

2次元 Helmholtz 方程式における 改良された多重極法と前処理について

On the improvement and preconditioning for FMM for Helmholtz' equation in 2D

大谷佳広* 西村直志**

Yoshihiro Otani and Naoshi Nishimura

*学生会員 京都大学大学院工学研究科 社会基盤工学専攻
(〒 606-8501 京都市左京区吉田本町)

**正会員 工博 京都大学学術情報メディアセンター教授
(〒 606-8501 京都市左京区吉田本町)

In the fast multipole method for Helmholtz' equation, one usually uses the conventional FMM for low frequency problems and the diagonal forms for high frequency problems. This is because the conventional FMM is inefficient in high frequency problems while the diagonal form breaks down in low frequency problems. It is, however, desirable to have one single code which covers the whole frequency range from the point of view of the efficiency. In this paper, we develop a fast method of analysis for Helmholtz' equation in 2D which can handle any frequency by switching between the diagonal form and the conventional multipole method in the process of the calculation. We also investigate preconditioners which reduce the number of iterations required to solve linear equations for BIEM.

Key Words : BIEM, FMM, Helmholtz, diagonal form, preconditioning

1. 序論

境界積分方程式においては、係数行列を陽に評価するためには要素数 N に対して $O(N^2)$ の計算量が必要であり大規模問題を解く際のボトルネックになっていた。しかし近年、計算量を軽減する手法の一つとして多重極法が提案され、研究が進んでいる。多重極法では近傍の要素からの影響は直接計算するが、遠方からの影響は多重極展開としてまとめて計算する。これにより Laplace 方程式では係数行列とベクトルの積の計算量が $O(N)$ になるとされている¹⁾。

しかし、例えば 2次元 Helmholtz 方程式において高周波問題を考えた場合、波長当たりの要素数を一定に保つ必要から要素数 N は波数に比例して増加すると考えられる。このような問題においては、従来型多重極法では係数行列とベクトルの積の計算量が $O(N^2)$ となり、計算量が著しく増大する³⁾。このため、高周波波動問題では diagonal form と呼ばれる手法を適用せねばならない²⁾。この手法は、多重極法において現れる展開係数に高速フーリエ変換を施すことにより、後述の M2L³⁾等に現れる密行列とベクトルの積の計算を対角行列とベクトルの積の計算に変換し、計算量を減少させるものである。diagonal form を用いると係数行列とベクトルの積の計算量は少なくとも $O(N \log^2 N)$ となる。

しかし、低周波問題に diagonal form を用いると桁落ちが生じ、計算精度が著しく損なわれることが知られて

いる³⁾。そのため、これまでは低周波問題では従来の多重極法を用い、高周波問題では diagonal form を用いるというように、使い分けがなされていた。しかし後で示すように低周波、高周波という分け方は本質的ではなく、従来の使い分けは精度、効率の両面から再検討を必要とする。そこで本論文では、第一段階として定式化の易しい 2次元無限領域のクラックによる波動散乱問題を取り上げ、あらゆる周波数に対応できるよう改良された解析手法を提案する。

さらに、多重極法では境界積分方程式を離散化して得られた連立一次方程式 $Ax = b$ を反復法で解くが、対象とする問題によっては係数行列 A の性質が非常に悪い場合があり、その場合反復計算は収束性が悪い。 Ax の計算が $O(N \log^2 N)$ でできたとしても全体の計算時間はそれに反復回数を掛けたものになるので、収束性の改善は重要である。そこで本論文では種々の前処理の効果を数値実験によって調べ、収束性の改善を検討した。

本論文の構成は以下の通りである。まず、第 2 節において、境界積分方程式、多重極法、diagonal form の定式化について述べ、数値解析の準備を行なう。第 3 節では、第 2 節で行なった定式化をもとに「切替え diagonal form の方法」を提案し、手法の詳細や解析結果について述べる。第 4 節では、反復解法の収束性の改善について述べる。最後に第 5 節で結論と今後の課題を述べる。

2. 定式化

本節では、参照の便宜のため、2次元 Helmholtz 方程式の境界積分方程式法と、その多重極法に必要な諸式を示す。多重極法の詳細は Rokhlin²⁾を参照されたい。

2.1 境界積分方程式

2次元 Helmholtz 方程式に支配されるクラック波動問題を考える。即ち、基礎方程式

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

をクラック上での境界条件

$$\frac{\partial u}{\partial n} = 0 \quad \text{on } S \quad (2)$$

及び、散乱波 $u - u_I$ に対する放射条件の下で解く。ここに、 k は波数、 u_I は入射波である。また、 D は $\mathbb{R}^2 \setminus S$ を、 S はクラックを表す。 $\partial/\partial n$ はクラックの法線方向微分である。

解の積分表現は次のようになる。

$$u(x) = u_I(x) + \int_S \frac{\partial G}{\partial n_y} \phi(y) ds_y \quad (3)$$

ここに、 ϕ はクラックの開口変位、 G は2次元 Helmholtz 方程式の基本解であり、

$$G = \frac{i}{4} H_0^{(1)}(k|x-y|) \quad \text{in } D \quad (4)$$

である。ただし、 $H_0^{(1)}$ は0次の第1種 Hankel 関数である。

式(3)をクラックの法線方向に微分した後に x をクラック上の点 x_0 に近付けると、境界積分方程式

$$\frac{\partial u_I}{\partial n_x}(x_0) + \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{\partial}{\partial n_x} \int_S \frac{\partial G}{\partial n_y} \phi(y) ds_y = 0 \quad \text{on } S \quad (5)$$

