

領域積分方程式の離散化で得られる疎行列の 反復解法の性能比較と音響場の解析

Comparison of iterative methods for the sparse matrix obtained from the volume integral equation method for analysis of acoustic wave field .

岩崎健太郎*・東平光生**・佐伯昌之***

Kentaro IWASAKI, Terumi TOUHEI, Masayuki SAEKI

*学生会員 東京理科大学大学院 理工学研究科 土木工学専攻 修士課程 (〒 278-8510 千葉県野田市山崎 2641)

**正会員 工博 東京理科大学教授 理工学部 土木工学科 (〒 278-8510 千葉県野田市山崎 2641)

***正会員 工博 東京理科大学助手 理工学部 土木工学科 (〒 278-8510 千葉県野田市山崎 2641)

Analysis of acoustic wave field is presented by means of the volume integral equation method assisted by the Fourier integral transform. The advantage of the present method is in that a sparse matrix is obtained from the discretization procedure. Several iterative methods for linear algebraic equation are examined for the sparse matrix obtained from the integral equation. The iterative methods are selected from the classical methods as well as the Krylov subspace methods. According to the numerical calculations, the iterative methods are found to be valid. In addition, the spectral structure obtained from the numerical calculations are found to be well explained by the volume integral equation in the wavenumber domain.

Key Words : volume integral equation, Haar scaling function, unitarity of Fourier transform, sparse matrix, iterative method

1. はじめに

不均質な音響波動場の解析に用いられる領域積分方程式 (Lippmann-Schwinger 方程式¹⁾) は、媒質の揺らぎと波動方程式の解を直接結びつける数学的な利点を有している。しかしながら、この方程式にスタンダードな離散化手法を適用すると、領域型解法としての大次元の行列が現れるばかりでなく、積分方程式の離散化の帰結として密な構造の行列が得られることになる。このため、領域積分方程式は、弾性波動場で境界積分方程式を援用したいいくつかの事例²⁾³⁾を除き活発に研究されてきたとは言いがたい。

こうした背景の中で、著者の一人は、Fourier 変換のユニタリ性と Haar 基底を用いて領域積分方程式を離散化する手法を提示した⁴⁾。この方法では、媒質の揺らぎの波数スペクトルが狭帯域であれば、得られる行列はスパース性の高いものになった。すなわち、媒質の揺らぎ領域が大きく広がる場合にも、媒質の揺らぎの波数スペクトルが狭帯域であれば、積分方程式の扱いが可能となる。しかし先の論文⁴⁾では、大規模な複素非対称のスパース行列のためのソルバー (内積形式 Gauss 法⁵⁾) の性能の限界から、高解像度の基底による解析や弾性波動場の解析が残された課題となっている。

本論文では、領域積分方程式の離散化で得られる大規模なスパース行列に対して、反復解法の可能性について検討する。ここでは古典的な反復解法として Gauss-Seidel 法⁵⁾、近年のクリロフ部分空間反復解法として位置づけられる GCR 法、Bi-CGSTAB 法、Bi-CGSTAB2 法⁶⁾を用い、これらの演算時間を比較検討する。そして、いずれの反復解法でも、演算時間の大幅な削減が

実現され、先の論文⁴⁾に比べ、高解像度での解析が可能であることを示す。また、この解像度での解析を通して、波動場の性質についても考察を行っている。

2. 領域積分方程式の離散化手法ならびにスパース行列の反復解法

ここでは、数値計算例の説明に必要な事項を整理する観点で、積分方程式の離散化手法の概要を論じる。また、積分方程式の離散化で得られるスパースな非対称の複素行列に対するいくつかの反復解法について整理する。

2.1 領域積分方程式の Fourier 変換について

本論文では、図-1 に示すように、揺らぎを持つ不均質な音響波動場で平面波が乱される問題を扱う。ここで、場の時間因子を $\exp(-i\omega t)$ とする。ただし、 ω は角振動数、 t は時間である。場の方程式を速度ポテンシャルを用いて記述すれば次式のようなになる。

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

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述する関数、 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。

式 (1) 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¹⁾。

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

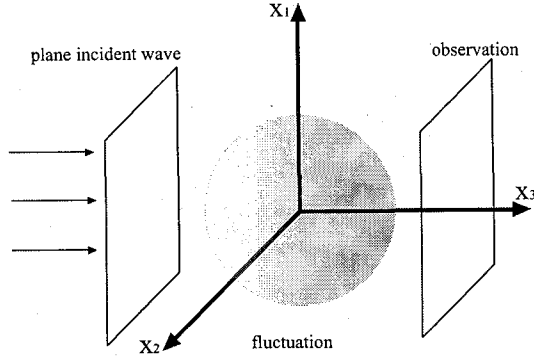


図-1 本論文で扱う問題

ここに, $f(\vec{x})$ は均質場を伝播する平面波で

$$f(\vec{x}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) \quad (3)$$

である。ただし, $\vec{k}$ は波数ベクトルで, $\vec{k} \cdot \vec{x}$ は $\vec{k}$ と $\vec{x}$ の内積, $|\vec{k}| = k$ である。また, $g(\vec{x}, \vec{y})$ は Green 関数で前述の時間因子で外向波となるように定めれば次式となる⁷⁾。

