

# 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

Preconditioners based on Calderon's formulae

for 1 periodic boundary value problems for Helmholtz' equation in 2D

新納 和樹<sup>1)</sup>、西村 直志<sup>2)</sup>

Kazuki NIINO, 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: niinou@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. In solving the problems with 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. This preconditioner can be implemented more easily and make convergence faster than conventional ones. We also make several numerical analyses with this preconditioner.

**Key Words:** Boundary Integral Equation Method, Calderon's Formulae, Preconditioning, Krylov subspace method

## 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持つ光学材料が注目を集めており、周期構造の波動散乱問題を高速で解くことが応用上重要になっている。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、高速多重極境界要素法も有効であることが Otani<sup>(1),(2)</sup> などで示されている。

境界要素法は領域の境界を離散化すればよいので、要素数  $N$  が FDTD 法などと比べて小さくて済む。これを高速多重極法と組み合わせることで、 $O(N(\log N)^\alpha)$  程度の計算時間で問題を解くことができる。また高速多重極法は領域をセルと呼ばれる単位領域で分割するため、周期境界値問題の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、周期性を持つ問題を効率よく計算することができる。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型方程式を反復解法で解く事が必須であるので、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型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、収束を速めることが

できる<sup>(3)</sup>。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。Steinbach and Wendland は Laplace 方程式に関して、Calderon の式を用いた前処理手法を提案した<sup>(4)</sup>。また Christiansen and Nédélec<sup>(5)</sup> はこれを Helmholtz 方程式に拡張した。Antoine and Boubendir<sup>(6)</sup> 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。しかし、これまで周期境界値問題において Calderon の式を用いた前処理法は検討されていない。そこで、本研究では 2次元の 1 周期境界条件下の Helmholtz 方程式の波動散乱問題を取り上げ、Calderon の式に基づく前処理法の精度と収束性を検証する。具体的には、Antoine and Boubendir<sup>(6)</sup> の前処理を周期問題に拡張し、その効果を検討する。次に、Antoine and Boubendir の前処理法の効率、線形方程式と未知数の並べ方に密接に関係し、適切な配置を行って Krylov 部分空間反復法を使用した場合は前処理を行わないことが現実的であることを指摘し、数値的にこれを実証する。

本論文の構成は次の様である。第 2 節では 2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高速多重極境界要素法を用いた解法、Calderon の式に基づく前

処理の定式化を行い、第3節では数値計算結果とその考察、第4節では結論と今後の課題を記す。

## 2 定式化

本節では2次元 Helmholtz 方程式の周期境界値問題と、Calderon の式を用いた前処理法について述べる。

### 2.1 2次元 Helmholtz 方程式の周期境界値問題

#### 2.1.1 支配方程式

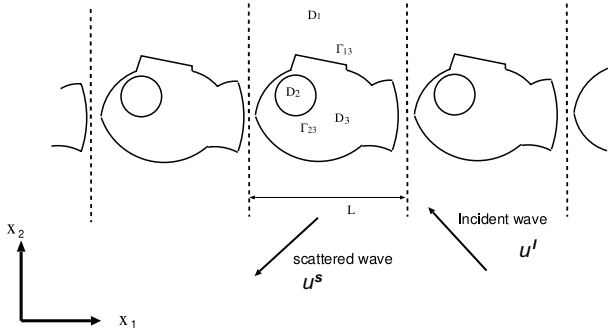


Fig. 1 Periodic boundary value problems

Fig.1 のように  $x_1$  方向に周期性を持つ無限領域を考え、周期を  $L$  とする。各周期単位は複数の互いに交わらない部分領域  $D_i$  から成っており、このうち  $D_1$  は無限領域であるとする。今、各領域  $D_i$  において、2次元 Helmholtz 方程式

$$\Delta u + k_i^2 u = 0 \quad \text{in } D_i \quad (1)$$

を満たす解  $u$  を、境界条件

$$u_i = u_j \quad \text{on } \Gamma_{ij} \quad (2)$$

$$\frac{1}{\varepsilon_i} \frac{\partial u_i}{\partial n} = \frac{1}{\varepsilon_j} \frac{\partial u_j}{\partial n} \quad (3)$$