が得られる。

2.2 基本解の展開

2次元 Helmholtz 方程式の基本解は

$$|\vec{Ox}| > |\vec{Oy}| \quad (6)$$

のとき、次のように展開される。

$$G(x-y) = \frac{i}{4} \sum_{n=-\infty}^{\infty} O^n(\vec{Ox}) I^{-n}(\vec{Oy}) \quad (7)$$

ここに、

$$O^n(x) = i^n H_n^{(1)}(kr) e^{in\theta} \quad (8)$$

$$I^n(x) = (-i)^n J_n(kr) e^{in\theta} \quad (9)$$

であり、 J_n は n 次の Bessel 関数、 (r, θ) はベクトル x の極座標である。

2.3 多重極モーメント、局所展開係数

式(3)の第2項の積分をクラック S の部分集合 S_0 上で実行し(7)を用いると次式が得られる。

$$\int_{S_0} \frac{\partial G}{\partial n_y} (x, y) \phi(y) ds_y = \frac{i}{4} \sum_{n=-\infty}^{\infty} O^n(\vec{Ox}) M_{-n}(O) \quad (10)$$

ここに、 x は S_0 から遠い点であり、 M_n は多重極モーメントで

$$M_n(O) = \int_{S_0} \frac{\partial I^n(\vec{Oy})}{\partial n_y} \phi(y) ds_y \quad (11)$$

と定義される。ただし、 $|\vec{Ox}| > \max_{y \in S_0} |\vec{Oy}|$ が成り立つように(10)において原点 O は S_0 に近いと仮定する。

式(10)の原点を移動する M2M³⁾公式は次のように書ける。

$$M_n(O) = \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} I^{n-\nu}(\vec{OO'}) M_\nu(O') \quad (12)$$

式(10)を局所展開の形に書くと、

$$\int_{S_0} \frac{\partial G}{\partial n_y} (x, y) \phi(y) ds_y = \frac{i}{4} \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n I^n(\vec{O'x}) L_{-n}(O') \quad (13)$$

となる。ここに O' は x の近傍にとる。式(13)より、 x_0 が S_0 に含まれていないならば、次式が成り立つ。

$$\lim_{x \rightarrow x_0} \frac{\partial}{\partial n_x} \int_{S_0} \frac{\partial G}{\partial n_y} (x, y) \phi(y) ds_y = \frac{i}{4} \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n \frac{\partial}{\partial n_x} I^n(\vec{O'x_0}) L_{-n}(O') \quad (14)$$

ここに、 x_0 は O' の近くに存在するものとする。局所展開係数 L_n は次の M2L 公式により M_n と関係づけられる。

$$L_n(O') = \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} O^{n-\nu}(\vec{OO'}) M_\nu(O) \quad (15)$$

局所展開の原点は次の L2L³⁾公式により移動できる。

$$L_n(O') = \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} I^{n-\nu}(\vec{O'O}) L_\nu(O) \quad (16)$$

2.4 diagonal form

前節で定義された M_n, L_n, O^n を次のように有限フーリエ変換する。

$$F(q; O) = \sum_n e^{-inq} M_n(O) \quad (17)$$

$$H(q; O') = \sum_n e^{-inq} L_n(O') \quad (18)$$

$$\nu(q; \mathbf{x}) = \sum_{n=-p}^p e^{-inq} O^n(\mathbf{x}) \quad (19)$$

ここに p は打ち切り項数である。式(17)、(18)は収束列であるが、式(19)は発散列であり、有限項で打ち切る事が本質的である事に注意する。ここで、恒等式

$$\sum_n e^{-inq} I^n(\mathbf{x}) = e^{-ik\hat{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (20)$$

を用いると、M2M、M2L、L2L公式はそれぞれ

$$F(q; O) = e^{-ik\hat{k}\cdot\overline{OO'}} F(q; O') \quad (21)$$

$$H(q; O') = \nu(q, \overline{OO'}) F(q; O) \quad (22)$$

$$H(q; O') = e^{ik\hat{k}\cdot\overline{OO'}} H(q; O) \quad (23)$$

となる。ここに、

$$\hat{k}(q) = (\cos(q), \sin(q)) \quad (24)$$

である。

3. 改良された多重極法を用いた解析

3.1 従来型多重極法の計算手順

(1) 領域の階層構造

多重極法は空間に階層構造を採り入れる。ここでは2次元空間に4分木構造を用いることにする。4分木構造を得るためには、まずクラック全体を含む正方形(ルート)を取る。次にその正方形を4等分して4つの子セルを作成し、境界要素をそれぞれのセルに分配する。この4分割の操作を順次子のセルについて行なっていく。セルに含まれる境界要素数があらかじめ定めた値以下になった場合、そのセルについてはそれ以上の分割を行なわない。このように、それ以上分割されず子セルを持たないセルをリーフという。解析対象が局所的に細かい構造をしていると境界要素の密度が大きくなるので最大レベルは大きくとる必要がある。解析領域を全て含むセルをレベル0のセルといい、その 2^n 分の1のサイズのセルをレベル n のセルという。この4分割操作を分割対象のセルが無くなるか、枝の深さがある値になるまで繰り返す。このようにして生成したすべてのセルにおいてその中心点における多重極展開が計算され、セルから離れた点における波動場の値を計算するために使われる。

(2) リーフからルートへの計算

リーフのセルに含まれるすべての境界要素の、セル中心に関する多重極展開を(11)によって計算し加え合わせる。次に親のセルに移り(12)によって親のセルが含むすべての子セルの多重極モーメントの中心を親セルの中心に移動して足し合わせる(M2M)。これを順次ルートの方へ向けて繰り返す。

