

物質パラメータ比が比較的大きな transmission 問題における 2次元 Helmholtz 方程式の高速直接解法に適する積分方程式の考察

CONSIDERATION OF INTEGRAL EQUATIONS FOR THE FAST DIRECT SOLVER OF THE TWO DIMENSIONAL HELMHOLTZ TRANSMISSION PROBLEMS WITH RELATIVELY HIGH CONTRAST MATERIAL PARAMETER RATIO

松本 安弘¹⁾

Yasuhiro MATSUMOTO

1) 東京工業大学学術国際情報センター (〒 152-8550 東京都目黒区大岡山 2-12-1-I8-21, E-mail: matsumoto@gsic.titech.ac.jp)

We focused on the transmission problems of the 2D Helmholtz equations and investigated the applicability of the fast direct solver of boundary element method when there is a high contrast material parameter ratio between the interior and exterior domains. For this study, we have proposed a modified version of the Burton-Miller integral equation, which is expected to compute proxy-based interpolation with high accuracy since it has well-suited arrangement of integral operators. A proposed fast direct solver outperforms the conventional method in computational speed. However its numerical accuracy is inferior, and the reasons behind it could not be provided in this study. Additionally, through our numerical experiments, we have highlighted that there might not be any advantages in utilizing the PMCWHT integral equation within the framework of fast direct solvers.

Key Words: Fast direct solver, Skeletonization, Proxy method, Boundary integral equation, Helmholtz equation

1. 序論

物理現象の数値シミュレーション手法は物理や工学を支える重要な技術であり、手法の適用領域の拡大や効率化は重要な課題である。その数値シミュレーション手法の1つに境界要素法と反復法とを組み合わせた数値解法⁽¹⁾がある。境界要素法は電磁波動散乱問題などの無限領域を含む物理現象のシミュレートにおいて優れた手法であるが、反復法と組み合わせるとその性質上、常に高速なわけではなく問題の条件によっては膨大な計算時間を要する。そのような例としては、前処理法による反復法の収束の加速が難しい場合や、離散化後に得られる線型方程式が同一の係数行列に対して多数の右辺を有する場合は該当する。これらの問題条件であっても高速に求解できるようにするために、反復解法に依存しない高速「直接」解法と境界要素法とを組み合わせた解法が目目されており、様々な手法が^(2, 3, 4)が提案されている。本研究では実装が簡易な一方で高速である skeletonization⁽³⁾と呼ばれる手法を用いた高速直接境界要素法を考える。

高速直接境界要素法は発展途上の手法であり、効率や精度

を損なうことなく適用する方法が判明している問題に限られていることが課題である。特に、普遍的な境界条件の1つである transmission 問題における高速直接境界要素法の検討は十分ではない。ここに transmission 問題とは、例えばガラス玉のような透過性の散乱体に入射した光等が反射や屈折等され形成される場を求める問題である。

著者らの研究グループでは高速直接境界要素法を transmission 問題へ適用拡大する方法を検討してきた。skeletonization 法では解法の中で必要となる補間行列の計算を $O(N^2)$ から $O(N)$ (N は未知数の数) へ加速するために proxy 法⁽³⁾を用いる。ただし transmission 問題の積分方程式においては、proxy 法により複数の積分作用素を1つの補間行列で同時に近似する必要があるため、proxy 法を適切に実行できる作用素配置を持つ積分方程式の適用が重要である。この観点から、散乱体境界の内側と外側の積分作用素が分離されており、proxy 法を破綻なくできる multi-trace 積分方程式を用いることにより、skeletonization を transmission 問題へ拡張する方法を示した⁽⁵⁾。その後、multi-trace 積分方程式よりも未知数の数が少ない Burton-Miller の積分方程式を用いた効率のよい手法

を提案し、計算時間の短縮を確認した⁽⁶⁾。しかし、Burton-Millerの積分方程式は multi-trace 積分方程式と異なり、散乱体境界の内側と外側の積分作用素が高速直接解法の観点で完全には分離されていない。そのため内外の物質パラメータのコントラスト比が大きき場合には、proxy法の精度の悪化や計算効率の低下が生じる恐れがある。

本研究では2次元 Helmholtz 方程式の transmission 問題を対象とし、対応する積分方程式の1つである Burton-Millerの積分方程式を変形し、散乱体境界の内側と外側の積分作用素を(高速直接解法の観点で)分離した定式化を示す。この変形型 Burton-Millerの積分方程式に基づく高速直接境界要素法を実装し、これまでに提案した手法と数値解の精度等を比較し、比較的高コントラストな物質パラメータの計算条件における適用性を検証する。また通常の Burton-Millerの積分方程式の高速直接境界要素法で用いた proxy法の適用方法⁽⁶⁾を広く用いられている PMCHWT 定式化の積分方程式に素朴に応用した場合の解法の性能を合わせて検証し、高速直接解法においては PMCHWT 定式化以外の積分方程式の方が優れた性能を持つことを数値実験により指摘する。

2. 定式化

2.1. 2次元 Helmholtz 方程式の transmission 問題

2次元 Helmholtz 方程式の2領域 transmission 問題は次の通り定式化される。Fig 1のように、2次元の無限領域($x = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2$)の中に滑らかな境界 Γ を持つ有界領域の散乱体 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

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

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

を満たす解 u を、境界 Γ 上での境界条件

$$u^+(x) = u^-(x), \quad \text{on } \Gamma \quad (1)$$

$$q^+(x) = q^-(x), \quad \text{on } \Gamma \quad (2)$$

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、 u^I は入射波であり、 q^\pm は、

$$q^+(x) = \frac{1}{\varepsilon^+} \frac{\partial u^+}{\partial n}(x)$$

$$q^-(x) = \frac{1}{\varepsilon^-} \frac{\partial u^-}{\partial n}(x)$$

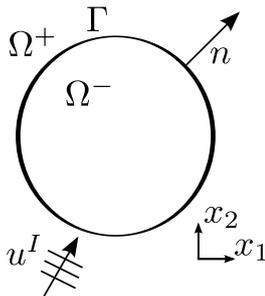


Fig. 1: Domain of transmission problem.

