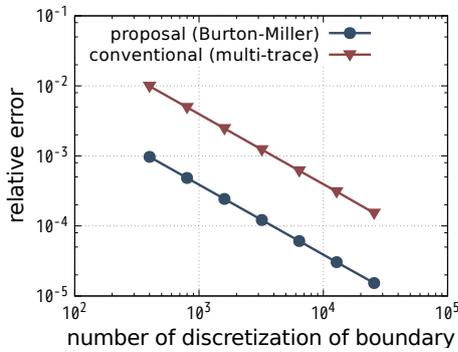


Fig. 5 Confirmation of the validity

まず実装の妥当性を確認する．ユニットセルに半径 0.3 の円形散乱体を配置し，周波数 $\omega = 3.0$ ，内部の誘電率 $\epsilon^- = 1$ とした．このとき境界上での解析解は入射波そのものとなる．境界の分割数 $N = 100 \times 2^i (i = 2, 3, \dots, 8)$ とした場合の数値計算結果と解析解との相対誤差を Fig.5 に示す．同図から，提案手法は内外のコントラストが低い場合にも ($\epsilon^+ = \epsilon^-$)，multi-trace 積分方程式の場合と同様にアルゴリズムが破綻しない事がわかる．また，提案手法では，境界の分割数が倍になると，相対誤差が 1/2 になっていることがわかる．

またユニットセルに Fig.6 に示す星型散乱体を配置し，周波

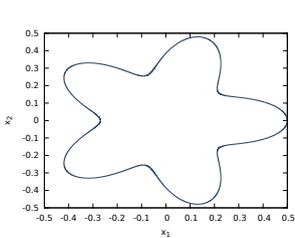


Fig. 6 Star shaped scatter

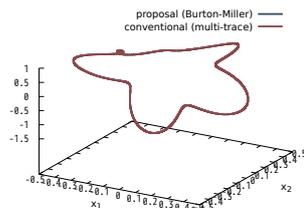


Fig. 7 Plot of $\text{Re}(u)$ on boundary

数 $\omega = 3.0$ ，内部の誘電率 $\epsilon^- = 2$ ，境界の分割数 $N = 100 \times 2^7$ として提案手法および従来法によって求めた境界上での u の実部を Fig.7 に示す．同図から，提案手法と従来法とで得られた結果が一致していることがわかる．以上の 2 つの数値計算結果から，提案手法の妥当性が確認できた．

4.2. 境界の分割数を変化させたときの計算時間

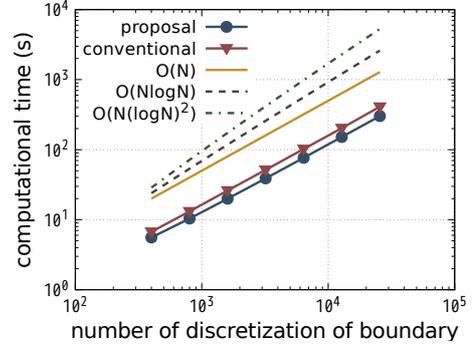


Fig. 8 Comparison of computational times

ユニットセルに Fig.6 に示す星型散乱体を配置し，境界の分割数 $N = 100 \times 2^i (i = 2, 3, \dots, 8)$ ，周波数 $\omega = 3.0$ ，内部の誘電率 $\epsilon^- = 2$ としたときの，計算時間を Fig.8 に示す．提案手法では従来法に比較して計算時間を約 25 % 短縮できていた．提案手法の未知数は従来法の半分であるが，計算時間が半分とならない理由は，周期 Green 関数の計算負荷が大きいことと，周期的なポテンシャルの評価回数がいずれの解法でも同一であることにある．

4.3. 物質パラメータを変化させたときの計算時間

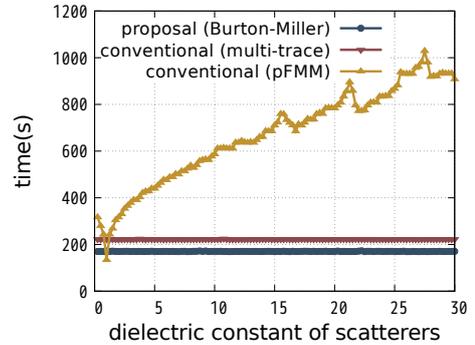


Fig. 9 Interior dielectric constant ϵ^- vs time

ユニットセルに半径 0.3 の円形散乱体を配置し，周波数 $\omega = 2\pi$ ，境界の分割数 $N = 100 \times 2^7$ とし，内部の誘電率 ϵ^- を 0.25 から 30 まで 0.25 きざみで変化させた際の計算時間を Fig.9 に示す．同図から，提案手法と従来法との両者の計算時間は，反復解法である pFMM に比較して係数行列のスペクトル特性の変化の影響をほとんどを受けないことが確認できる．また，すべての内部の誘電率パラメータに対して，使用した各条件の下では，提案手法の方が従来法よりも計算時間が短いことがわかる．なお pFMM と高速直接解法との計算精度が同一となるように計算条件を調整することは極めて困