(3) ルートからリーフへの計算

自分と同じレベルのセルで、離れている(隣接していない)が親のセルの近傍(隣接またはそれ自身)には含まれるようなセルがあった場合、(15)を用いてそのセルの多重極展開を自分の局所展開に変換して足し合わせる(M2L)。

親のセルの局所展開は(16)を用いて局所展開の中心を自分のセルの中心に移動して自分のセルの局所展開に加える(L2L)。

以上の計算をルートからリーフに向けて繰り返す。リーフのセルに至れば(14)を用いると(5)の第2項の積分のうち遠方からの影響がすべて計算できたことになる。

(4) 近傍からの影響の評価

式(5)第2項の積分のうち近傍のセルに含まれる境界要素からの影響は直接計算する。

3.2 切替え diagonal form の導入

diagonal form では、(12)、(15)、(16)の計算を高速化するため有限フーリエ変換(17)、(18)、(19)を行ないM2M、M2L、L2Lの計算量を減少させる。ただし、(19)の計算は前述のように発散数列の和を取っているため無限和の打ち切り項数 p を大きく取り過ぎると計算が桁落ちし情報が失われる。しかし、 p を小さく取り過ぎると計算精度が悪くなる。 k を波数、 d をセルの対角線長さとする、一般に、 kd が大きいと p を大きくとることができ、計算精度を確保することができるが、 kd が小さいと p が小さい段階で桁落ちが生じ計算精度が出ない。従来、低周波問題には級数展開型の多重極法を用い高周波問題にはdiagonal formを用いるというように、問題毎に解法の使い分けがなされてきた。しかし、3.1(1)節の記述からわかるように、同じ問題でもレベル0から最大レベルまで様々なサイズのセルについて多重極展開を計算する必要があるため、diagonal formを使い得るレベルと、そうでないレベルが混在する事があり得る。このため、従来の定式化の使いわけは必ずしも適切でない事がわかる。

そこで本論文ではあらゆる周波数に対応できる解析手法を提案する。具体的には多重極法のリーフからルートへの計算においてレベルが大きい(つまり kd が小さい)段階では従来法を用い、計算が進んで十分レベルが小さく(つまり kd が大き)なりdiagonal formを用いても十分計算精度が出る段階に達すると(17)、(18)、(19)を用いてdiagonal formに切替える。また、ルートからリーフへの計算においてはこの逆、つまりレベルが小さい段

階では diagonal form を使い、レベルが大きくなると従来法に切替える。これにより、計算精度を保ちつつ計算の高速化を図ることができると予想される。

(1) diagonal form の計算精度と桁落ちに関する数値実験

従来の級数展開と diagonal form をどのレベルで切替えればよいのか、 p はどの程度にすればよいのかを決定するため数値実験を行なった。

diagonal form による基本解の展開の表現は次のようである²⁾。

$$G(x - y) = \frac{i}{8\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-ik \cdot \eta} \nu(q; \xi) dq \quad (25)$$

ただし、

$$k(q) = (\cos(q), \sin(q)) \quad (26)$$

$$\xi = X - Y \quad (27)$$

$$\eta = x - X + Y - y \quad (28)$$

であり、 X, Y はそれぞれ x, y の近傍の点である。

ここでは、 x, y, X, Y が図 1 のような配置になっている時について数値実験を行なう。これは、この配置の時基本解の展開

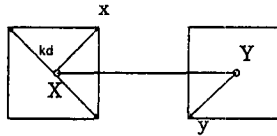


図-1 x, y, X, Y の位置関係

の誤差が最も大きくなるからである。

式(25)の右辺の数値積分結果の相対誤差と、従来法での展開式(7)を用いた時の相対誤差、そして以下に示す2種類の経験式を、項数 p を横軸にとり、さまざまな kd についてプロットした。経験式は次の2つで、前者は Song, Chew の式⁴⁾、後者は Rokhlin⁵⁾ の式である。

$$p = kd + 1.8c^{2/3} (kd)^{1/3} \quad (29)$$

$$p = kd + c \log(kd + \pi) \quad (30)$$

ただし、 c は必要とする精度(桁数)である。数値実験の例を図 2 に示す。計算精度は倍精度とした。縦軸の相対誤差は常用対数値である。

図 2 からわかるように、項数 p が小さいうちは桁落ちが起こらず、diagonal form と従来法の結果は一致するが、 p が大きくなると diagonal form の精度が悪化する。従って、diagonal form が使えるのは、従来法が所望の精度に達する p よりも大きな p で桁が落ち始める場合である。数値実験によれば 10^{-6} の精度を求めるならば、やや安全側ではあるが、 $kd < 15$ では従来の級数展開を用い、 $kd \geq 15$ では diagonal form を用いれば良いことが分かる。精度を 10^{-6} としたのは、実用的には3桁程度で十分な事が多いため、それに多少の余裕を見込んだものである。項数は(30)において $c = 6.0$ とし、この式で

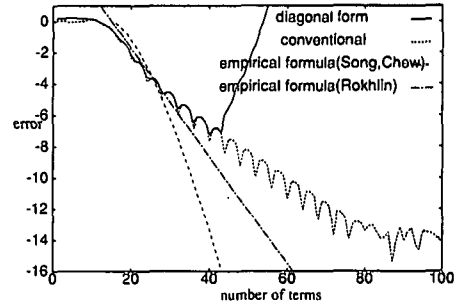


図-2 種々の多重極展開公式の相対誤差と打ち切り項数 ($kd = 15$)

計算される p が 40 を下回る時には $p = 40$ とすれば問題ないことが分かった。表 1 に、従来法で 10^{-6} の精度を出すのに実際に必要な項数と(30)により計算される項数、diagonal form 桁落ち開始項数を kd の値ごとに示す。