であり、 Ω^\pm において $k^\pm = \omega\sqrt{\varepsilon^\pm\mu^\pm}$ は波数、 ω は周波数、 ε^\pm は比誘電率、 μ^\pm は比透磁率であり、 u^\pm はそれぞれ Ω^\pm から Γ への u の極限值であり、 n は Γ から Ω^+ に向けた単位法線ベクトルとする。

なお本研究では比誘電率と比透磁率はそれぞれの領域にわたって一様であるとした、

2.2. 対応する境界積分方程式

節2.1に記述した問題に対応する積分方程式である、multi-trace 積分方程式、Burton-Millerの積分方程式、変形型 Burton-Millerの積分方程式、PMCHWT 定式化の積分方程式を示す。なお本研究では積分方程式は区分一定要素を用いた選点法により離散化した。

2.2.1. multi-trace 積分方程式

multi-trace 積分方程式は、Hiptmair and Hanckes⁽⁷⁾により提案された transmission 問題に対応する積分方程式であり、行列表示すると

$$\begin{pmatrix} \mathcal{D}^+ & -\varepsilon^+ \mathcal{S}^+ & -\frac{I}{2} & \\ \frac{1}{\varepsilon^+} \mathcal{N}^+ & -\mathcal{D}^{*+} & & -\frac{I}{2} \\ \frac{I}{2} & & \mathcal{D}^- & -\varepsilon^- \mathcal{S}^- \\ & \frac{I}{2} & \frac{1}{\varepsilon^-} \mathcal{N}^- & -\mathcal{D}^{*-} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^+(x) \\ q^+(x) \\ u^-(x) \\ q^-(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -u^I(x) \\ -\frac{1}{\varepsilon^+} \frac{\partial u^I}{\partial n}(x) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3)$$

のように表される。ここに、 \mathcal{S}^\pm 、 \mathcal{D}^\pm 、 $\mathcal{D}^{*\pm}$ 、 \mathcal{N}^\pm は、それぞれ

$$\begin{aligned} \mathcal{S}^\pm v(x) &= \int_{\Gamma} G^\pm(x-y)v(y) dS_y \\ \mathcal{D}^\pm v(x) &= \int_{\Gamma} \frac{\partial G^\pm(x-y)}{\partial n_y} v(y) dS_y \\ \mathcal{D}^{*\pm} v(x) &= \int_{\Gamma} \frac{\partial G^\pm(x-y)}{\partial n_x} v(y) dS_y \\ \mathcal{N}^\pm v(x) &= \text{p.f.} \int_{\Gamma} \frac{\partial^2 G^\pm(x-y)}{\partial n_x \partial n_y} v(y) dS_y \end{aligned} \quad (4)$$

で定義される層ポテンシャル、 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 $x \in \mathbb{R}^2$ 、 $y \in \mathbb{R}^2$ における法線微分を表し、 G^\pm は

$$G^\pm(x-y) = \frac{i}{4} H_0^{(1)}(k^\pm |x-y|)$$

で表される波数 k^\pm の2次元 Helmholtz 方程式の基本解である。ここに、 $H_m^{(1)}$ は m 次の第1種 Hankel 関数であり、 i は虚数単位である。また、式(4)の積分は発散積分の有限部分の意味である。

skeletonization 法では、行列表示された積分作用素の1行もしくは1列に1つの補間行列を対応させて係数行列の低ランク近似を行う。multi-trace 積分方程式は式(3)の通り、波数の異なる内外の積分作用素が(高速直接解法の観点で)行と列とが分離されている定式化になっており、 ε^\pm のコント

ラスト比が比較的大きな場合でも, proxy 法で補間行列を破綻なく計算でき, 高速直接境界要素法で得られる数値解の精度が良いと想定される.

なお「積分作用素が行と列とで分離されている」ことはより正確に記述すると「積分作用素を並べた行列の任意の行または列に含まれる作用素は, Γ の内部もしくは外部の波数のどちらかのみから構成されている」ことを意味する. 本論文の以降の部分では, 積分作用素の行と列とでの分離という表現は上記の意味で用いる.

2.2.2. Burton-Miller の積分方程式

Burton-Miller の積分方程式は散乱体の外側における解の積分表現に Burton-Miller 法⁽⁸⁾を用い, 散乱体の内側における解の積分表現に Green 公式を用い, それぞれを境界 Γ へ極限移行し境界条件 (1)-(2) により連立して得られる境界積分方程式である. 行列表示すると

$$\begin{pmatrix} (\mathcal{D}^+ - \frac{I}{2}) + \alpha \mathcal{N}^+ & -\varepsilon^+(S^+ + \alpha(\mathcal{D}^{*+} + \frac{I}{2})) \\ (\mathcal{D}^- + \frac{I}{2}) & -\varepsilon^- S^- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(x) \\ q(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -u^I(x) - \alpha \frac{\partial u^I(x)}{\partial n} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5)$$

となる. ここに α は Burton-Miller 法の結合定数であり, 本研究では i/k^+ とした. 三澤ら⁽⁹⁾ は Burton-Miller の積分方程式は定式化により導入される (複素周波数の) 見かけの固有値分布の性質がよいことを指摘しており, 実数周波数において精度の良い解が得られると期待される.

一方で高速直接解法の観点からは, 式 (5) は行方向には外側と内側の積分作用素が分離できているが, 列方向には内外の積分作用素が並んで配置されているため, $\varepsilon^-/\varepsilon^+$ の比が大きな場合には proxy 法で計算する補間行列がより多くのランクを必要とし計算効率が低下するか, 計算効率の優先によりランクを小さくすると計算精度が悪化するなど proxy 法が破綻する恐れがある.