周期境界条件

$$u(x_1 + L, x_2) = e^{i\beta} u(x_1, x_2) \quad (4)$$

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

および、無限領域においては  $u$  ( $D_1$  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  $D_i$  側からの  $\Gamma_{ij}$  への極限值、 $k_i = \omega \sqrt{\varepsilon_i \mu_i}$  は波数、 $\omega$  は角振動数、 $u^I$  は入射波、 $\varepsilon_i, \mu_i$  はそれぞれ領域  $D_i$  における誘電率と透磁率、 $\Gamma_{ij}$  は  $\partial D_i \cap \partial D_j$  を表す。 $\Gamma_{ij}$  上の単位法線ベクトル  $n$  の向きは一意に定めておく。入射波  $u^I$  は平面波とし、定数  $C_{\text{inc}} \in \mathbb{R}$  と入射波の入射方向を表す単位ベクトル  $\boldsymbol{v} \in \mathbb{R}^2$  を用いて

$$u^I(\boldsymbol{x}) = C_{\text{inc}} e^{ik\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{x}} \quad (6)$$

で表される。また、式(4), (5)に表れる  $\beta \in \mathbb{R}$  は位相差であり、式(6)中の  $\boldsymbol{v} = (v_1, v_2)$  を用いて

$$\beta = kv_1 L \quad (7)$$

と表される。以下、簡単のため、領域は  $D_i = D_1$  及び  $D_j$  の2相から成っているものとする。

#### 2.1.2 境界積分方程式

上記の問題に対応する境界積分方程式は以下のように表される。

$$\begin{aligned} & \int_{\Gamma_{ij}} (\varepsilon_i G_i^p(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}) + \varepsilon_j G_j^p(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})) w \, dS_y \\ & - \int_{\Gamma_{ij}} \left( \frac{\partial G_i^p(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})}{\partial n_y} + \frac{\partial G_j^p(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})}{\partial n_y} \right) u \, dS_y = u^I \quad (8) \\ & \int_{\Gamma_{ij}} \left( \frac{\partial G_i^p(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})}{\partial n_x} + \frac{\partial G_j^p(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})}{\partial n_x} \right) w \, dS_y \\ & - \int_{\Gamma_{ij}} \left( \frac{1}{\varepsilon_i} \frac{\partial^2 G_i^p(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})}{\partial n_x \partial n_y} + \frac{1}{\varepsilon_j} \frac{\partial^2 G_j^p(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})}{\partial n_x \partial n_y} \right) u \, dS_y = \frac{1}{\varepsilon_i} \frac{\partial u^I}{\partial n} \quad (9) \end{aligned}$$

ここに  $u = u_i = u_j$ ,  $w = \frac{1}{\varepsilon_i} \frac{\partial u_i}{\partial n} = \frac{1}{\varepsilon_j} \frac{\partial u_j}{\partial n}$  である。また、 $G_i^p$  は周期グリーン関数であり

$$G_i^p(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\beta n} G_i(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y} - Lne_1) \quad (10)$$

$$G_i(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}) = \frac{i}{4} H_0^{(1)}(k_i |\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}|) \quad (11)$$

で表わされる。 $e_1$  は  $x_1$  方向の単位ベクトル、 $H_n^{(1)}$  は  $n$  次の第一種 Hankel 関数である。

本論文で扱う問題は式(8)に表れる1重層、2重層ポテンシャルのみで境界積分方程式を構成する事も可能であるが、Fig. 1のように有界な領域を含む問題では見かけの固有値が発生し、解が一意に定まらないことがあるので、ここでは式(8), (9)の定式化を用いる。

#### 2.1.3 積分方程式の離散化

本研究では区分一定基底を用いて解を展開し、選点法を用いて方程式を離散化した。局所座標を  $s$  と表記して、選点法により積分方程式(8), (9)を離散化すると

$$\begin{aligned} & \sum_{m=1}^N (\varepsilon_i S_{nm}^i + \varepsilon_j S_{nm}^j) w(P_m) \\ & - \sum_{m=1}^N (D_{nm}^i + D_{nm}^j) u(P_m) = u^I(P_n) \quad (12) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \sum_{m=1}^N (D_{nm}^{*i} + D_{nm}^{*j}) w(P_m) \\ & - \sum_{m=1}^N \left( \frac{1}{\varepsilon_i} N_{nm}^i + \frac{1}{\varepsilon_j} N_{nm}^j \right) u(P_m) = \frac{1}{\varepsilon_i} \frac{\partial u^I(P_n)}{\partial n} \quad (13) \end{aligned}$$