表-1 10^{-6} の精度を出すのに必要な項数

kd	実際に必要な項数	式(30)により計算される項数	diagonal form 桁落ち開始項数
5	32	18	24
10	35	26	34
15	36	33	43
20	40	39	51
25	44	46	58
50	69	74	87
100	124	128	149
200	231	232	290
400	439	436	580

(2) 数値解析結果

以下では、波数が $k = 1$ 、すなわち波長 $\lambda = 2\pi$ となるように長さの単位を選ぶ。その上で、図 3 のように全長 5 のクラックがクラック中心間隔 15 で縦 30 列、横 30 列に並んでいる場合を考える。クラック 1 本当たりの境界要素数は 40 である。入射波

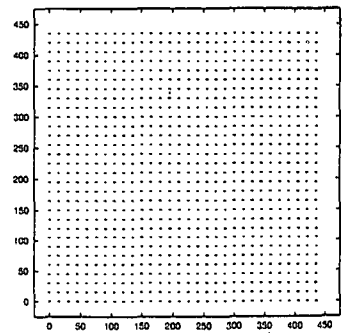


図-3 クラック配置 (lv0,lv5,lv7)

は図 3 において下から入射する平面波である。全未知数は $30 \times 30 \times 40 = 36000$ 、1つのリーフの最大境界要素数は 30 である。反復解法は GMRES(300) を使い、前処理はクラック 1 本の逆行列を掛ける方法とした。これら

の詳細は4節で述べる。

この問題はクラックが広範囲に分布しているため diagonal form を使わなければ計算量が増えてしまう。しかし、クラック1本が小さく境界要素が密集しているためセルはかなり細かく分割する必要がある。小さいセルに diagonal form を適用しようとするとは桁落ちを起こす。従って切替え diagonal form を用いると非常に効果的な問題であるといえる。

全く diagonal form を用いないケース (lv0)、レベル5から diagonal form に切替えたケース (lv5)、レベル7 (最深レベル) から diagonal form を用いたケース (lv7) の3通りを扱った (括弧内は問題名を表す)。

結果は表2の通りである。lv0とlv5は計算が収束し解が一致したのに対し、lv7は計算が収束しなかった。これは桁落ちが起こったからであると考えられる。反復1回当たりの計算時間では、lv7、lv5、lv0の順に短かった。diagonal form により高速化が実現したことが分かる。

表-2 切替え diagonal form の数値解析結果

問題	切替えレベル	切替えレベルのセル直径	計算時間 ×10 ⁴ (s)	反復回数	反復一回当たり計算時間 (s)
lv0	-	-	3.78	495	76.4
lv5	5	19.4	1.39	501	27.8
lv7	7	4.87	収束せず	収束せず	10.5

4. 収束性の改善

次に、様々な種類の前処理を用い収束性、計算時間、所要メモリーを検討する。

扱った前処理は、point Jacobi 法、直接計算部分に対する ILU 法、クラック数本の逆行列を掛ける方法、直接計算部分に対する簡易 ILUT 法、厳密な固有値を求め改善する方法、GMRES の Arnoldi 過程から係数行列 A の特異値を近似する方法、Hankel 関数を掛ける方法である。

反復解法として用いたのは BiCGSTAB 法と、GMRES(300) 法である⁶⁾。前者はメモリーが少なく済むのが特徴である。ただし、反復毎に残差が小さくなる保証はない。後者は所要メモリーが大きいものの残差は反復毎に確実に減少する。ただし、反復回数がリスタート周期 (ここでは 300) を超えると残差が急に停滞し収束しなくなることがある。

以下、前処理行列を M と書く。

4.1 検討した前処理

(1) Point Jacobi 法

係数行列 A の対角部分を前処理行列 M とするものである。

(2) 直接計算部分に対する ILU 法

多重極法において近傍のセルからの影響は直接計算する。この部分は係数行列の中で比較的絶対値の大きい部分であると考えられる。従って、係数行列 A の中の直接計算に相当する部分のみの行列を A の近似行列としこれを不完全 LU 分解 (ILU) して前処理に用いると効果が高いと考えられる。

(3) クラック数本の逆行列を掛ける方法

係数行列の中でクラック1本あるいは隣接する数本の上にある境界要素相互の影響を表す部分は、対角付近にブロック状に存在する。

$$A = \begin{pmatrix} B & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & B & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & B \end{pmatrix} \quad (31)$$

ここに、 B はクラック1本または数本の上にある境界要素相互の影響を表すブロックである。従ってこのブロックの逆行列を掛ければ係数行列の対角付近を単位行列に近くすることができる。

本論文で扱っている問題は同じ形状のクラックが何本もなっているので、一度ブロックの逆行列 (あるいは LU 分解) を計算しておけばそれを再利用することができ、メモリーと計算量が非常に少なくなる。

(4) 直接計算部分に対する簡易 ILUT 法

係数行列 A の多重極法における直接計算部分に対して簡易な ILUT 法⁷⁾ を適用する。ILU 法では下三角行列、上三角行列の非零要素位置は係数行列 A の直接計算部分 M の位置に限られていた。これは、計算量やメモリー必要量を抑えるためである。これに対し ILUT 法は前処理の効果をもっと高めるために fill in を許し、 $M = LU$ を満たす下三角行列 L 、上三角行列 U の要素のうち一定の大きさ以上のものを大きい順に決められた数だけ選び出し、残りを零とするものである。ここではこれを簡便にし、ある一定以上の大きさならば全て残すことにする。fill-in の打ち切り基準を 0、あるいは 0 に近くすると前処理の効果は非常に高くなるが、前処理にかかる計算時間や必要メモリーも非常に大きくなることが予想される。