2.2.3. 変形型 Burton-Miller の積分方程式

Burton-Miller の積分方程式 (5) を変形し, 内外の積分作用素の (高速直接解法の観点での) 分離を試みる. 散乱体の内側において境界 Γ 上の二重層ポテンシャル密度 ϕ によって解 $u(x)$ が

$$u(x) = S^- \phi(x) \quad (x \in \Omega^-) \quad (6)$$

と構成できると仮定し, 境界 Γ に極限移行した式およびその法線微分

$$u(x) = S^- \phi(x) \quad (7)$$

$$q(x) = (\mathcal{D}^{*-} + \frac{I}{2})\phi(x) \quad (8)$$

を考える. Green 公式に基づく解の積分表現ではなく式 (7)-(8) を用いることが修正点である. 散乱体の外側では通常の Burton-Miller の積分方程式と同様に Burton-Miller 法に基づ

く解の積分表現を Γ に極限移行した

$$\begin{aligned} \left((\mathcal{D}^+ - \frac{I}{2}) + \alpha \mathcal{N}^+ \right) u(x) + \left(-\varepsilon^+(S^+ + \alpha(\mathcal{D}^{*+} + \frac{I}{2})) \right) q(x) \\ = -u^I(x) - \alpha \frac{\partial u^I(x)}{\partial n} \end{aligned} \quad (9)$$

を用いる. 式 (7)-(9) を境界条件 (1)-(2) により連立することにより変形型 Burton-Miller の積分方程式が得られる. これを行列表示すると

$$\begin{pmatrix} (\mathcal{D}^+ - \frac{I}{2}) + \alpha \mathcal{N}^+ & -\varepsilon^+(S^+ + \alpha(\mathcal{D}^{*+} + \frac{I}{2})) \\ -I & S^- \\ & -I & \frac{1}{\varepsilon^-}(\mathcal{D}^{*-} + \frac{I}{2}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(x) \\ q(x) \\ \phi(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -u^I(x) - \alpha \frac{\partial u^I(x)}{\partial n} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (10)$$

となる. 変形型 Burton-Miller の積分方程式は通常の Burton-Miller の積分方程式と同様, 実数周波数に見かけの固有値はないと考えられる.

式 (10) の左辺から, 行, 列ともに内外の積分作用素の配置が分離できていることがわかる. このため $\varepsilon^-/\varepsilon^+$ が大きな場合にも multi-trace 積分方程式 (3) と同様に proxy 法を破綻なく実施でき, 通常の Burton-Miller の積分方程式 (5) よりも数値解の精度等で有利であると想定される.

なお一重層ポテンシャル密度 ϕ ではなく二重層ポテンシャル密度を用いて解の積分表現を仮定しても変形型 Burton-Miller の積分方程式は定式化可能である. しかしその場合超特異性を持つ二重層ポテンシャルの法線微分 \mathcal{N}^- を計算する必要が生じるため, 本研究では一重層ポテンシャル密度 ϕ を用いた.

2.2.4. PMCHWT 定式化の積分方程式

PMCHWT 定式化 (Poggio-Miller-Chang-Harrington-Wu-Tsai) の積分方程式⁽¹⁰⁾ は transmission 問題に広く用いられている定式化であり, 行列表示すると

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

となる. この式は 1 つの行, 列の中に波数の異なる内外の積分作用素が分離できていないだけでなく, 内外の積分作用素の和も存在するため, proxy 法を用いた補間行列の計算が適切に実行できないと想定される.

skeletonization のアルゴリズムの中で PMCHWT 定式化の積分方程式の内外の積分作用素を分離する修正を行った場合解法が破綻する⁽⁵⁾が, 補間行列のランクが非常に大きくなる可能性を無視すれば, 通常の Burton-Miller の積分方程式 (5) の場合の補間行列の計算法⁽⁶⁾を素朴に応用することで skeletonization の実行そのものは可能と考えられる. 本研究ではこの考えに基づき実装した PMCHWT 定式化に基づく高速直接境界要素法を比較対象として用いる.

2.3. skeletonization 法

高速直接解法の1つである skeletonization 法の概要について述べる。それぞれの積分方程式を離散化した線型方程式を代表して

$$Ax = f$$

と表すこととする。ここに $A \in \mathbb{C}^{N \times N}$, $x \in \mathbb{C}^N$, $f \in \mathbb{C}^N$, N は未知数の数である。境界 Γ を p 個のセグメントに分割し、1つのセグメントに含まれる選点に対応する未知数の数を n とすると、 $N = p \times n$ となる。このとき係数行列 A の非対角部分を何らかの行列分解等で構造的に低ランク近似することにより

$$Dx + URVx = f$$

と分解できると仮定する。ここに $D \in \mathbb{C}^{N \times N}$, $U \in \mathbb{C}^{N \times K}$, $V \in \mathbb{C}^{K \times N}$ はそれぞれそれぞれ $n \times n$, $n \times k$, $k \times n$ の大きさの対角ブロックのみにエントリを有する行列であり、 $K = p \times k$ ($k \ll n$) である。また $R \in \mathbb{C}^{K \times K}$ は非対角ブロックのみにエントリを有する行列であり、それぞれの非対角ブロックの大きさはすべて $k \times k$ である。このときに D , R , $VD^{-1}U$ にそれぞれ逆行列が存在するならば線型方程式を圧縮し

$$\tilde{A}y + Ry = \tilde{f} \quad (12)$$

のように変形できる。ここに $\tilde{A} = (VD^{-1}U)^{-1}$, $y = Vx$, $\tilde{f} = \tilde{A}VD^{-1}f$ である。なお R の逆行列はエントリを有する(非対角)ブロック行列ごとにも存在する必要がある。

上記の低ランク近似は補間分解⁽¹¹⁾などにより実行でき、補間分解に基づく高速直接解法は skeletonization と呼ばれる。補間分解を用いると U, V は補間行列となり、 R を補間してもとの係数行列 A の非対角部分を復元する。

