領域積分方程式の離散化で得られるスパース行列のための反復解法

○ 東京理科大学　学生会員　岩崎健太郎
東京理科大学　正会員　東平光生
東京理科大学　正会員　佐伯昌之

1 はじめに

領域積分方程式は，波動方程式の解と媒質の揺らぎを直接結びつける数学的な利点を有している．しかし，スタンダードな離散化手法を積分方程式に適用すると，積分方程式は大次元かつ密な行列に帰着される．そして，この問題は，実用に向けての大きな障害になっている．こうした背景の中で，著者の１人は，領域積分方程式に対してFourier変換のユニタリ性とHaar基底を用いた離散化手法を展開し，スパース行列を得る手法を展開してきた[1)]．しかしながら，このスパース行列に対して内積形式のGauss法を適用する限り，膨大な演算時間が要求される問題が残されてきた．本論文は，このスパース行列の解法に反復解法[2),3)]を用い，その有効性について検討を行う．

2 解析手法の概要

本論文では，揺らぎを持つ不均質な音響波動場を扱う．平面波が不均質領域で乱される状況を考えるとき，場の方程式は次式となる．

$$\Big(\nabla^2 + k^2 - q(\vec{x})\Big)u(\vec{x}) = 0, \quad \vec{x} \in \mathbb{R}^3 \tag{1}$$

ここに，∇^2 はラプラシアン，k は媒質の波数，q は媒質の空間変動を記す関数である．また，u は波動場の速度ポテンシャル，$\vec{x} \in \mathbb{R}^3$ は３次元空間の点である．この場の方程式は，次の領域積分方程式 (Lippmann–Schwinger 方程式) に変換できる[4)]．

$$u(\vec{x}) = f(\vec{x}) - \int_{\mathbb{R}^3} g(\vec{x},\vec{y})q(\vec{y})u(\vec{y})d\vec{y} \tag{2}$$

ここに，$f(\vec{x})$ は均質場を伝播する平面波，$g(\vec{x},\vec{y})$ はGreen関数で時間因子 $\exp(-i\omega t)$ で外向波となるように定めれば次式となる[5)]．

$$g(\vec{x},\ \vec{y}) = \frac{\exp(ik|\vec{x}-\vec{y}|)}{4\pi|\vec{x}-\vec{y}|} \tag{3}$$

ただし，$|\vec{x}-\vec{y}|$ は $\vec{x}$ と $\vec{y}$ との距離である．式 (2) を散乱波成分

$$v(\vec{x}) = u(\vec{x}) - f(\vec{x}) \tag{4}$$

に関するものに置き換え，Fourier 積分変換を実行すれば次式を得る．

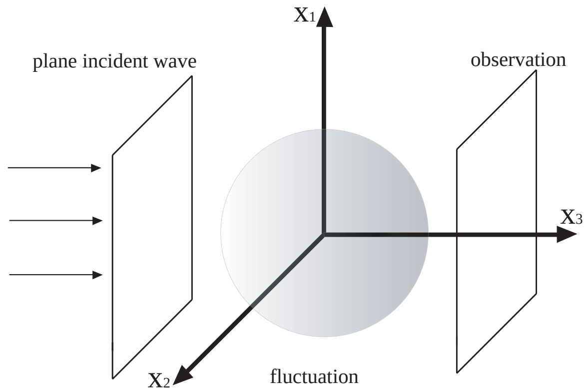

図 1: 本論文で扱う問題

$$\hat{v}(\vec{\xi}) = -\hat{h}(\vec{\xi})\hat{q}(\vec{\xi}-\vec{k}) - \hat{h}(\vec{\xi})\hat{w}(\vec{\xi}) \tag{5}$$

ただし，$\hat{w}$ は w の Fourier 変換で，w は次式で示される．

$$w(\vec{x}) = q(\vec{x})v(\vec{x}) \tag{6}$$

また，式 (5) の $\hat{h}$ は Green 関数の Fourier 変換に関連して現れる関数で次式で示される．

$$\hat{h}(\vec{\xi}) = \frac{1}{\xi^2 - k^2 - i\epsilon} \tag{7}$$

ここに，$\xi^2 = |\vec{\xi}|^2$ である．式 (5) と (6) はそれぞれ，波数領域と空間領域の方程式であるが，比較的容易に連立させることができる．そして，先の解析[1)]と同様に，Haar 基底による積分方程式の離散化でスパース行列を得る．

3 スパースな大規模行列の解法

反復解法には，定常反復解法[2)]と非定常反復解法[3)]の２つがある．定常反復解法は，以下の式で計算を行い，解の近似値を求めている．

$$\boldsymbol{x}^{(k)} = B\boldsymbol{x}^{(k-1)} + \boldsymbol{c} \tag{8}$$

ここで k は反復回数であり，B と $\boldsymbol{c}$ は反復回数 k に依存しない行列とベクトルである．定常反復解法の主な例に，Jacobi 法，Gauss-seidel 法，逐次的過剰緩和法 (SOR 法)，対称逐次的過剰緩和法 (SSOR 法) などが挙げられる．

キーワード：領域積分方程式，Fourier 積分変換，Haar 基底，スパース行列，定常反復解法，非定常反復解法
〒 278-8510 千葉県野田市山崎 2641 東京理科大学理工学部土木工学科 応用力学研究室 TEL:0471-24-1501(ex 4075)