(5) 厳密な固有値を求め改善する方法

反復計算の収束性は係数行列の固有値分布に左右される。固有値が原点からはなれたある一点の周りに集まっているほど収束は速くなる。逆に原点を囲むように固有値が広く分布していると収束は遅くなる。そこで係数行列 A の固有値のうち絶対値の大きいもの、(あるいは小さ

いもの) から k 個を 1 に変換するような前処理を考える⁸⁾。

A の絶対値の大きい (小さい) k 個の固有値に属する不変部分空間の直交基底を V_k とする。すると

$$H_k = V_k^H A V_k \quad (32)$$

で定義される行列 H_k の固有値は、 A の絶対値の大きい (小さい) k 個の固有値に一致する。また、 V_k の直交補空間の直交基底を W_{n-k} とすると

$$W_{n-k} W_{n-k}^H = I_n - V_k V_k^H \quad (33)$$

の関係を満たす。ここで

$$M = V_k H_k V_k^H + W_{n-k} W_{n-k}^H \quad (34)$$

とおく。するとこの逆行列は

$$\begin{aligned} M^{-1} &= V_k H_k^{-1} V_k^H + W_{n-k} W_{n-k}^H \quad (35) \\ &= \begin{pmatrix} V_k & W_{n-k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_k^{-1} & 0 \\ 0 & I_{n-k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_k^H \\ W_{n-k}^H \end{pmatrix} \end{aligned}$$

で与えられる。

ここで A の固有値は

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} V_k^H \\ W_{n-k}^H \end{pmatrix} A \begin{pmatrix} V_k & W_{n-k} \end{pmatrix} \quad (36)$$

$$= \begin{pmatrix} H_k & \tilde{A}_{12} \\ 0 & \tilde{A}_{22} \end{pmatrix} \quad (37)$$

のそれと同じである。 H_k は A の絶対値の大きい (小さい) k 個の固有値を持つので \tilde{A}_{22} は A の残りの $n-k$ 個の固有値を持つ。従って、

$$M^{-1} A = \begin{pmatrix} V_k & W_{n-k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_k & H_k^{-1} \tilde{A}_{12} \\ 0 & \tilde{A}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_k^H \\ W_{n-k}^H \end{pmatrix} \quad (38)$$

は A の絶対値の小さい (大きい) ものから $n-k$ 個の固有値を持ち、残りの k 個の固有値は全て 1 である。このようにして係数行列 A の固有値を改善する。

本研究では係数行列 A そのものを改善するのではなく、(2) で述べた直接計算部分に対する ILU による前処理を A に適用した後の行列を改善することにより、さらなる効果増大を狙った。固有値ならびに不変部分空間の基底は固有値計算パッケージ ARPACK によって求めた。

固有値を求めるためには少なくとも求める固有値の数だけ係数行列 A とベクトルの積を計算する必要がある。したがって収束に至るまでの反復回数は改善されてもトータルの計算時間は減少しない可能性がある。また固有値に属する不変部分空間の基底を固有値の数だけ記憶するため必要メモリーも多くなる。

(6) GMRES の Arnoldi 過程から係数行列 A の特異値を近似する方法

収束性は特異値の分布に影響されると考えられる。特異値の最大値と最小値の比が大きいほど収束は遅くなる。そこでここでは特異値分布を改善して収束性を改善しようと試みる。係数行列 A が次のように特異値分解されていたとする。

$$A = U \Sigma V^H \quad (39)$$

ただし、 U 、 V は直交行列、 Σ は対角行列である。

Σ の対角成分 Σ_{ii} のうち、ある k 個を $1 - \Sigma_{ii}$ に変え、残りの要素を 0 とした行列を Γ とする。また、 U 、 V 、 Γ 、 Σ^{-1} の変換した特異値に対応する部分を U_k 、 V_k 、 Γ_k 、 Σ_k^{-1} とする。ここで、

$$M^{-1} = (I + U_k \Gamma_k \Sigma_k^{-1} U_k^H) \quad (40)$$

とすると

$$M^{-1} A = U (\Sigma + \Gamma) V^H \quad (41)$$

となり、 k 個の特異値が 1 に変換される。

本研究では係数行列 A そのものを改善するのではなく、(2) で述べた直接計算部分に対する ILU による前処理を A に適用した後の行列を改善することにより、さらなる効果増大を狙った。

特異値分解は、反復解法 GMRES の最初にリスタートがかかるまでの Arnoldi 過程より得られる上 Hessenberg 行列の特異値分解で近似した。(5) の方法では固有値を求めるのに多くの計算時間を費やすが、この方法ではそれが不要である。しかし改善する特異値の数だけ長さ n のベクトルを記憶する必要があるため、メモリーを消費することには変わりはない。近似した特異値が真の特異値にどの程度近いかで前処理の効果が左右されると考えられる。