もし行列 R がさらに

$$R = D' + U'R'V'$$

と A と同様の構造で低ランク近似できるときには、圧縮された線型方程式 (12) は再度圧縮できる。低ランク近似に補間分解を用いた場合には R は基本解がもつ遠くの境界要素同士の相互作用は滑らかであるという性質を保っているため、再帰的な線型方程式の圧縮が可能である。再帰的な圧縮により十分線型方程式 (12) のサイズが小さくなったとき、LU 分解等により y を求め、 y を

$$x = (D^{-1} - D^{-1}U\tilde{A}VD^{-1})f + D^{-1}U\tilde{A}y$$

により再帰的にもとの解 x へ復元する。

なお上記の定式化は Martinsson and Rokhlin⁽³⁾ が提案したアルゴリズムそのものではなく、Gillman ら⁽¹²⁾ が与えた解法の(別の方法による)証明過程に現れる式であり、本研究では上記の定式化を用いて数値計算を実施した。

2.4. 各定式化における proxy 法を用いた補間行列の計算法

節 2.3 で必要となる補間行列 U, V の計算のため、係数行列 A の非対角ブロックを(行ブロック, 列ブロックごとに)素

朴に補間分解すると、これには $O(N^2)$ の計算量が必要である。skeletonization 法全体を $O(N)$ で実行するために、 U, V の計算を $O(N)$ に加速する proxy 法⁽³⁾ が用いられる。

proxy 法とは注目する境界セグメントと遠方の境界要素との相互作用を局所的な相互作用を用いて代用する手法である。局所的な相互作用の計算に用いる局所的な仮想境界(とその内部の注目するセグメントの近傍要素を) proxy 境界と呼ぶ。proxy 境界とその内部の境界要素との相互作用の評価方法には任意性がある。本研究では文献⁽¹³⁾で用いた手法と同様の考え方で評価し、その要点は次の通りである。

- 行列表示した積分方程式(例えば(3))の係数行列の1つの行, 列ごとに同じ波数の積分作用素のみが含まれるときは次の方法で評価する。
 - 補間行列 U を計算するときには対応する波数の基本解 G^\pm を用いて相互作用を評価する。
 - 補間行列 V を計算するときには対応する波数の層ポテンシャル S^\pm の離散化版を用いて相互作用を評価する。
 - 上記の相互作用の評価は配置された積分作用素の種類に応じて法線微分を伴って評価する。法線微分の要否判断は考える層ポテンシャルの評価に高速多重極法を用いるとしたら、局所展開や多重極モーメントの計算に法線微分が必要かどうかにより判断する。ただし境界形状が直線に近い場合における補間行列の精度向上のため、 D^\pm や $D^{*\pm}$ の使用が自然な場合でも N^\pm を用いる⁽⁵⁾。同様に基本解の観測点もしくはソース点における法線微分が必要な場合には観測点とソース点の双方で法線微分して評価する。
 - 上記に該当しないときは行・列に配置された層ポテンシャルをそのまま評価する。

上記の考え方で評価した proxy 境界と注目する境界セグメントとの相互作用を主に列ピボット付き QR 分解により低ランク近似することで補間行列 U, V は計算される。

なお transmission 問題では積分方程式を行列表示した際の行・列ごとにそれぞれ別の補間行列 $U \cdot V$ が必要となる。そのため物質パラメータのコントラスト比が大きな場合には、境界 Γ の外側の層ポテンシャルと内側の層ポテンシャルの計算に使用する基本解の波数が異なるため、行・列ごとに同等の精度の補間行列とするために必要なランクも異なると考えられる。そこで本研究では補間行列の計算に用いる補間分解、つまり列ピボット付き QR 分解を通じた低ランク近似時に動的にランクを決定し、積分方程式を行列表示した際の行・列ごとに異なるランクの補間行列を用いることとした。例えば multi-trace 積分方程式(3)の係数行列部は4行×4列となっており、 j 番目の行・列の補間行列を U_j, V_j と表記すると、 U_1 のランクと U_2, U_3, U_4 のランクはそれぞれ別にとることができる。ただし式(12)の $\tilde{A} ((VD^{-1}U)^{-1})$ の逆行列

が存在する必要があるため、同じ j 番目の U_j のランクと V_j のランクは等しくなるようにした。また、一度決定した j 番目の U_j, V_j のランクは同一の圧縮階層では別の境界セグメントに対する補間行列の計算時にも用いた。

動的なランクの決定方法は次の通りである。列ピボット付き QR 分解により計算された三角行列の対角成分の最大値 r_{\max} に対して、三角行列の j 番目の対角成分 r_j との比が $|r_j|/r_{\max} > \epsilon$ を満たす r_j の数を補間行列のランクとした。ここに ϵ は事前に設定した列ピボット付き QR 分解の許容誤差である (ϵ は補間分解の誤差を間接的にコントロールするものであることに注意)。

この動的なランク決定は何らかの意味で精度を合わせた上で定式化ごとの性能を比較することを動機として導入した。実際、過去に実施した計算⁽¹³⁾では事前に決めた固定ランクに基づき補間行列 $U_j \cdot V_j$ を計算していたが、物質パラメータ比が大きな場合には Burton-Miller の積分方程式を用いた場合の数値計算精度が multi-trace 積分方程式を用いた場合のそれよりも悪化が激しい場合があった。しかしこのとき Burton-Miller の積分方程式を用いた場合の方が数値計算時間は短かった。そのため列ピボット付き QR 分解の許容誤差に基づき補間行列のランクを j 番目の行・列ごとに動的に決定することにより、skeletonization の数値計算時間を積分方程式の定式化ごとにより正当に比較できるようにした。

3. 数値実験

それぞれの積分方程式を用いて実装した高速直接境界要素法の性能を特に ϵ^-/ϵ^+ が比較的大きな場合に注目して検証する。検証対象は本論文で新たに提案する変形型 Burton-Miller の積分方程式 (10)(以降 modi. BM と呼称) および、既往の通常の Burton-Miller の積分方程式 (5)(以降 BM と呼称), multi-trace 積分方程式 (3)(以降 multi-trace と呼称), PMCHWT 定式化の積分方程式 (11)(以降 naive PMCHWT と呼称) それぞれの高速直接境界要素法と、通常の Burton-Miller 積分方程式に高速直接解法を用いない LU 分解による解法 (以降 non fast BM と呼称) である。