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

式 (2) を散乱波成分

$$v(\vec{x}) = u(\vec{x}) - f(\vec{x}) \quad (5)$$

に関する方程式に置き換え, Fourier 積分変換を実行すれば次式を得る⁴⁾。

$$\hat{v}(\vec{\xi}) = -\hat{h}(\vec{\xi})\hat{q}(\vec{\xi} - \vec{k}) - \hat{h}(\vec{\xi})\hat{w}(\vec{\xi}) \quad (6)$$

ただし, $\vec{\xi} \in \mathbb{R}^3$ は波数空間の点, 関数の上に付けた記号 $\hat{\cdot}$ は Fourier 積分変換されたものであることを示す。すなわち, $\hat{v}$ および $\hat{w}$ はそれぞれ, v と w の Fourier 積分変換である。ただし, w は次式で定義される。

$$w(\vec{x}) = q(\vec{x})v(\vec{x}) \quad (7)$$

また, 式 (6) の $\hat{h}$ は Green 関数の Fourier 積分変換に関連して現れる関数で次式で示される。

$$\hat{h}(\vec{\xi}) = \frac{1}{\xi^2 - k^2 - i\epsilon} \quad (8)$$

ここに, $\xi^2 = |\vec{\xi}|^2$, ϵ は無限小の正数である。

Fourier 積分変換および逆変換は, 本研究ではそれぞれ次のように定義している。

$$\begin{aligned} \hat{u}(\vec{\xi}) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3} \int_{\mathbb{R}^3} u(\vec{x}) \exp(-i\vec{x} \cdot \vec{\xi}) d\vec{x} \\ \check{u}(\vec{x}) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \hat{u}(\vec{\xi}) \exp(i\vec{x} \cdot \vec{\xi}) d\vec{\xi} \end{aligned} \quad (9)$$

ただし, $\check{\cdot}$ は Fourier 逆変換の記号である。

2.2 Fourier 変換された領域積分方程式の離散化

まず, 式 (6) および (7) を離散化するための Haar 基底を定義する。このために, 無次元の波数の座標系 $\vec{s}$ を

$$\vec{\xi} = k\vec{s} \quad (10)$$

として定義する。そして, この座標系で Haar のスケール関数⁸⁾の集合 $V = \{\phi_\alpha(\vec{s})\}_{\alpha=1}^{N_p}$, $N_p < \infty$ を考える。ここで, ϕ_α は Haar のスケール関数を表し, 添え字の α は集合 V の要素の番号を表す。そして, この添え字に応じて, Haar のスケール関数は解像度 m_α と整数シフトベクトル $\vec{\Gamma}_\alpha = (\Gamma_{\alpha,1}, \Gamma_{\alpha,2}, \Gamma_{\alpha,3})$ を持つものとする。すなわち,

$$\phi_\alpha(\vec{s}) = (2^{m_\alpha/2})^3 \prod_{k=1}^3 \phi(2^{m_\alpha} s_k - \Gamma_{\alpha,k}) \quad (11)$$

である。ここに $\phi(\cdot)$ は Haar の box 関数で

$$\phi(s) = \begin{cases} 1 & 0 \leq s < 1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (12)$$

である。なお, 集合 V の各要素は次のようにとるものとする。

$$\begin{aligned} \text{supp } \phi_\alpha(\vec{s}) \cap \text{supp } \phi_\beta(\vec{s}) &= \emptyset \quad (\alpha \neq \beta) \\ C \setminus \bigcup_{\alpha=1}^{N_p} \text{supp } \phi_\alpha(\vec{s}) &= \emptyset \end{aligned} \quad (13)$$

ただし, C は波数空間にとった立方体で

$$C = \{(s_1, s_2, s_3) \mid -L \leq s_j < L, (j = 1, 2, 3)\} \quad (14)$$

である。すなわち, 集合 V の各 Haar のスケール関数のサポートは, 互いに交わらないように取られ, しかもサポートの和は波数空間内の立方体を埋め尽くす。このようにすれば, 集合 V は正規直交系

$$\int_{\mathbb{R}^3} \phi_\alpha(\vec{s}) \phi_\beta(\vec{s}) d\vec{s} = \delta_{\alpha\beta} \quad (15)$$

を形成する。ここに, $\delta_{\alpha\beta}$ は Kronecker のデルタである。

また, Fourier 変換のユニタリ性に着目すれば, V の元の Fourier 逆変換の集合 $\check{V} = \{\check{\phi}_\alpha\}_{\alpha=1}^{N_p}$ も直交系を形成する。すなわち,

$$\int_{\mathbb{R}^3} \check{\phi}_\alpha^*(k\vec{x}) \check{\phi}_\beta(k\vec{x}) d\vec{x} = \frac{1}{k^3} \delta_{\alpha\beta} \quad (16)$$