(7) Hankel 関数を掛ける方法

式(5)の第2項の積分をフーリエ変換することを考える。基本解 $G(x_1, x_2)$ は

$$(\Delta^2 + k^2) G = -\delta \quad (42)$$

を満たす。従って、 G のフーリエ変換を \hat{G} とすると、

$$\hat{G} = \frac{1}{\xi^2 + \eta^2 - k^2} \quad (43)$$

である。ただし ξ は x_1 、 η は x_2 についてのフーリエ変換に対応する。これに η^2 を乗じたものを x_2 についてフーリエ逆変換した後、 $x_2 \rightarrow 0$ の極限をとると

$$\frac{-i\sqrt{k^2 - \xi^2}}{2} \quad (44)$$

となる。

長さ無限大のクラックが x_1 軸上に存在する場合、(5) 第2項の積分はコンボリューションの形になる。その時 ϕ のフーリエ変換を $\hat{\phi}$ とすると第2項の積分のフーリエ変換は

$$\frac{-i\sqrt{k^2 - \xi^2}}{2} \hat{\phi} \quad (45)$$

となる。一方、基本解 $G = \frac{i}{4} H_0^{(1)}$ を x_1 についてフーリエ変換した後に $x_2 \rightarrow 0$ とすると

$$\frac{i}{2\sqrt{k^2 - \xi^2}} \quad (46)$$

となる。これより、(5) において第2項の積分が ϕ に対する作用素であると解釈すると、その逆作用素は $4H_0^{(1)}$ とコンボリューションをとることであると考えられる。

そこで今回は、有限の長さのクラックの問題においても前処理として同様のコンボリューションを離散化した形で実行し、係数行列をできるだけ単位行列に近づけようと試みた。具体的には多重極計算を2回行なうことにより $M^{-1}A\phi$ を計算している。

4.2 数値解析結果

扱った問題は図4の様にクラックが疎に配置されているもの、図5のようにクラックが密に配置されているもの、クラックが箱型のものの3群に分けられる。

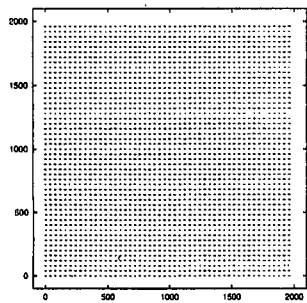


図-4 疎なクラック配置の例 (s6)

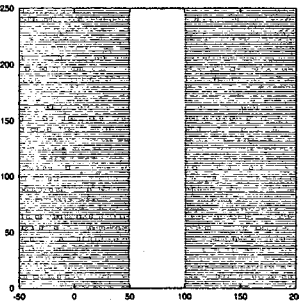


図-5 密なクラック配置の例 (d4)

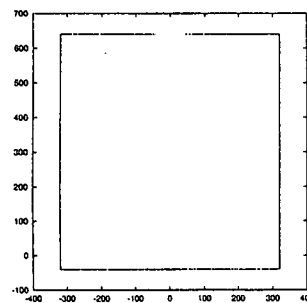


図-6 クラック配置 (b1)

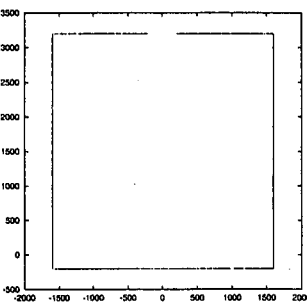


図-7 クラック配置 (b2)

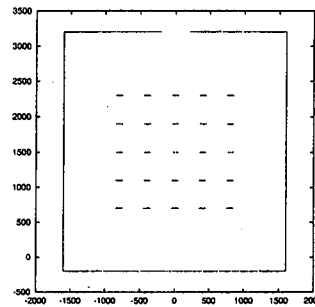


図-8 クラック配置 (b3)

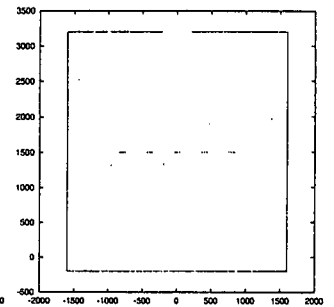


図-9 クラック配置 (b4)

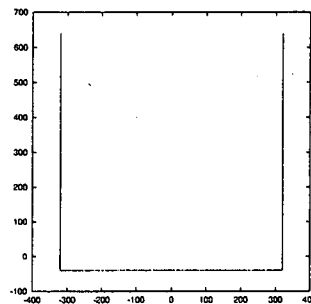


図-10 クラック配置 (b5)

疎な問題では6例、密な問題では4例、箱型の問題は5例扱った。クラックの長さや本数など、問題の詳細は表3、4、5に示す。なお、箱型の問題のクラック配置は、図6、7、8、9、10のとおりである。波長は全て 2π である。入射波は疎な問題と密な問題では下から入射する平面波である。箱型の問題では原点の点波源(基本解)を考える。特に断らない限り1つのリーフの最大境界要素数は30である。

表-3 疎な問題: クラック長 = 20.0、クラック同士の中心間隔 = 40.0

問題	未知数	クラック配置 縦 × 横
s1	10240	16 × 16
s2	16000	20 × 20
s3	25000	25 × 25
s4	36000	30 × 30
s5	64000	40 × 40
s6	100000	50 × 50

表-6 疎な問題 計算時間 (秒)

問題	a	b	c	d
s1	3.61×10^4	2.26×10^3	1.34×10^3	1.29×10^3
s2	1.51×10^5	6.64×10^3	4.37×10^3	3.98×10^3
s3	4.25×10^5	1.46×10^4	9.34×10^3	9.29×10^3
s4	-	2.90×10^4	1.32×10^4	1.29×10^4
s5	-	1.56×10^5	8.18×10^4	7.11×10^4
s6	-	3.01×10^5	1.75×10^5	1.42×10^5

表-4 密な問題: 問題 d1 のクラック長 =50.0、他の問題のクラック長 =100.0、クラック同士の中心間隔: 縦 =2.0、横 =125.0

問題	未知数	クラック配置 縦 × 横
d1	2500	25 × 1
d2	20000	50 × 1
d3	20000	50 × 2
d4	50000	125 × 2