となる。ただし点  $P_n$  を表す位置ベクトルを  $\boldsymbol{p}_n$  とすると、 $S_{nm}^i, D_{nm}^i, D_{nm}^{*i}, N_{nm}^i$  は、それぞれ

$$S_{nm}^i = \int_{\Gamma_{ij}^m} G_i^p(\boldsymbol{p}_n - \boldsymbol{y}(s)) \, ds \quad (14)$$

$$D_{nm}^i = \int_{\Gamma_{ij}^m} \frac{\partial G_i^p(\boldsymbol{p}_n - \boldsymbol{y}(s))}{\partial n_y} \, ds \quad (15)$$

$$D_{nm}^{*i} = \int_{\Gamma_{ij}^m} \frac{\partial G_i^p(\boldsymbol{p}_n - \boldsymbol{y}(s))}{\partial n_x} \, ds \quad (16)$$

$$N_{nm}^i = \int_{\Gamma_{ij}^m} \frac{\partial^2 G_i^p(\mathbf{p}_n - \mathbf{y}(s))}{\partial n_x \partial n_y} ds \quad (17)$$

と定義される。ここに  $\Gamma_{ij}^m$  は  $m$  番目の境界要素である。

$S_{mn}^i$  を  $(m, n)$  要素とする行列を  $S^i$  と定義し、 $D^i, D^{*i}, N^i$  も同様に定義する。また、 $u(P_n)$  を第  $n$  成分とするベクトルを  $\mathbf{u}$ 、 $\frac{\partial u(P_n)}{\partial n}$  を第  $n$  成分とするベクトルを  $\mathbf{w}$  と定義すると、式 (12), (13) は

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (18)$$

$$A = \begin{pmatrix} \varepsilon_i S^i + \varepsilon_j S^j & -(D^i + D^j) \\ -(D^{*i} + D^{*j}) & \frac{1}{\varepsilon_i} N^i + \frac{1}{\varepsilon_j} N^j \end{pmatrix} \quad (19)$$

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} \mathbf{w} \\ \mathbf{u} \end{pmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}^I \\ -\frac{1}{\varepsilon_i} \frac{\partial \mathbf{u}^I}{\partial n} \end{pmatrix} \quad (20)$$

と表せる。

### 2.1.4 周期高速多重極法

周期高速多重極法とは与えられた  $w, u$  に対して、式 (8), (9) の左辺を高速に計算する手法であり、積分範囲  $\Gamma_{ij}$  において、積分評価点  $\mathbf{x}$  から遠い部分の影響をまとめて評価することで高速に積分計算を行う。ここでは周期高速多重極法の定式化については割愛するが、詳しくは Otani and Nishimura<sup>(2)</sup>などを参照されたい。

## 2.2 前処理

本小節では上で導いた式 (18) を反復法で解く際に用いる前処理について述べる。

### 2.2.1 Calderon の式

Fig.2 のように、 $\Gamma$  を閉曲線、 $\mathcal{V}$  をその内部の領域、 $\psi, \phi$  を  $\Gamma$  上の任意関数として、関数  $V(\mathbf{x})$  を

$$V(\mathbf{x}) = \int_{\Gamma} G^p(\mathbf{x} - \mathbf{y})\psi(\mathbf{y})dS_y - \int_{\Gamma} \frac{\partial G^p(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\partial n_y} \phi(\mathbf{y})dS_y \quad (21)$$

と定義する。 $V(\mathbf{x})$  は  $\mathcal{V}$  において Helmholtz 方程式を満たすことに注意して、非周期問題の場合<sup>(7)</sup>と同様な方法を用いると、次の周期問題における Calderon の式が得られる。

$$\frac{\mathcal{I}}{4} = -S\mathcal{N} + \mathcal{D}\mathcal{D} \quad (22)$$

$$0 = S\mathcal{D}^* - \mathcal{D}S \quad (23)$$

$$\frac{\mathcal{I}}{4} = \mathcal{D}^*\mathcal{D}^* - \mathcal{N}S \quad (24)$$

$$0 = -\mathcal{D}^*\mathcal{N} + \mathcal{N}\mathcal{D} \quad (25)$$

ここに、 $\mathcal{I}$  は恒等写像であり、 $S$  等は次のように定義される。

$$Sv = \int_{\Gamma} G^p(\mathbf{x} - \mathbf{y})v(\mathbf{y})dS \quad (26)$$

$$\mathcal{D}v = \int_{\Gamma} \frac{\partial G^p(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\partial n_y} v(\mathbf{y})dS \quad (27)$$