各数値実験に共通する計算条件は次の通りである。

- 境界形状は半径 2, 原点中心の正円。
- 入射波は $u^I = e^{ik^+(x_1 \sin 1 - x_2 \cos 1)}$ で表される平面波。
- $\omega = 10, \epsilon^+ = 1, \mu^\pm = 1$ 。
- 比較対象の参照解は平面波を円周上で Bessel 関数を用いて級数展開し、各次数の Bessel 関数入射波に対する解析解を重ね合わせ構成した。級数展開には 60 次の Bessel 関数まで用いた。

また共通する計算環境は次の通りである。

- 筑波大学のスーパーコンピュータ Pegasus システム (CPU: Intel Xeon Platinum 8468, 2.1GHz/48 コア) を用いた。
- 線型代数演算ライブラリとして Eigen⁽¹⁴⁾ を用いた。

- それぞれの数値計算にはプロセッサとして CPU 1 コアのみを使用し、MPI, OpenMP 等による並列化および Eigen 内部の CPU コア並列実行機能は使用していないが、Eigen 内部の SIMD 演算機能は用いた。

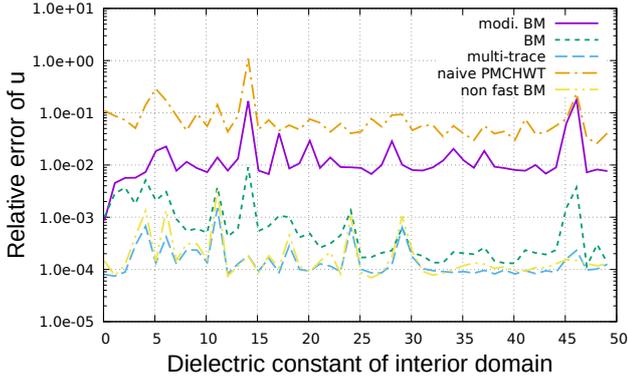
なお数値解の相対精度および計算時間は境界値の計算に関するものであり、内点計算は行っていない。また問題のサイズは定式化ごとに異なる未知数の数ではなく、選点法による離散化後の選点の数により議論する。

3.1. 物質パラメータのコントラスト比を広範囲に変化させたときの計算結果

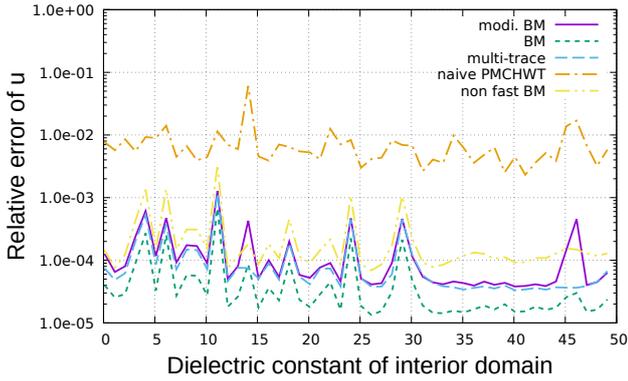
物質パラメータのコントラスト比の変化に対する各積分方程式を用いた高速直接解法の応答を俯瞰できるように、内側領域の比誘電率 ϵ^- を 0.1 から 50 付近まで変化させ計算を実施した。選点の数は高速直接解法を用いた場合は 12800, 用いない場合 (non fast BM) は計算時間の都合から 3200 とした。また補間分解時の列ピボット付き QR 分解の許容誤差 ϵ は 10^{-8} と 10^{-12} の 2 通りとした。

Fig. 2(a) に $\epsilon = 10^{-8}$ としたときの参照解に対する各解法の数値解の u 部分の相対誤差, Fig. 2(b) に $\epsilon = 10^{-12}$ としたときの参照解に対する各解法の数値解の u 部分の相対誤差をそれぞれ示す。相対誤差は離散化に用いた選点上でそれぞれ参照解の値を計算した参照解ベクトル u_{ref} と数値解ベクトル u との間の Euclid ノルム相対誤差として求めた。これ以降の計算を含め、 q の相対誤差は u のそれと傾向が同じであったため図を省略した。なお、高速化なしの場合の各積分方程式の精度は今回の計算条件では $\text{BM} > \text{modi. BM} = \text{multi-trace} > \text{PMCHWT}$ の順であったことを参考として付記しておく。これらの transmission 問題に対応した各積分方程式の (複素) 固有値に影響を受けない波数での精度を包括的に比較議論した文献は著者の知る限りでは見当たらない。Fig. 2(a), 2(b) から、各高速直接解法は ϵ を 10^{-8} から 10^{-12} へ減少させることにより数値解の相対誤差を減少させることができているとわかる。non fast BM は解法の過程で補間分解を実行しないため変化していない。ただし、本研究で新たに提案した modi. BM は想定と異なり、常に BM よりも相対誤差が大きい結果となった。特に $\epsilon = 10^{-12}$ においては BM は proxy 法を高精度に実行できると想定された multi-trace と modi. BM の双方よりも相対誤差が小さい。現段階ではこの理由を説明する考察ができていないが、補間行列のランクを固定していた過去の計算⁽¹³⁾の際の挙動とは異なり、少なくとも本研究の計算条件では BM は列ピボット付き QR 分解の許容精度を調整し補間行列のランクを動的に決定することで、物質パラメータのコントラスト比が大きな場合でも数値解の精度を維持することができた。