である。ここに, 添え字の $*$ は複素共役であることを示す。Haar 基底の Fourier 逆変換の具体的な形は以下のとおりである。

$$\begin{aligned} \check{\phi}_\alpha(\vec{x}) &= \frac{1}{\sqrt{2^{m_\alpha} + 1\pi}^3} \times \\ &\prod_{k=1}^3 \frac{\sin \theta_{\alpha,k}}{\theta_{\alpha,k}} \exp(i\theta_{\alpha,k}(2\Gamma_{\alpha,k} + 1)) \end{aligned} \quad (17)$$

ただし,

$$\theta_{\alpha,k} = \frac{x_k}{2^{m_\alpha+1}} \quad (18)$$

である。この Haar 基底を用いれば、与えられた関数の Fourier 変換と逆変換は基底の交換のみで以下のように実現されることになる。

$$\sum_{\alpha=1}^{N_p} \hat{u}_\alpha \phi_\alpha(\vec{s}) = \hat{u}(\vec{\xi})$$

$$\stackrel{\mathcal{F}^{-1}}{\underset{\mathcal{F}}{=}} u(\vec{x}) = k^3 \sum_{\alpha=1}^{N_p} \hat{u}_\alpha \check{\phi}_\alpha(k\vec{x}) \quad (19)$$

以上の準備の下で、式 (6) のそれぞれの項を次のように展開する。

$$\begin{aligned} \hat{v}(\vec{\xi}) &= \sum_{\alpha=1}^{N_p} \hat{v}_\alpha \phi_\alpha(\vec{s}) \\ \hat{h}(\vec{\xi}) &= \sum_{\alpha=1}^{N_p} \hat{h}_\alpha \phi_\alpha(\vec{s}) \\ \hat{q}(\vec{\xi} - \vec{k}) &= \sum_{\alpha=1}^{N_p} \hat{Q}_\alpha \phi_\alpha(\vec{s}) \\ \hat{w}(\vec{\xi}) &= \sum_{\alpha=1}^{N_p} \hat{w}_\alpha \phi_\alpha(\vec{s}) \end{aligned} \quad (20)$$

式 (20) を式 (6) に代入することで、次式が得られる。

$$\hat{F}_\alpha = \hat{v}_\alpha + c_\alpha \hat{h}_\alpha \hat{w}_\alpha \quad (21)$$

ただし、式の展開のプロセスでは

$$\phi_\alpha(\vec{s}) \phi_\beta(\vec{s}) = c_\alpha \delta_{\alpha\beta} \phi_\alpha(\vec{s}) \quad (22)$$

の関係をを用いている。ここに、

$$c_\alpha = \left(2^{m_\alpha/2}\right)^3 \quad (23)$$

である。また、式 (21) に現れた $\hat{F}_\alpha$ は

$$\hat{F}_\alpha = -c_\alpha \hat{h}_\alpha \hat{Q}_\alpha \quad (24)$$

であり、媒質の構造が既知の場合は既知量となる。

次に式 (7) を展開する。そのために揺らぎの関数 $\hat{q}(\vec{\xi})$ を次のように展開する。

$$\sum_{\alpha=1}^{N_p} \hat{q}_\alpha \phi_\alpha(\vec{s}) = \hat{q}(\vec{\xi})$$

$$\stackrel{\mathcal{F}^{-1}}{\underset{\mathcal{F}}{=}} q(\vec{x}) = k^3 \sum_{\alpha=1}^{N_p} \hat{q}_\alpha \check{\phi}_\alpha(k\vec{x}) \quad (25)$$

さらに、

$$\begin{aligned} w(\vec{x}) &= k^3 \sum_{\alpha=1}^{N_p} \hat{w}_\alpha \check{\phi}_\alpha(k\vec{x}) \\ v(\vec{x}) &= k^3 \sum_{\alpha=1}^{N_p} \hat{v}_\alpha \check{\phi}_\alpha(k\vec{x}) \end{aligned} \quad (26)$$

として、 $w(\vec{x}) = q(\vec{x})v(\vec{x})$ に代入し、Haar 基底の Fourier 逆変換の直交性を利用することで、次式を得る。

$$\hat{w}_\alpha = \sum_{\beta=1}^{N_p} \sum_{\gamma=1}^{N_p} S_{\alpha\beta\gamma} \hat{q}_\beta \hat{v}_\gamma \quad (27)$$

ここに、

$$S_{\alpha\beta\gamma} = k^6 \int_{\mathbb{R}^3} \check{\phi}_\alpha(k\vec{x})^* \check{\phi}_\beta(k\vec{x}) \check{\phi}_\gamma(k\vec{x}) d\vec{x} \quad (28)$$