難であるため、Fig.9 の結果の解釈には注意が必要である。

4.4. 周波数を変化させたときの計算時間

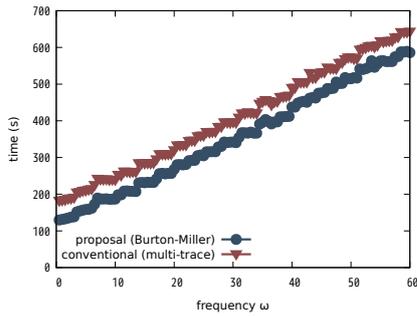


Fig. 10 Omega vs time

ユニットセルに Fig.6 に示す星型散乱体を配置し、内部の誘電率 $\epsilon^- = 2$ 、境界の分割数 $N = 100 \times 2^7$ とし、周波数 ω を 0.5 から 60 まで 0.5 きざみで変化させた時の計算時間を Fig.10 に示す。同図から、すべての周波数において、従来法に比較して提案手法の方が計算時間が短いことがわかる。また、提案手法と従来法との両者において、周波数が大きくなるに従って計算時間が増加している原因は、Ewald の方法で計算される周期 Green 関数の級数の収束が、周波数が大きくなるに従って遅くなるためである。

5. おわりに

2次元 Helmholtz 方程式の 1 周期 transmission 問題に対する Martinsson-Rokhlin 型の高速直接解法の性能改善を目的として、著者らが先行研究で用いた multi-trace 境界積分方程式を Burton-Miller の積分方程式に置き換えた定式化を行った。さらに、Burton-Miller の積分方程式に対応した proxy の適用方法を示した。提案した手法を用いた数値計算により、得られた結果および知見は次の通りである。

- 解析解および従来法の数値解との比較により、Burton-Miller の積分方程式を用いた解法の妥当性を確認した。
- 計算時間に関しては、multi-trace 境界積分方程式を用いた場合よりも、Burton-Miller の積分方程式を用いた場合の方が計算時間を短縮できた。
- 係数行列のスペクトル特性の変化に対して、高速直接解法の計算時間は、反復解法に比較してほとんど影響を受けないことを確認した。

今後の課題としては、より現実的な問題や 3次元問題への提案手法の適用、Nyström 法の適用による数値積分の高速化、数値解の高精度化などが挙げられる。

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) PG. Martinsson and V. Rokhlin, A fast direct solver for boundary integral equations in two dimensions, *J. Comp. Phys.*, 205, 1–23, 2005.
- (4) 松本安弘, 西村直志, 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, *計算数理工学論文集*, 17, 101–106, 2017.
- (5) 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.
- (6) R. Hiptmair and C. Jerez-Hanckes, Multiple traces boundary integral formulation for Helmholtz transmission problems, *Adv. Comput. Math.*, 37, 39–91, 2012.
- (7) 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*, 16, 97–102, 2016.
- (8) A. J. Burton and G. F. Miller, The application of integral equation methods to the numerical solution of some exterior boundary-value problems, *Proc. Roy. Soc. London, Ser. A*, 323, 201–210, 1971.
- (9) R. Misawa, K. Niino and N. Nishimura, Boundary integral equations for calculating complex eigenvalues of transmission problems, *SIAM J. Appl. Math.*, 77, 770–788, 2017.
- (10) 三澤亮太, 西村直志, 2次元 Helmholtz 方程式の transmission 問題に対する種々の境界積分方程式の性質について, 第 30 回計算力学講演会講演集, 276, 2017.
- (11) CM. Linton, The Green's function for the two-dimensional Helmholtz equation in periodic domains, *Journal of Engineering Mathematics*, 33, 377–401, 1998.
- (12) F. Capolino, DR. Wilton, WA. Johnson, Efficient computation of the 2-D Green's function for 1-D periodic structures using the Ewald method, *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 53, 2977–2984, 2005.
- (13) H. Cheng, Z. Gimbutas, PG. Martinsson, V. Rokhlin, On the compression of low rank matrices, *SIAM Journal on Scientific Computing*, 26, 1389–1404, 2005.
- (14) M. Gu, SC. Eisenstat, Efficient algorithms for computing a strong rank-revealing QR factorization, *SIAM Journal on Scientific Computing*, 17, 848–869, 1996.
- (15) K. Niino and N. Nishimura, Preconditioning based on Calderon's formulae for periodic fast multipole methods for Helmholtz' equation, *J. Comp. Phys.*, 231, 66–81, 2012.
- (16) R. Coifman, V Rokhlin, S. Wandzura, The fast multipole method for the wave equation: A pedestrian prescription, *IEEE Antennas and Propag. Mag.*, 35, 7–12, 1993.