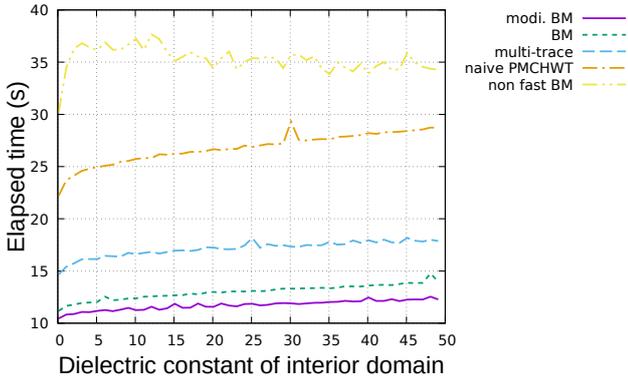
Fig. 2(c) に示す $\epsilon = 10^{-12}$ のときの計算時間を見ると、各高速直接解法の計算速度は $\text{modi. BM} > \text{BM} > \text{multi-trace} > \text{PMCHWT}$ の順であることがわかる。BM よりも modi. BM の方が計算速度が速い理由は、補間行列の計算時に proxy 法で評価する相互作用の計算および列ピボット QR 分解の計算



(a) Relative error for $\epsilon = 10^{-8}$.



(b) Relative error for $\epsilon = 10^{-12}$.



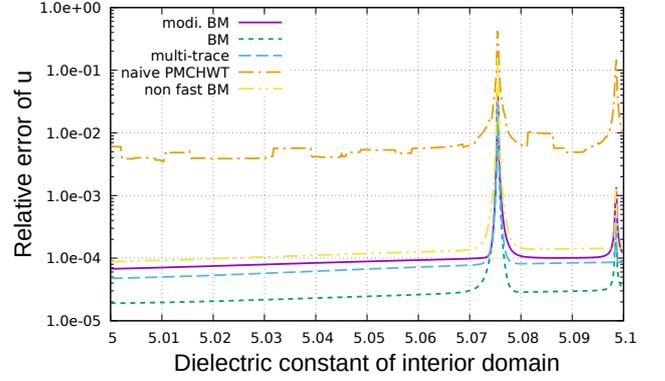
(c) Elapsed time for $\epsilon = 10^{-12}$.

Fig. 2: ϵ^- vs. relative error or elapsed time over $\epsilon^- = 0.1$ to about $\epsilon^- = 50$. Plot intervals are 1. Number of collocation points is 12800 excluding non fast BM. Number of collocation points of non fast BM is 3200.

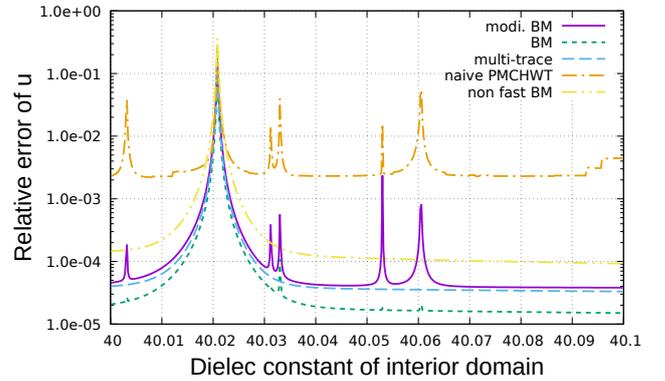
が少なく済むためである。また高速直接解法の計算速度は ϵ^- の増加に伴って増加していることがわかる。これは ϵ^- の増加に伴い、動的に決定する(内側領域に対応する)補間行列のランクが増加したためである。このとき、proxy法を高精度に実行できる積分作用素配置を有すると考えられる modi. BM(と multi-trace)は、BMに比較し物質パラメータのコントラストの増大に伴う計算時間の増加がわずかではあるが緩やかになっており、計算時間の意味では今回提案した modi. BMのBMに対する優位性が確認できる。

なお naive PMCHWTは他の手法に数値解の相対誤差が1桁から2桁程度劣り、 ϵ を 10^{-8} から 10^{-12} に変更したときの相対誤差の改善も小さかった。これは想定通り proxy法により適切に補間行列を計算することができていないためと考えられる。さらに、Fig. 2(c)からわかる通り常に他の積分方程式を用いた解法より計算時間も長い。

3.2. コントラスト比の微小な変化に対する計算結果



(a) $\epsilon^- = 5.0$ to $\epsilon^- = 5.1$.



(b) $\epsilon^- = 40.0$ to $\epsilon^- = 40.1$.

Fig. 3: Relative error of u over narrow ranges of ϵ^- . Plot intervals are 0.0002. Number of collocation points is 12800 excluding non fast BM. Number of collocation points of non fast BM is 3200.

物質パラメータのコントラスト比を微小に変化させたときの各積分方程式を用いた高速直接解法の応答を調べた。コントラスト比の微小な変化に対して各手法の数値解が non fast BMと同等の滑らかさで推移するか検証するため、内側領域の比誘電率 ϵ^- が5付近と40付近のときの数値計算を実施した。この数値実験により、物質パラメータの微小な変化に対して skeletonization法の結果が急に变化していないかを確認することができ、解法の信頼性に関する情報が得られる。選点の数は前節と同様に高速直接解法を用いた場合は12800、用いない場合(non fast BM)は計算時間の都合から3200とした。また補間分解時の列ピボット付きQR分解の許容誤差は $\epsilon = 10^{-12}$ のみとした。

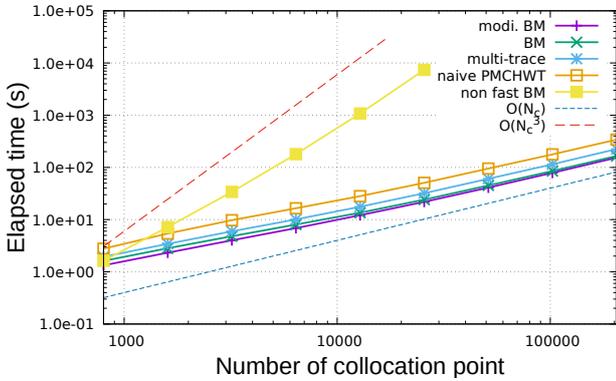
Fig. 3(a)に $\epsilon^- = 5$ 付近における数値解の u 部分の相対誤