である。式 (27) を式 (21) に代入し、さらに添え字 β で縮約することで $\hat{v}_\alpha$ に関する連立方程式が得られることになる。

$$\hat{F}_\alpha = \hat{v}_\alpha + c_\alpha \hat{h}_\alpha \sum_{\gamma=1}^{N_p} D_{\alpha\gamma} \hat{v}_\gamma \quad (29)$$

ただし、

$$D_{\alpha\gamma} = \sum_{\beta \in B} S_{\alpha\beta\gamma} \hat{q}_\beta \quad (30)$$

である。ここに、 B は添え字 β の取り得る範囲の自然数の集合である。式 (28) の積分は閉じた形で求めることができ、しかも非積分関数の Haar 基底の整数シフトが互い離れた場合には積分値はゼロとなる⁴⁾。この意味で得られる行列はスパース行列になることが期待できる。また、式 (28) から式 (30) より、方程式で扱う行列は複素非対称となることは明らかである。

2.3 スパース行列のための反復解法について

前論文⁴⁾で示したように、内積形式 Gauss 法で上の連立方程式を解く場合、膨大な演算時間が必要である。具体的には約 8 万円のスパース率 0.6% の行列は、東京理科大学設置の IBM pSeries 690 で 8cpu 並列を用いた場合でも約 6 時間の経過時間が必要である。この問題を解決するために、大規模なスパース行列の解法として反復解法の使用を検討する必要がある。しかし、あらゆる非対称のスパース行列に有効な特定の反復解法を提案することは困難であるとの指摘もある⁶⁾。そこで、ここでは現時点までに提示されてきたさまざまな反復解法の一部を整理するとともに、後述の数値計算で用いる反復解法について若干のことを述べる。

まず、反復解法には、古典的な解法として Jacobi 法、Guass-Seidel 法、SOR 法 (逐次過剰緩和法) が挙げられる⁵⁾。これらの方法は、連立一次方程式 $Ax = b$ を解くのに、初期ベクトル x_0 から出発して、

$$x_k = Bx_{k-1} + c \quad (31)$$

という反復計算を用いる。反復過程において行列 B とベクトル c は不変であり、この意味で古典的な反復解法は定常反復解法と呼ばれる。Gauss-Seidel 法⁵⁾では式 (31) の行列 B と c を求めるために、連立方程式の係数行列 A を下三角行列、対角行列、上三角行列に分離する。すなわち、

$$A = L + D + U \quad (32)$$

とする。そして、次の漸化式を構成する。

$$Dx_k = -Lx_k - Ux_{k-1} + b \quad (33)$$

上で示した定常反復解法に対して、クリロフ部分空間反復解法として位置づけられる非定常反復解法がある⁶⁾。クリロフ部分空間は連立方程式の係数行列 A と初期ベクトル x_0 を用いて、

$$K_n(A : x_0) = \text{Span}\{x_0, Ax_0, \dots, A^{n-1}x_0\} \quad (34)$$

として定義する。ここに n は反復回数を示し、部分空間の次元は反復回数と共に拡大してゆく。この部分空間の正規直交基底を Gram-Schmidt の方法で作成するプロセスで得られる係数を行列表現すると Hessenberg 行列が生成される。非定常反復解法は、この Hessenberg 行列の成分を用いて連立方程式の近似解を求める漸化式を構成してゆく。反復回数の増加と共に、漸化式の項数は増大をしてゆくが、 A にエルミート性を仮定すれば、Hessenberg 行列は 3 重対角行列となり、漸化式の項数は 3 項となる。すなわち、 A にエルミート性を仮定すれば、反復過程で扱う漸化式は 3 項で、反復回数によらず不変となる。 A にエルミート性を仮定せず、直交基底を構成してゆくプロセスをアーノルド原理、 A にエルミート性を仮定し直交基底を構成してゆくプロセスをランチョス原理とも言う⁶⁾。

このクリロフ部分空間解法として位置づけられる反復解法には、現在までにさまざまなものが提示されている。そして、それらは Netlib⁹⁾ の Templates¹⁰⁾ にまとめられ、比較的容易にプログラミングできるように工夫されている。同様に文献⁶⁾ でもアルゴリズムがまとめられ、これを参照することでも比較的容易に反復解法のプログラミングが可能である。本研究では、文献⁶⁾ から GCR 法 (一般化共役残差法)、Bi-CGSTAB 法 (双共役勾配安定化法) ならびに Bi-CGSTAB2 法を選択し、これらを積分方程式の離散化で得られる行列に適用することにした。ここで、GCR 法はアーノルド原理に基づくものであり、反復回数の増大と共に、漸化式の項数が増大してゆく。このために、反復回数を多く必要とする行列には問題が生じる可能性がある。また、Bi-CGSTAB 法および Bi-CGSTAB2 法はランチョス原理に基づくものであり、反復回数が増えても漸化式の項数は 3 である。しかし、この原理はエルミート行列に対するクリロフ部分空間での直交基底を生成するプロセスに基づいている。このため非エルミート行列に対して適用するためにさまざまな工夫が施されることになる⁶⁾。また、ランチョス原理の反復過程では計算は break-down する可能性があることや Bi-CGSTAB 法あるいは Bi-CGSTAB2 法は、大規模な問題では収束が難しい場合があることも知られている⁶⁾。