これに対して，非定常反復解法は各反復ごとに変化する情報を計算に取り込む特徴がある．近年では，この非定常反復解法は，クリロフ部分空間反復解法として位置づけられ，アーノルディ原理とランチョス原理に大別される．アーノルディ原理とは，正則な N×N 行列 A と非ゼロベクトル $\boldsymbol{u}_1$ からベクトル列 $\{\boldsymbol{u}_1, A\boldsymbol{u}_1, \cdots, A^{m-1}\boldsymbol{u}_1\}$ を作り，グラム-シュミットの直交化法を施すことで，部分空間の正規直交系を生成するプロセスのことである．ランチョス原理とは，正則な行列 A をエルミート行列としてアーノルディ原理と同様の操作を施したプロセスのことである．

今回は特に定常反復解法から Gauss-seidel 法，非定常反復解法のランチョス原理から Bi-CGSTAB 法，Bi-CGSTAB2 法，アーノルディ原理から GCR 法を取り上げ，反復解法の適用可能性を検討する．

4 数値計算結果

積分方程式を離散化した行列の構造の一例を図 2 に示す．この行列は，約 9 万 ×9 万のスパース率 2.3% のものである．この行列を，それぞれの反復解法で解いた際の反復回数，経過時間を表 1 にまとめる．また，図 3 に，縦軸に対数スケールで相対誤差 ε，横軸に反復回数をとった収束グラフを示す．ただし，ここでの相対誤差は，連立方程式を $Ax = b$ の近似解を x_0 としたとき，

$$\epsilon = \frac{\|Ax_0 - b\|}{\|b\|} \tag{9}$$

と定義している．図 3 の凡例は上から，Gauss-seidel 法，GCR 法，Bi-CGSTAB 法，Bi-CGSTAB2 法となっている．表 1 および図 3 の結果から，どの反復解法においても，今回の問題においては少ない反復回数，短い経過時間で解けることが分かる．特に，今回の例題においては Gauss-seidel の反復解法が最もよい収束性を得ている．

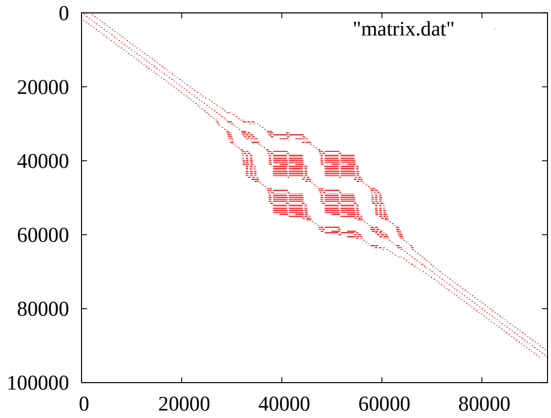

図 2: 離散化し得られる行列構造の 1 例

表 1: 反復回数と経過時間の比較

解法	反復回数	経過時間
Gauss-seidel 法	2 回	6 秒
GCR 法	2 回	7 秒
Bi-CGSTAB 法	2 回	6 秒
Bi-CGSTAB2 法	2 回	5 秒

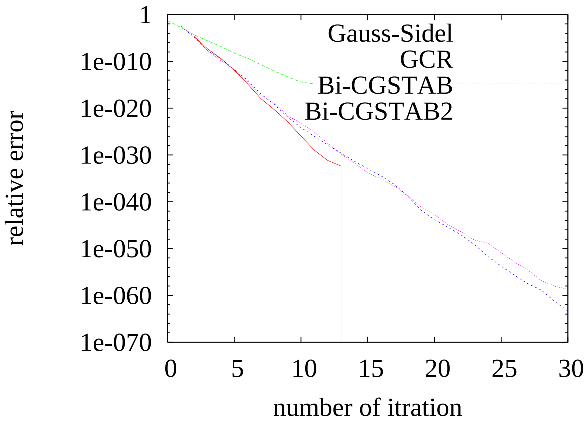

図 3: Gauss-seidel 法，GCR 法，Bi-CGSTAB 法，Bi-CGSTAB2 法の収束グラフの比較

5 むすび

本論文では，領域積分方程式の離散化で得られるスパース行列にいくつかの反復解法を適用し，それらの比較を行った．ここで示した反復解法は，いずれも１０秒以内の経過時間と数回の反復回数で解を得ることが分かった．同様な規模の行列に対して，内積形式の Gauss 法を適用した場合，経過時間は約 1 時間 30 分であり，反復解法は，連立方程式に対する経過時間を激減させている．

しかし，波動場の媒質の揺らぎによっては行列のスペクトル特性は変化し，これに応じて反復解法の性状も変化することも予想できる．今後は，様々な揺らぎに対するテスト計算を通じて，反復解法への知見を拡大する必要がある．

6 参考文献

1) 東平光生：波数領域の定式化に基づく領域積分方程式の数値解法について．土木学会論文集 No.808/I-74，163-173，2006.1
2) 小国力編著：「行列計算ソフトウェア」，丸善, 1998.
3) 張紹良，長谷川里美，長谷川秀彦，藤野清次：反復法の Templates，朝倉書店，1996.
4) Colton,D. and Kress, R.: *Inverse acoustic and electromagnetic scattering theory*, Berlin, Springer, 1998.
5) 今村勤：物理とグリーン関数，岩波書店.