差を示す。modi. BM, BM, multi-trace は高速解法なしの non fast BM と同等の数値解の推移となっている。一方で naive PMCHWT は例えば $\varepsilon^- = 5.01$ 付近で数値解の相対誤差の推移が滑らかではなく、その他の箇所でもところどころで不連続的に推移している。また $\varepsilon^- = 5.07$ から 5.08 等における相対誤差の悪化は、積分方程式の周波数に関する非ゼロの小さな虚部を持つ複素固有値の影響と考えられる⁽¹⁵⁾。

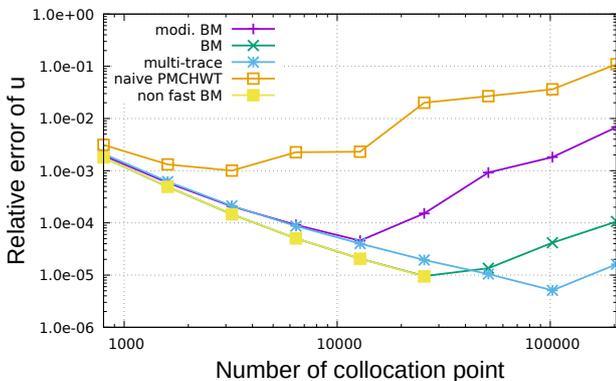
次に Fig. 3(b) に $\varepsilon^- = 40$ 付近における数値解の u 部分の相対誤差を示す。 $\varepsilon^- = 5$ のときと異なり、non fast BM と同様に数値解の相対誤差が滑らかに推移するのは multi-trace のみであった。modi. BM, BM, naive PMCHWT は $\varepsilon^- = 40.003$ や 40.032 付近で相対誤差が悪化した。この悪化は non fast BM には見られないため、proxy 法による近似評価が原因であると考えられる。また、naive PMCHWT は $\varepsilon^- = 40.09$ から 40.1 にかけて相対誤差の推移が滑らかではない(不連続的になっている)箇所がある。

3.3. 時間複雑性の検証

最後に、提案手法の高速解法としての性能を確認する。内側領域の比誘電率を $\varepsilon^- = 40$ とし、補間分解時の列ピボット付き QR 分解の許容誤差は $\epsilon = 10^{-12}$ のみとした。選点の数 N_c を変化させたときの計算時間の推移を Fig. 4(a) に、数値解 u の相対誤差の推移を Fig. 4(b) にそれぞれ示す。non fast BM の数値計算は計算時間の都合から $N = 25600$ までとした。



(a) N_c (number of collocation point) vs. Elapsed time.



(b) N_c (number of collocation point) vs. relative error of u .

Fig. 4: Elapsed time and relative error with $\varepsilon^- = 40$.

Fig. 4(a) から、提案手法である modi. BM を含むすべての高速直接解法が $O(N_c)$ 程度の時間複雑性の計算性能を示したことがわかる。計算速度は常に modi. BM > BM > multi-trace > PMCHWT の順であり、modi. BM が最も速かった。modi. BM が未知数の数がより少ない BM よりも高速な理由は前述と同様に補間行列の計算時に proxy 法で評価する相互作用の計算および列ピボット QR 分解の計算が少なくて済むためである。各高速直接解法は $O(N_c)$ よりも小さな時間複雑性を示しているように見えるが、これは Eigen が線型代数演算の実行時に AVX2 などの SIMD 演算命令を内部で使用し、CPU の 1 コアをより効率的に用いたためと考えられる。

比較対象として用いた non fast BM は $O(N_c^2)$ と $O(N_c^3)$ の中間の時間複雑性の計算性能に見えるが、これは解法の計算時間が $O(N_c^2)$ の離散化された層ポテンシャルの積分評価と、 $O(N_c^3)$ の LU 分解の合計となっており、 N_c が小さいときには層ポテンシャルの積分評価の方が計算時間を要するためである。

一方、Fig. 4(b) から、提案手法である modi. BM は想定と反し BM よりも数値解の相対誤差が大きいことがわかる。 $N_c = 25600$ までは BM は modi. BM や multi-trace よりも数値解の相対誤差が小さく、ほぼ non fast BM と同等の精度であった。

しかしながら各高速直接解法は N_c を大きくするに従い、数値解の相対誤差を小さくできなくなる箇所が存在する。例えば modi. BM では $N_c = 25600$ 以降の相対誤差が増加している。multi-trace は最も大きな N_c まで精度を維持できているものの、 $N_c = 204800$ 以降は悪化した。これは補間分解を用いると式 (12) における R を構成する補間点の位置が境界セグメント端部に偏るためであり、多階層に線型方程式を圧縮する際にその偏りが顕著になり、もとの行列を復元するために必要な情報が欠落してしまうためであると考えられる。数値解の悪化原因は補間分解アルゴリズムだけでなく、 N_c を圧縮階層数を増やすことにより増加させるという本節で用いた実装も補間点の偏りをより助長する原因の 1 つである。この改善には例えば木構造におけるリーフセルに含まれる要素数を増加させ、線型方程式を圧縮する level の数を減らすことなどの対策が実行可能であるが、根本的には補間点の選定法の改善が必要と考えられる。

本節の計算においても、naive PMCHWT は計算時間の意味でも数値計算精度の意味でも他の高速直接解法に劣っており、本研究で実施した数値計算すべてで有用性を見出すことができなかった。

4. 得られた知見の総括と今後の課題

本研究では 2 次元 Helmholtz 方程式の transmission 問題を対象とし、内外の物質パラメータのコントラスト比が大きな場合の高速直接境界要素法の適用性を検証した。検証にあたり、積分作用素の配置が高速直接解法に必要な proxy 法の観点で性質がよく、proxy 法による補間を高精度に実行できると推定される変形型 Burton-Miller の積分方程式を新たに

提案した.