表-5 箱型の問題

問題	未知数	問題	未知数
b1	10240	b4	53200
b2	51200	b5	8000
b3	61200		

表-7 疎な問題 反復回数

問題	a	b	c	d
s1	545	219	254	248
s2	725	291	381	369
s3	931	383	501	540
s4	-	851	769	769
s5	-	1315	1467	1406
s6	-	2384	2596	2329

表-8 疎な問題 所要メモリー (MB)

問題	a	b	c	d
s1	21.5	136	188	131
s2	35.5	214	294	206
s3	57.1	335	459	321
s4	-	522	701	502
s5	-	944	1.26×10^3	906
s6	-	1.49×10^3	1.98×10^3	1.43×10^3

(1) 疎なクラック配置の問題

計算時間は表 6、反復回数は表 7、所要メモリーは表 8 のようになった。なお、各ケース a~d の説明は表 8 の下にまとめて示した。反復解法ごとの比較では、GMRES(300)法が BiCGSTAB 法よりも反復回数、計算時間ともに速かった。ただし、所要メモリーは増加する。

前処理は所要メモリーの点では point Jacobi 法が最小であった。しかし反復回数、計算時間は非常に大きく実用的でない。反復回数、計算時間ではクラックの 1 本の逆行列を掛ける方法がわずかな例を除き最小であった。この方法は所要メモリーも少なく非常に有効な前処理であると言える。

(2) 密なクラック配置の問題

計算時間は表 9、反復回数は表 10、所要メモリーは表 11 のようになった。なお、各ケース a~i の説明は表 11 の下にまとめて示した。表中の '-' は計算時間がかかりすぎる、あるいは反復計算が収束する見込みが低いいため解析を行わなかったことを示す。

クラックが密に配置されていると収束性が非常に悪く、中には収束しないものもあった。

疎な問題の時と同じくクラックの逆行列を掛ける前処理が、計算時間、反復回数、所要メモリー全ての面において非常に有利であるという結果になった。固有値を改善する前処理では反復回数を減少させることができたが、固有値計算をする時間が長く、計算時間は逆に伸びた。簡易 ILUT 法は要素を選び出す基準を 0 にしたり、リーフの最大要素数を増やして直接計算の範囲を広げたりすると効果を発揮したが、それと引き替えに所要メモリーの大幅な増加を招いた。表 12 に下三角行列 L 、上三角行列 U の非零要素の係数行列 A に占める割合を示す。表 10 と比較すると前処理の効果が高いほど fill-in も多いことが分かる。

解析結果の例として問題 d2 のクラック開口変位を図 11 に示す。縦軸は開口変位の絶対値、横軸は x_1 軸であ

る。最も値が大きいのが、波が入射する方向から見て先頭に位置するクラックである。高周波の問題では先頭のクラックの開口変位が入射波の振幅の約 2 倍になり、2 列目以降のクラックの開口変位はほぼ 0 になるといわれている (高周波近似)。今回の結果においても高周波近似はある程度成り立っているといえる。

(3) 箱型の問題

ここでは、反復解法は GMRES(300)、前処理方法は直接計算部分に対する簡易 ILUT 法のみを用いた。fill-in の打ち切り基準は 0 とした。解析結果は表 13 の通りである。

問題 b3 と b4 を比較するとクラックが多数配置されている問題ほど収束性が悪いことが分かる。また、問題 b1 と問題 b2 はクラック配置が相似であり、問題 b2 の方が 5 倍大きく境界要素数も 5 倍である。しかし、反復回数は少なくなっている。このことから、反復回数は必ずしも未知数の数に影響される訳ではないことが分かる。問題

表-9 密な問題 計算時間 ($\times 10^3$ 秒)

問題	a	b	c	d	e
d1	収束せず	0.288	0.204	0.502	0.189
d2	収束せず	71.1	22.5	16.1	5.86
d3	収束せず	収束せず	収束せず	41.9	12.6
d4	収束せず	収束せず	収束せず	257	102

問題	f	g	h	i
d1	0.824 ⁽¹⁾ 1.76 ⁽²⁾	-	収束せず	1.36 (10^{-1}) 0.243 (10^{-2}) 0.208 (10^{-3}) 0.154 (0)
d2	30.0 ⁽¹⁾ 34.1 ⁽²⁾	21.8	-	21.9 (10^{-3}) 12.5 (0)
d3	収束せず ⁽¹⁾ 収束せず ⁽²⁾	収束せず	-	収束せず (0) 38.5 (0) ⁽¹⁾ 9.37 (0) ⁽²⁾
d4	収束せず ⁽²⁾	-	-	収束せず (0)

表-10 密な問題 反復回数

問題	a	b	c	d	e
d1	収束せず	44	59	163	47
d2	収束せず	578	525	370	115
d3	収束せず	収束せず	収束せず	917	253
d4	収束せず	収束せず	収束せず	2123	800

問題	f	g	h	i
d1	45 ⁽¹⁾ 15 ⁽²⁾	-	収束せず	460 (10^{-1}) 71 (10^{-2}) 57 (10^{-3}) 38 (0)
d2	.496 ⁽¹⁾ 242 ⁽²⁾	479	-	493 (10^{-3}) 267 (0)
d3	収束せず ⁽¹⁾ 収束せず ⁽²⁾	収束せず	-	収束せず (0) 2388 (0) ⁽¹⁾ 54 (0) ⁽²⁾
d4	収束せず ⁽²⁾	-	-	収束せず (0)

b1 と b5 は上のフタに相当する部分の有無だけが異なる。しかし収束性は格段に違うという結果になった。もし箱に開口部がなく全く閉じていたとすれば固有振動モードが存在する。問題 b1 は開口部が非常に狭く開口部のない場合の固有振動モードに近い振動が起こり得る。この振動モードが、係数行列 A の非常に小さい固有値を作り出していると考えられる。非常に小さい固有値は収束性の悪化につながる事から、固有振動モードに近い振動が生じ得るクラック配置かどうかで収束性が大きく変わることが推測される。