これら非定常反復解法において、反復回数を減らすために不完全 LU 分解などの前処理を行う場合もある。前処理技法にも様々なものが考案されているが、ここでは、文献¹⁰⁾ に示された不完全 LU 分解の効果を検討してみる。行列 A を Gauss-Seidel 法で示したように $A = L + D + U$ と分解し、 A に対する近似行列を

$$M = (D + L)(I + D^{-1}U) \quad (35)$$

Amplitude[km⁻²]

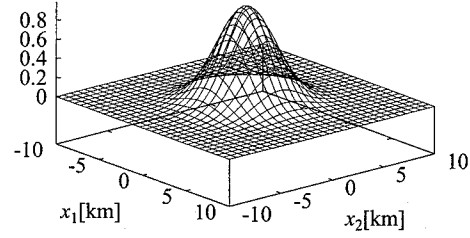


図-2 本論文で扱う媒質の揺らぎ

Amplitude[km]

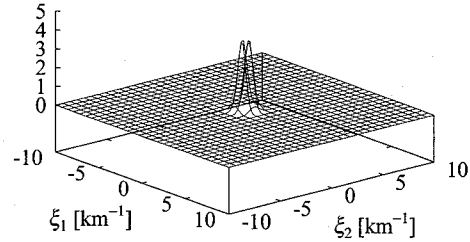


図-3 本論文で扱う媒質の揺らぎのスペクトル構造

として定義する。このとき、 M は LU 分解されているばかりでなく、 AM^{-1} は単位行列に近くなり、反復回数の削減が期待できることになる。文献¹⁰⁾ では、他の前処理法も記述されているが、式 (35) の方法は複素非対称行列に対する簡便な分解法を与える。

3. 数値計算例

3.1 解析条件および Haar 基底の配置

ここでは媒質の揺らぎを記述する関数として、

$$q(\vec{x}) = \exp(-\eta|\vec{x}|^2), \quad (\eta = 0.1) \quad (36)$$

を用いる。この揺らぎの Fourier 変換は

$$\hat{q}(\vec{\xi}) = \frac{1}{\sqrt{2\eta}^3} \exp\left(-\frac{|\vec{\xi}|^2}{4\eta}\right) \quad (37)$$

である。図-2 および図-3 に $x_3 = 0$ における $q(\vec{x})$ の形状、 $\xi_3 = 0$ における $\hat{q}(\vec{\xi})$ の形状を示す。これらの図では、媒質の揺らぎの空間分布を示すために空間座標には単位を付けて示している。また、媒質の揺らぎを記述する関数 $q(\vec{x})$ は、支配方程式より波数の二乗の単位を持っている。また、媒質の揺らぎの Fourier 変換 $\hat{q}(\vec{\xi})$ の単位については Fourier 変換の演算の規則にしたがって定まる。

図-2 に示すように、 $\hat{q}$ の主要部は原点付近にあり、Haar 基底で $\hat{q}(\vec{\xi})$ を展開する場合には、この原点付近

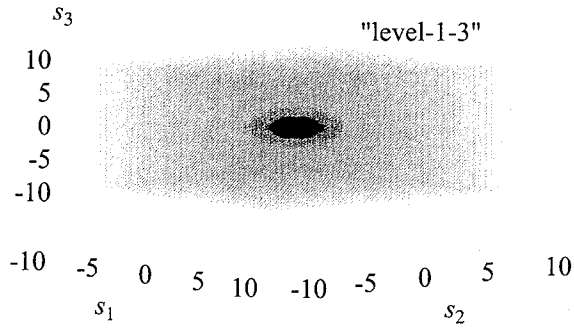


図-4 波数空間の Haar 基底の解像度

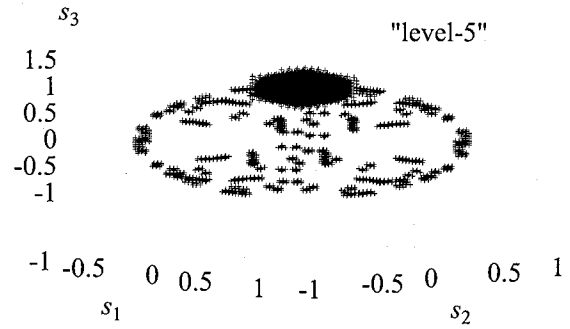


図-6 波数空間の Haar 基底の解像度 ($m = 5$)

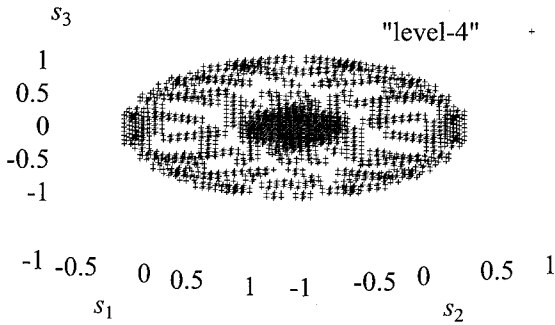


図-5 波数空間の Haar 基底の解像度 ($m = 4$)