$$\mathcal{D}^*v = \int_{\Gamma} \frac{\partial G^p(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\partial n_x} v(\mathbf{y})dS \quad (28)$$

$$\mathcal{N}v = \int_{\Gamma} \frac{\partial^2 G^p(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\partial n_x \partial n_y} v(\mathbf{y})dS \quad (29)$$

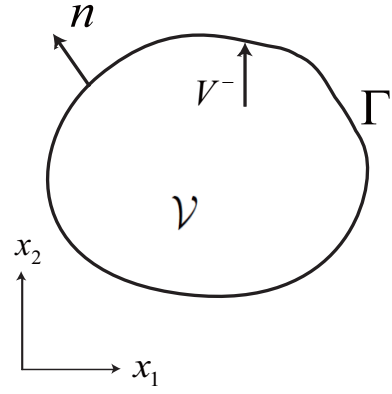


Fig. 2 Domain  $\mathcal{V}$  in  $\mathbb{R}^2$

### 2.2.2 Antoine-Boubendir 型前処理

ここでは上で示した Calderon の式を用いて、(18) に対する前処理行列を構成することについて述べる。

まず、式 (22), (23), (24), (25) は、

$$\begin{pmatrix} -\mathcal{N} & -\mathcal{D}^* \\ -\mathcal{D} & -S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S & -\mathcal{D} \\ -\mathcal{D}^* & \mathcal{N} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\mathcal{I}}{4} & 0 \\ 0 & \frac{\mathcal{I}}{4} \end{pmatrix} \quad (30)$$

と書き換えられる事に注意する。式 (19), (30) より

$$M = \begin{pmatrix} -(\frac{1}{\varepsilon_i} N^i + \frac{1}{\varepsilon_j} N^j) & -(D^{*i} + D^{*j}) \\ -(D^i + D^j) & -(\varepsilon_i S^i + \varepsilon_j S^j) \end{pmatrix} \quad (31)$$

が式 (18) を反復解法で解く際の左前処理行列として有効であることがわかる。

実際、式 (18) において、任意の  $i, j$  に対して  $k_i = k_j$  (i.e.  $\varepsilon_i = \varepsilon_j$ ) であれば、離散化前のオペレータとして (19) は (30) 左辺 2 項の 2 倍に、(31) は (30) 左辺 1 項の 2 倍に相当するので、離散化後も  $M \approx A^{-1}$  となる。一般の場合 ( $k_i \neq k_j$ ) についても、領域  $D_i$  に対する (26) の作用素を  $S^i$  等と書くと、

$$\begin{pmatrix} -(\frac{1}{\varepsilon_i} N^i + \frac{1}{\varepsilon_j} N^j) & -(D^{*i} + D^{*j}) \\ -(D^i + D^j) & -(\varepsilon_i S^i + \varepsilon_j S^j) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \varepsilon_i S^i + \varepsilon_j S^j & -(D^i + D^j) \\ -(D^{*i} + D^{*j}) & \frac{1}{\varepsilon_i} N^i + \frac{1}{\varepsilon_j} N^j \end{pmatrix} = \left( \frac{1}{2} + \frac{\varepsilon_i}{4\varepsilon_j} + \frac{\varepsilon_j}{4\varepsilon_i} \right) \mathcal{I} + \mathcal{K}$$

となる。ここに  $\mathcal{K}$  はコンパクト作用素である。したがって、離散化後も  $MA$  は単位行列の定数倍と固有値が原点の周辺に集まった行列の和となる事が予想される。

式 (31) は Antoine and Boubendir<sup>(6)</sup>により非周期問題において提案された前処理法の周期問題への拡張であり、以下では Antoine-Boubendir 型前処理と呼ぶことにする。

### 2.2.3 行列の配置の変更による前処理

式 (22), (23), (24), (25) は

$$\begin{pmatrix} -\mathcal{D} & S \\ -\mathcal{N} & \mathcal{D}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\mathcal{D} & S \\ -\mathcal{N} & \mathcal{D}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\mathcal{I}}{4} & 0 \\ 0 & \frac{\mathcal{I}}{4} \end{pmatrix} \quad (32)$$