表-11 密な問題 所要メモリー (MB)

問題	a	b	c	d	e
d1	2.93	30.9	44.9	31.1	35.9
d2	15.7	233	331	226	303
d3	30.6	244	342	236	313
d4	60.0	604	846	579	655

問題	f	g	h	i
d1	52.1 ⁽¹⁾ 77.0 ⁽²⁾	-	41.8	31.3 (10^{-1}) 47.1 (10^{-2}) 54.6 (10^{-3}) 56.3 (0)
d2	411 ⁽¹⁾ 535 ⁽²⁾	455	-	535 (10^{-3}) 680 (0)
d3	421 ⁽¹⁾ 547 ⁽²⁾	462	-	562 (0) 993 (0) ⁽¹⁾ 1.12 $\times 10^3$ (0) ⁽²⁾
d4	1.35 $\times 10^3$ ⁽²⁾	-	-	1.50 $\times 10^3$ (0)

a:BiCGSTAB point Jacobi

b:BiCGSTAB 直接計算部分 ILU

c:GMRES(300) 直接計算部分 ILU

d:GMRES(300) クラック 1 列の逆行列

e:GMRES(300) クラック 5 列の逆行列

f:GMRES(300) 固有値を求めて改善

(¹): 大きいものから 40~50 個

(²): 大きいものから 210~250 個

g:GMRES(300) 特異値を近似して改善 (300 個)

h:GMRES(300) Hankel 関数とコンボリューション

i:GMRES(300) 直接計算部分簡易 ILUT (fill-in の基準)

無印:リーフ最大要素数 30

(¹): リーフ最大要素数 100

(²): リーフ最大要素数 150

5. 結論と今後の課題

第 3 節の議論から、2 次元 Helmholtz 方程式の多重極法において、切替え diagonal form を用いることによりあらゆる周波数の問題に対し高速で精度を落さず計算できる事が分かった。解析領域が広くかつ細かいセル分割を必要とするような問題にも diagonal form を適切なレベルから適用することができるようになったためである。

また、第 4 節より、前処理方法としては数本のクラックの逆行列を掛ける手法が非常に有効であることが分かった。しかし、この手法は同じ形状のクラックが周期的にいらんでいる時のみに適用可能であり、一般性がないのが欠点である。固有値を改善する手法や ILUT 法は計算時間や使用メモリーなどで難点があるものの収束性の改善にはある程度の効果を発揮した。

今後の課題としては、規則性のないクラック配置にも

表-12 簡易 ILUT 法 下三角行列 L , 上三角行列 U の非零要素

問題	リーフ 最大 要素数	fill in 基準	$L+U$ の A に しめる割合
d2	30	10×10^{-3}	0.0352
d2	30	0	0.0572
d3	30	0	0.0412
d3	100	0	0.0840
d3	150	0	0.0927
d4	30	0	0.0184

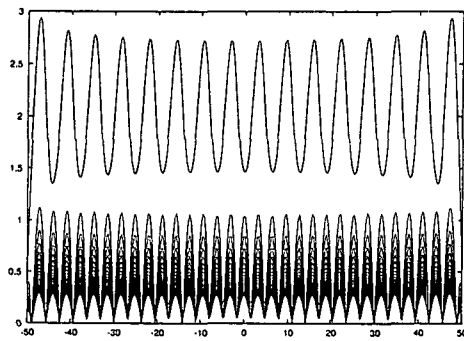


図-11 クラックの開口変位の絶対値 (問題 d2)

表-13 数値解析結果 (箱型の問題)

問題	計算時間 (秒)	反復回数
b1	6.64×10^3	1190
b2	4.27×10^4	973
b3	9.70×10^4	1767
b4	3.54×10^4	962
b5	2.25×10^2	43

適応でき、かつ所要メモリや計算時間を低く押えられるような前処理方法を開発することが挙げられる。

参考文献

- 1) 小林昭一 (編): 波動解析と境界要素法, 京都大学出版会, 2000.
- 2) Rokhlin, V.: Rapid solution of integral equations of scattering theory in two dimensions, Journal of Computational Physics, Vol.86, pp.414-439, 1990
- 3) Nishimura, N.: Fast multipole accelerated boundary integral equation methods, Applied Mechanics Reviews, Vol.55, pp.299-324, 2002.
- 4) Song, J.M. and Chew, W.C.: Error analysis for the truncation of multipole expansion of vector Green's functions, IEEE Microwave and Wireless Components

Letters, Vol.11, pp.311-313, 2001.

- 5) Coifman, R. Rokhlin, V. and Wandzura, S.: The fast multipole method for the wave equation: a pedestrian prescription, IEEE Antennas Propag. Mag., Vol.35, pp.7-12, 1993.
- 6) 藤野清次, 張紹良: 反復法の数理, 朝倉書店, 1996.
- 7) Lee, J., Zhang, J. and Lu, C-C.: Incomplete LU preconditioning for large scale dense complex linear systems from electromagnetic wave scattering problems, Journal of Computational Physics, Vol.185, pp.158-175, 2003.
- 8) 鈴木洋夫, 野寺隆: 左前処理を適応的に決定する GMRES(m) 法の有効性について, ハイパフォーマンスコンピューティング, Vol.6, pp.51-56, 2000.

(2003年4月18日受付)