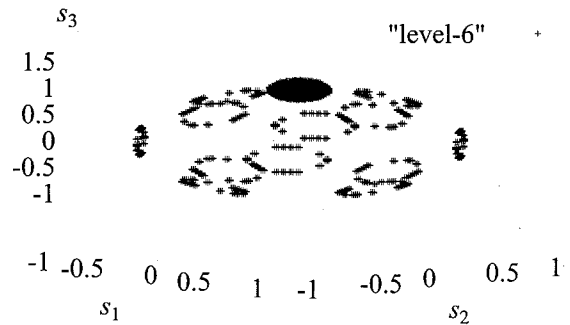


図-7 波数空間の Haar 基底の解像度 ($m = 6$)

で定義された基底を用いればよい。また、媒質の波数は $k = 2\pi [1/\text{km}]$ とし、平面波の波数ベクトルを

$$\vec{k} = (0, 0, k) \quad (38)$$

とする。

積分方程式の離散化に用いる Haar 基底は無次元の波数 s 座標で $-10 \leq s_j \leq 10$, ($j = 1, 2, 3$) の領域に配置する。Haar 基底の配置の方法は図-4 より図-7 に示す。波数空間上で Haar 基底はそれぞれの解像度に応じた大きさの立方体のサポートを持つ。この立方体のサポートは解像度が大きいほど小さくなる。これらの図では Haar 基底のサポートの中心の座標をプロットすることで Haar 基底の配置を表している。本数値計算では解像度 $m = 1$ から $m = 6$ までの 6 種類の Haar 基底を用いている。図中の凡例で level とは解像度を意味する。また、ここでの解像度 m は波数 k を 2^m 個に分割する意味を持っている。また、図-4 は、解像度 $m = 1$ から $m = 3$ をプロットしたもので、色が濃くなるにつれ解像度が上がっている。図-6 から図-7 の、色の濃い部分は、式 (20) の $\hat{q}(\vec{\xi} - \vec{k})$ を展開するためのものである。この領域は波数領域の Green 関数の特異点と揺ら

ぎのスペクトルの $\hat{q}(\vec{\xi} - \vec{k})$ のピークが重なり合う箇所、数値解に大きく影響を与える。そして、図-5 から図-7 は、解像度 $m = 4$ から $m = 6$ をそれぞれプロットしたもので式 (20) の $\hat{h}(\vec{\xi})$ を展開するためのものである。

これらの基底の配置で得られる行列の構造を図-8 に示す。ここでは行列の非ゼロ成分をプロットしている。行列は約 93000×93000 であり、スパース率は 2.3% である。したがって、行列の格納に要する計算機メモリは約 3 GB であり、東京理科大学設置の高速並列計算機 IBM pSeries 690 では十分な対応が可能である。

3.2 領域積分方程式の離散化で得られる行列に対する各種反復解法の性能比較

ここで得られた連立一次方程式に対して反復解法が、どの程度の性能を持つかを検討する。前述のように、ここで検討に用いる反復解法は Gauss-Seidel 法、GCR 法、Bi-CGSTAB 法、Bi-CGSTAB2 法ならびに不完全 LU 分解の前処理を施した GCR 法、Bi-CGSTAB 法、Bi-CGSTAB2 法である。表-1 にこれらの反復解法の必

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
Bi-CGSTAB 法	2 回	6 秒
Bi-CGSTAB2 法	2 回	5 秒
GCR 法	2 回	7 秒
前処理付 Bi-CGSTAB 法	破綻	-
前処理付 Bi-CGSTAB2 法	破綻	-
前処理付 GCR 法	4 回	20 秒

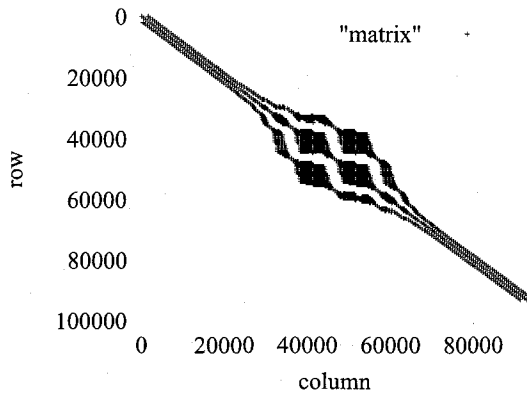


図-8 離散化し得られる行列構造の 1 例

要とした反復回数，ならびに経過時間をまとめている。ここでの数値計算は並列計算機を用いているために，計算機が JOB を開始してから終了するまでの経過時間の概念で反復解法の性能を表すこととした。また，ここでの反復回数は連立一次方程式 $Ax = b$ に対して，近似解 x_a が $\|Ax_a - b\| \leq \epsilon_0 \|b\|$ を満足するまでの回数とした。ただし， $\epsilon_0 = 0.001$ としている。