と書き換えられる。

式 (18) に反復法を適用する代わりにそれと同等の方程式

$$\tilde{A}\tilde{x} = \mathbf{b} \quad (33)$$

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} -(D^i + D^j) & \varepsilon_i S^i + \varepsilon_j S^j \\ -\left(\frac{1}{\varepsilon_i} N^i + \frac{1}{\varepsilon_j} N^j\right) & D^{*i} + D^{*j} \end{pmatrix} \quad (34)$$

$$\tilde{x} = \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{w} \end{pmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}^I \\ \frac{1}{\varepsilon_i} \frac{\partial \mathbf{u}^I}{\partial n} \end{pmatrix} \quad (35)$$

を解くことを考える。この際、 $k_i = k_j$  であれば、離散化誤差を除いて  $\tilde{A}^2 = I$  なので、Antoine-Boubendir 型前処理と同様の考え方で得られる前処理行列は係数行列  $\tilde{A}$  と一致する。この様にして得られる前処理法は Antoine-Boubendir 型前処理と式や未知数の自明な並べ替えを除いて等価であるが、実装はより容易である。

さらに式 (33) を用いる場合は、 $k_i = k_j$  であれば、離散化誤差を除くと全 Krylov 空間が  $\{\mathbf{v}, \tilde{A}\mathbf{v}\}$  となり ( $\mathbf{v}$  は初期残差)、線形方程式の Krylov 部分空間反復解法は非常に少数の反復回数 (離散化誤差がなければ 2 回) で収束することが期待される。つまり行列 (34) を係数行列にすれば、一般の場合 ( $k_i \neq k_j$ ) も含めて陽に前処理行列を用いることなく十分速い収束が得られることが期待できる。本論文ではこの方法を  $\tilde{A}$  型解法と呼ぶ。なお (18) を用いた場合、 $A$  のべき乗は Calderon の式に現れない項からなり、同式に前処理なしで Krylov 部分空間反復法を適用したとしても速い収束は期待できない事に注意する。

また、本論文では簡単のために 2 領域の問題のみを示したが、上記の Calderon の式に基づく前処理は多領域の問題についても同様に適用可能である。

### 3 数値計算結果

本節では 2、3 の問題に対して、2.2 節で示した 2 つの解法と従来法として block diagonal 法を適用し、得られた数値計算結果を示す。block diagonal 法では多重極法の leaf に対する係数行列を並べたブロック対角行列を前処理行列とした。

以下では前処理を用いずに (33) を解いたもの ( $\tilde{A}$  型解法) を  $\tilde{A}$ 、(18) に対して左前処理行列として行列 (31) を用いたもの (Antoine-Boubendir 型前処理) を  $MA$ 、式 (18) に右前処理で block diagonal 法を用いて解いたものを  $A$  と略記する。

#### 3.1 誤差評価

まず解析解が容易に求まる問題に対して数値計算を行い、精度の検証を行った。Fig. 3 の領域において  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 1$ ,  $\mu_1 = \mu_2 = 1$ ,  $k_1 = k_2 = 2\pi$  のとき、解は  $u = u^I$ ,  $\frac{\partial u}{\partial n} = \frac{\partial u^I}{\partial n}$  となる。Table 1 には要素数  $n$  に対する解の各要素上での相対誤差の平均値

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{\|u_i - |u_i^I|\|}{|u_i^I|} + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{\left| \frac{\partial u_i}{\partial n} - \frac{\partial u_i^I}{\partial n} \right|}{\left| \frac{\partial u_i^I}{\partial n} \right|} \quad (36)$$

を解法別に記した。いずれの解法においても精度は同程度であり、要素数を増やすと十分な精度が出ていることが見て取れる。

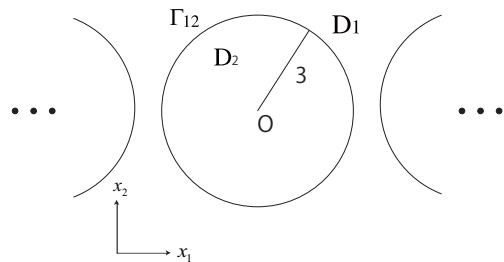


Fig. 3 Circular model

Table 1 The average of relative error for the number of elements  $n$

$n$	100	500	1000	2000
$\tilde{A}$	2.27e-01	1.66e-02	9.28e-03	4.86e-03
$MA$	2.27e-01	1.66e-02	9.27e-03	4.86e-03
$A$	2.27e-01	1.66e-02	9.29e-03	4.87e-03