新たに提案した変形型 Burton-Miller の積分方程式を用いた高速直接解法は, 計算速度で通常の Burton-Miller の積分方程式を用いた高速直接解法を上回ったものの, 数値解の精度では通常の Burton-Miller の積分方程式を用いた高速直接解法に当初の想定と異なり劣った. ただし提案手法は multi-trace 積分方程式を用いた高速直接解法と同程度の数値解の精度は有しており, 適用そのものに問題はないと考えられる. 本研究では通常の Burton-Miller の積分方程式を用いた高速直接解法の数値計算精度に提案手法および multi-trace 積分方程式を用いた高速直接解法の数値計算精度が劣る理由を説明できておらず, また要素数を増加させたときの計算精度の低下も問題であり, proxy 法の適用方法や補間点の選定法等にまだ課題があると推定される.

また本研究では, 広く用いられる PMCWHT 定式化の積分方程式は高速直接解法では他の積分方程式を用いた手法よりも計算時間と数値解の精度の双方で劣ることを数値実験により指摘した.

さらに multi-trace 積分方程式を用いた高速直接解法は, 物質パラメータを微小に変化させたときに数値解が proxy 法の影響を最も受けにくいことを数値的に確かめた.

今後, より広い分野に高速直接解法を適用可能とするためには, 各種問題における proxy 法の適用方法の考察を進めることが必要である. 実際 proxy 法は経験的な手法であり, その最適な適用方法は明らかになっていない. 一方, 今回用いた skeletonization 以外にも効率がよいとされる高速直接解法は存在する. その 1 つである randomized SVD⁽¹⁶⁾ に基づく ULV 分解型の高速直接解法⁽⁴⁾ を用いた場合における変形型 Burton-Miller の積分方程式と通常版のそれとの数値解精度の比較なども意義があると考えられる. また海外の研究グループ (例えば^(17, 18) など) が skeletonization 法で transmission 問題を解く際によく用いる Rokhlin-Muller 型の間接型積分方程式⁽¹⁹⁾ の適用性も調べる必要があると考える. なぜなら Rokhlin-Muller 型の間接型積分方程式は PMCHWT 定式化の積分方程式と同様, 波数の異なる積分作用素の和の計算が必要であり, proxy 法を効率よく実行できない可能性があるためである.

謝辞

本研究は JSPS 科研費 JP23K19972 の助成を受けた.

参考文献

- (1) Naoshi Nishimura. Fast multipole accelerated boundary integral equation methods. *Applied mechanics reviews*, Vol. 55, No. 4, pp. 299–324, 2002.
- (2) Timothy Paul Pals. Multipole for scattering computations: Spectral discretization, stabilization, fast solvers. *Ph.D. thesis of University of California Santa Barbara*, 2004.
- (3) Per-Gunnar Martinsson and Vladimir Rokhlin. A fast direct solver for boundary integral equations in two dimensions. *Journal of Computational Physics*, Vol. 205, No. 1, pp. 1–23, 2005.
- (4) Shiv Chandrasekaran, Ming Gu, and Timothy Pals. A fast ULV decomposition solver for hierarchically semiseparable representations. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, Vol. 28, No. 3, pp. 603–622, 2006.
- (5) 松本安弘, 西村直志. 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. 計算数理工学論文集, Vol. 16, pp. 97–102, 2016.
- (6) 松本安弘, 西村直志. 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. 計算数理工学論文集, Vol. 19, pp. 73–78, 2019.
- (7) Ralf Hiptmair and Carlos Jerez-Hanckes. Multiple traces boundary integral formulation for helmholtz transmission problems. *Advances in Computational Mathematics*, Vol. 37, No. 1, pp. 39–91, 2012.
- (8) AJ Burton and GF Miller. The application of integral equation methods to the numerical solution of some exterior boundary-value problems. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, Vol. 323, No. 1553, pp. 201–210, 1971.
- (9) 三澤亮太, 西村直志. 見かけの複素固有値の分布に基づいた 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, pp. 73–78, 2016.
- (10) Weng Cho Chew, Eric Michielssen, JM Song, and Jian-Ming Jin. *Fast and efficient algorithms in computational electromagnetics*. Artech House, Inc., 2001.
- (11) Hongwei Cheng, Zydrunas Gimbutas, Per-Gunnar Martinsson, and Vladimir Rokhlin. On the compression of low rank matrices. *SIAM Journal on Scientific Computing*, Vol. 26, No. 4, pp. 1389–1404, 2005.
- (12) Adrianna Gillman, Patrick M Young, and Per-Gunnar Martinsson. A direct solver with $O(N)$ complexity for integral equations on one-dimensional domains. *Frontiers of Mathematics in China*, Vol. 7, pp. 217–247, 2012.
- (13) 松本安弘. 周期波動 transmission 問題に対する境界要素法の高速直接解法. 京都大学博士論文, 2020.
- (14) Gaël Guennebaud, Benoît Jacob, et al. Eigen v3. <http://eigen.tuxfamily.org>, 2010.
- (15) Ryota Misawa, Kazuki Niino, and Naoshi Nishimura. Boundary integral equations for calculating complex

- eigenvalues of transmission problems. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, Vol. 77, No. 2, pp. 770–788, 2017.
- (16) Nathan Halko, Per-Gunnar Martinsson, and Joel A Tropp. Finding structure with randomness: Probabilistic algorithms for constructing approximate matrix decompositions. *SIAM review*, Vol. 53, No. 2, pp. 217–288, 2011.
- (17) Leslie Greengard, Kenneth L Ho, and June-Yub Lee. A fast direct solver for scattering from periodic structures with multiple material interfaces in two dimensions. *Journal of Computational Physics*, Vol. 258, pp. 738–751, 2014.
- (18) Adrianna Gillman and Alex Barnett. A fast direct solver for quasi-periodic scattering problems. *Journal of Computational Physics*, Vol. 248, pp. 309–322, 2013.
- (19) Vladimir Rokhlin. Solution of acoustic scattering problems by means of second kind integral equations. *Wave Motion*, Vol. 5, No. 3, pp. 257–272, 1983.