表-1 において前処理付きの Bi-CGSTAB 法，ならびに Bi-CGSTAB2 法は反復計算の途中で計算が破綻したために結果が得られていない。破綻した原因は，反復解法に用いる漸化式を構成する係数の更新時にゼロで除す演算が現れて以降の計算が不可能になったことによる。また，前処理を行った場合の GCR 法は結果が得られているものの，そうでない場合の GCR 法に比べ経過時間の大幅な増大と反復回数の増加を招いている。このように，本論文で試みた不完全 LU 分解は今回の数値実験においては，効果が見られなかった。また，表-1 に示すように，Gauss-Seidel 法，不完全 LU 分解を施さない Bi-CGSTAB 法，Bi-CGSTAB2 法，GCR 法は反復回数が 2 回で経過時間 5 から 7[sec] で演算を終了させることができ，前述したクリロフ部分分解法の問題点は，今回の数値計算では見られない。古典的な Gauss-Seidel 法を含め，反復解法はきわめて有効であると言える。

図-9，10 には，各反復解法における反復回数と相対残差の関係のプロットしている。ここでの相対残差 ϵ は

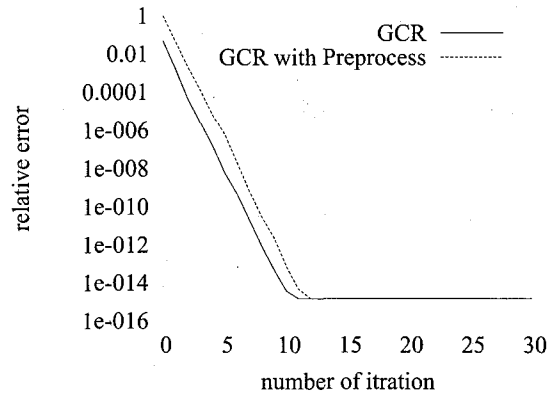


図-9 前処理有無による GCR 法の収束グラフ

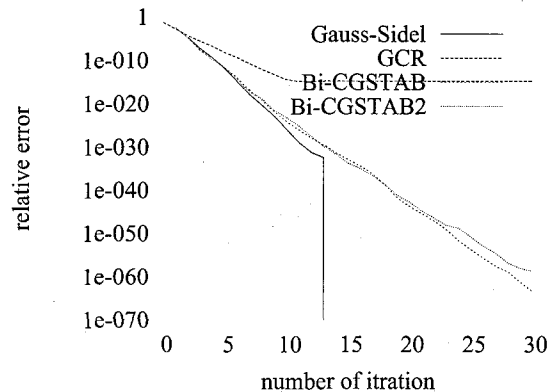


図-10 Gauss-seidel 法, Bi-CGSTAB 法, Bi-CGSTAB2 法, GCR 法の収束グラフ

$$\epsilon = \frac{\|Ax_a - b\|}{\|b\|} \quad (39)$$

として定義している。図-9 は GCR 法における不完全 LU 分解の効果を検討したものである。図中の GCR は不完全 LU 分解を用いない GCR 法，GCR with Preprocess は不完全 LU 分解を用いた GCR 法の結果である。これらの結果によれば，両者は反復回数の増大とともに，相対残差は急速に小さくなっていくことが認められる。しかしながら，不完全 LU 分解によって，収束の悪化が見られることも理解できる。

図-10 は Gauss-Seidel 法，不完全 LU 分解を施さない GCR 法，Bi-CGSTAB 法，Bi-CGSTAB2 法の比較を示したものである。これによると，GCR 法は相対残差の減少の仕方が最も鈍いことが分かる。しかも，ある程度以上反復回数を増やしても相対残差は減り方は頭打ちになっている。また，Bi-CGSTAB2 法は，Bi-CGSTAB 法を改良したものであるが，今回の数値実験の結果では両者にはそれほど違いは見られない。なお，Gauss-Seidel 法，Bi-CGSTAB 法，Bi-CGSTAB2 法は反復回数の増大と共に順調に相対残差を減少させている。特に，この三つの手法は反復回数が 10 回程度