#### 3.2 計算時間

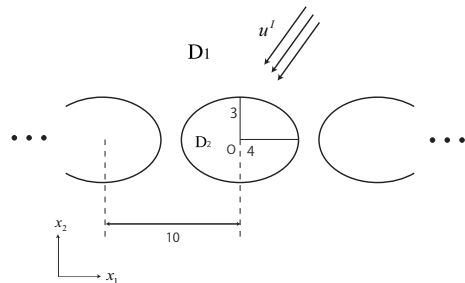


Fig. 4 Elliptical model

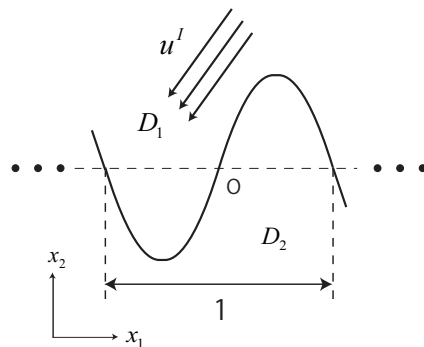


Fig. 5 Model of sinusoidal interface

本研究では Fig.4, Fig.5 の二種類の領域に対して、3.1 節で誤差評価を行った 3 つの解法で数値計算を行い、反復回数と計算時間を測定した。線型方程式の反復解法には GMRES を用い、リスタート定数 150 回、GMRES の打ち切り誤差は  $1.0 \times 10^{-5}$ 、要素数  $n = 2000$ 、入射波の角速度  $2\pi$ 、任意の領域  $D_i$  の透磁率  $\mu_i = 1$ 、 $D_1$  の誘電率を  $\varepsilon_1 = 1$  とし、 $D_2$  の誘電率を様々に変化させて計算を行った。なお今回はレゾナンスアノマリ<sup>(8)</sup>の影響は考えない事とし、レゾナンスが発生する可能性のある  $\varepsilon_2 > 1$  の場合は扱わない。

Fig.4, Fig.5 の各領域に対して、横軸を  $\varepsilon_2$ 、縦軸を GMRES の反復回数としてプロットしたグラフが各々 Fig.6, Fig.7 である。Fig.6 において  $D_1$  と  $D_2$  の誘電率の差が非常に大きいときに、 $A$  に block diagonal 法を施した従来法が最も少ない反復回数で収束しているが、それ以外の部分や Fig.7 では、 $\tilde{A}$  型や  $MA$  型といった Calderon の式に基づく前処理を施した解法は、block diagonal 法と比べ、反復回数が改善していることがわかる。

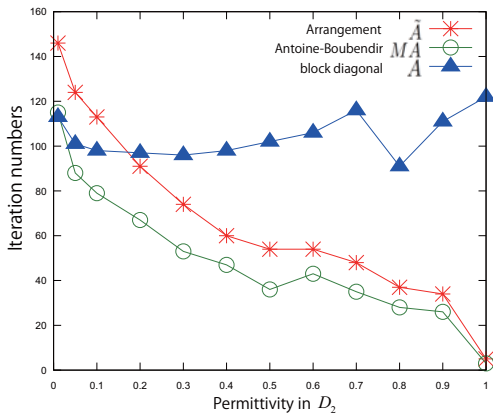


Fig. 6 Number of iterations of GMRES for the elliptical model

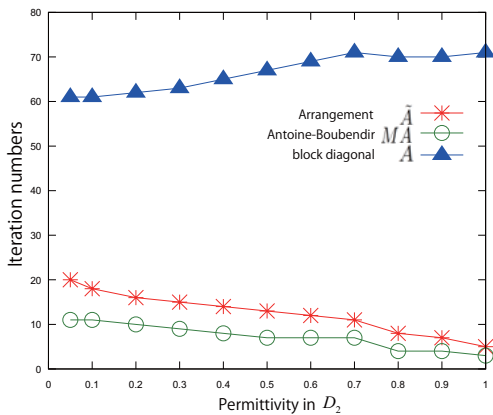


Fig. 7 Number of iterations of GMRES for the model of sinusoidal interface

一方で、Fig.6, Fig.7 と同じ条件下で、 $\tilde{A}$  に右前処理で block diagonal 法を施した解法についても数値計算を行い反

復回数を調べたが、全ての場合について 10000 回反復後も解が許容誤差  $1.0^{-5}$  を下回することは無く、収束しなかった。これは  $\tilde{A}$  に前処理行列を施すことで、自身が逆作用素であるという性質が失われるからである。同じ block diagonal 法による前処理でさえも、行列  $A$  に施す場合と  $\tilde{A}$  に施す場合で反復回数に著しい差が見られ、ここからも線形方程式の反復解法における係数行列の配置の重要性がわかる。

横軸を  $\varepsilon_2$ 、縦軸を計算時間としてプロットしたグラフが Fig.8, Fig.9 である。従来法である block diagonal 法を施した  $A$  型解法と、Calderon の式を考慮した二つの方法との比較においては、計算時間と反復回数で同様の傾向を示しているが、反復回数の場合とは違い、 $\tilde{A}$  型解法の方が  $MA$  型前処理法に比べ計算時間が短くなっている。

このことは次のようにして説明できる。多重極法を用いて  $MA$  型前処理を行った場合、Krylov 部分空間法の一回の反復あたり行列ベクトル積の演算が 2 回行われる。これは  $\tilde{A}$  型解法の Krylov 部分空間法の 2 回の反復に要する計算量と概ね等しい。また、

$$T = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix}$$

とすると  $MA = T\tilde{A}^2T$  が成り立つ。 $T$  は直交行列であるので  $MA$  の作る部分 Krylov 空間と  $\tilde{A}^2$  の作る部分 Krylov 空間は本質的に同値であると言える。したがって、簡単のために反復法として restart なしの GMRES を考えると、 $MA$  型解法が  $n$  回の反復で

$$\{v, \tilde{A}^2v, \tilde{A}^4v, \dots, \tilde{A}^{2n}v\}$$

における誤差最小解を求めるのに対して、後者は  $2n$  回の反復で

$$\{v, \tilde{A}v, \tilde{A}^2v, \dots, \tilde{A}^{2n}v\}$$

における誤差最小解を求めることになる。そのため  $MA$  型前処理に比較して  $\tilde{A}$  型解法の方が同一許容誤差に対する計算時間が長くないと考えられる。

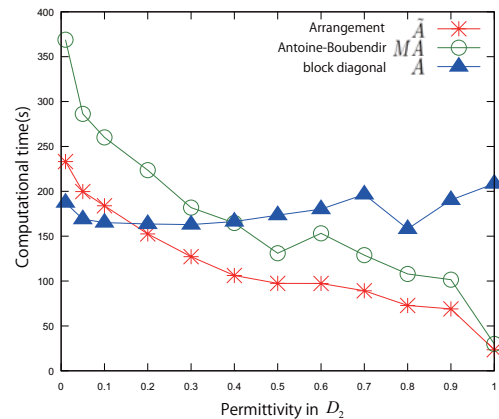


Fig. 8 Computational time for the elliptical model



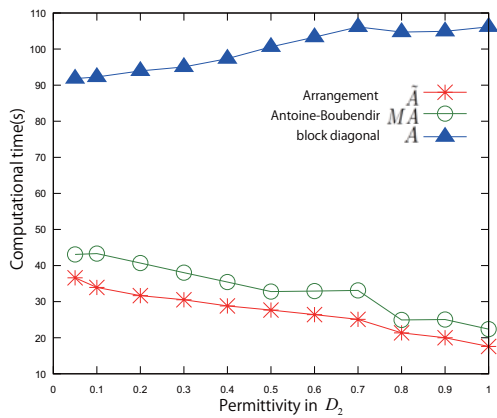


Fig. 9 Computational time for the model of sinusoidal interface

Fig.10 は、Fig.5 の sin 型領域において、誘電率を  $\varepsilon_1 = 1.0$ ,  $\varepsilon_2 = 0.1$  で固定し、様々な  $\omega$  に関して計算時間をプロットしたものである。横軸は波数  $k_1 = \omega\sqrt{\varepsilon_1\mu_1}$  ( $\varepsilon_1 = \mu_1 = 1$ ) で表している。様々な波数に対しても  $A$  に block diagonal 法を施した方法に比べ、Calderon の式を考慮した方法がより高速であることがわかる。 $MA$  型前処理法と  $\tilde{A}$  型解法は、他の結果と同様、 $\tilde{A}$  型の方がやや計算時間が短くなっている。

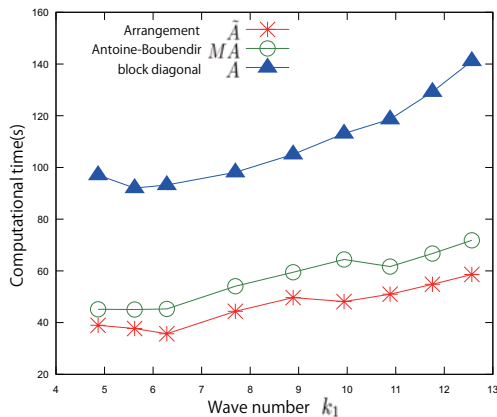


Fig.10 Computational time for the sinusoidal interface

#### 4 結論

前処理として block diagonal 法を施して反復法を行う方法に比べ、Calderon の式を考慮した方法では、収束速度が著しく改善することがわかった。また、式 (34) のように自身が逆作用素に近くなるように行列を並び替えるだけで、Calderon の式から求まる逆作用素を陽に前処理行列として施す方法を少し上回る程度の収束速度が実現できることもわかった。この方法を用いると前処理行列を作用させる必要はなく、実装も容易である。またこの事実は GMRES などの反復法で方程式を解く際に、前処理行列の選択だけでなく行列の配置そのものが収束速度に大きな影響を与えていることを示し

ている。特に、Calderon の式に基づいて (31) の前処理を非常に有効であるとした Antoine and Boubendir<sup>(6)</sup> の結論は、単に元の行列の並べ方 (19) が不適當であったに過ぎないという解釈も可能である。美しい対称性を有して一見自然に見える (19) よりも、対角成分に 0 が並び、point Jacobi 法すら使えない (34) の方が良いという意外な結果は、警鐘的と言えることが出来よう。

今後の課題としては、まず 3 次元における Helmholtz 方程式やその他の方程式を支配方程式とする問題に対して、Calderon の式に基づく前処理を検証することが挙げられる。また、本研究では離散化を区分一定要素基底を用いた選点法で行ったが、一般に任意の離散化手法に対して  $SD$  を離散化して得られる行列と  $S$  と  $D$  をそれぞれ離散化して得られた行列をかけたものが等しいとは限らない。このような離散化手法を用いる場合は、第 2.2 節で定式化した前処理は効果を発揮しないことが予想される。様々な方程式やその離散化に対して Calderon の式に基づく前処理を上手く適用する手法の開発が重要な課題であると言える。

#### 参考文献

- (1) Y. Otani: A periodic FMM for Maxwell's equation in 3D, (2007), PhD thesis, 京都大学.
- (2) Y. Otani, N. Nishimura: An FMM for periodic boundary value problems for cracks for Helmholtz' equation in 2D, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **73** (2007) pp. 381-406
- (3) Y. Saad: Iterative Methods for Sparse Linear Systems, (2003), SIAM.
- (4) O. Steinbach, W.L. Wendland: The construction of some efficient preconditioners in the boundary element method, *Advances in Computational Mathematics*, **9** (1998), pp. 191-216.
- (5) S.H. Christiansen, J.-C. Nédélec: Des préconditionneurs pour la résolution numérique des équations intégrales de frontière de l'acoustique, *Comptes rendus de l'Académie des sciences. Série I*, **330** (2000), pp. 617-622
- (6) X. Antoine, Y. Boubendir: An integral preconditioner for solving the two-dimensional scattering transmission problem using integral equations, *International Journal of Computer Mathematics*, **85** (2008), pp. 1473-1490
- (7) J.-C. Nédélec: Acoustic and Electromagnetic Equations, Springer, 2001
- (8) 大谷佳広・西村直志: Wood の異常回折周辺における周期高速多重境界要素法の挙動について, 計算数理工学論文集, **7** (2008), pp. 303-308.