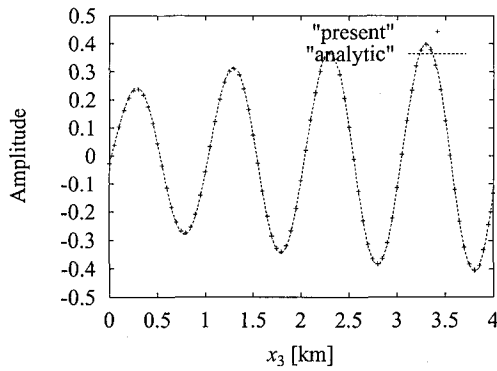


図-11 x_3 軸上における球関数展開の解と積分方程式の解

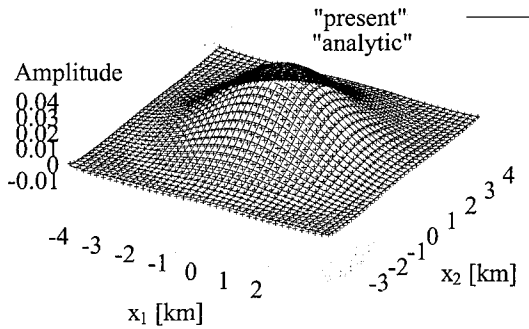


図-12 球関数展開の解と積分方程式の解 ($x_3 = 0.5\text{km}$)

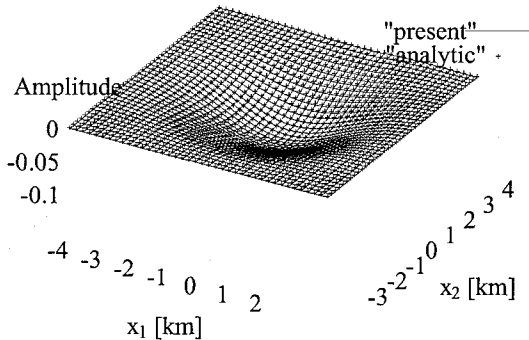


図-13 球関数展開の解と積分方程式の解 ($x_3 = 1.0\text{km}$)

まで、相対残差はほとんど等しいことが分かる。そして、それ以上の反復回数では Gauss-Seidel 法は、最も劇的に相対残差を減少させている。この意味で、今回の数値実験では古典的とも言われる Gauss-Seidel 法が最もすぐれているということもでき、反復解法の選択肢の一つに Gauss-Seidel 法を考慮することは十分価値がある。

なお、前述のように直接解法の内積形式 Gauss 法では、膨大な演算時間が必要である。この内積形式の Gauss 法のアルゴリズムを修正して 2 段 2 列同時に消去演算できるように工夫しても、大幅な経過時間の削減は望めないことがわかっており、この意味でも反復解法を用いることは重要である。

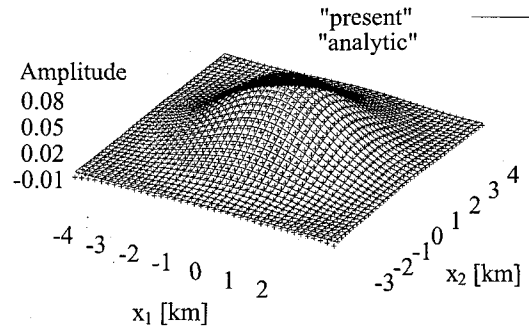


図-14 球関数展開の解と積分方程式の解 ($x_3 = 1.5\text{km}$)

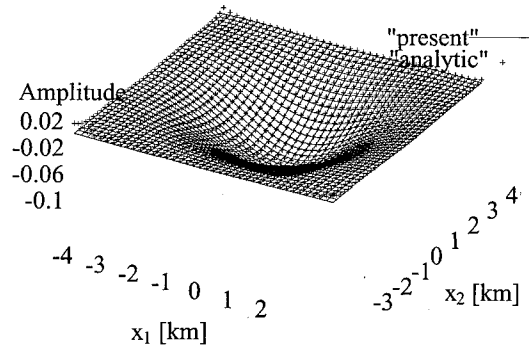


図-15 球関数展開の解と積分方程式の解 ($x_3 = 2.0\text{km}$)

3.3 波動場についての考察

次に、連立方程式の反復解法で得られた積分方程式の解と球関数展開による解を比較することで、反復解法の有効性を検証すると共に、波動場について考察を行う。反復解法には Bi-CGSTAB 法を用いている。前述のように、本数値計算は球対称性を持つ不均質領域に x_3 方向に伝播する平面波が入射する問題を扱っている。まず、図-11 に x_3 軸上での散乱波の振幅(実部)を球関数展開による解と比較して示す。ここでの散乱波の振幅は入射波の振幅で除して無次元化して表している。また、解析に用いる Green 関数の減衰因子 ϵ は 0.005 としている。この図からも明らかなように、散乱波は x_3 の増大と共に振幅をゆるやかに増大させている。これは媒質の揺らぎがゆるやかで大きな広がりをもって変動することを反映している。また、前論文⁴⁾と比較すると、ここでの数値計算結果は解析精度を向上させている。この理由は、前論文の Haar 基底よりも高い解像度の基底を Green 関数の特異点付近や媒質の揺らぎに関連する $\hat{q}(\xi - \vec{k})$ のピーク $\xi = \vec{k}$ 付近に配置したことが大きい。

図-12 から図-15 は $x_3 = 0.5\text{km}$ から $x_3 = 2.0\text{km}$ の位置の平面上での積分方程式の解と球関数展開の結果の比較を示す。ここでも散乱波の振幅(実部)をプロットしている。これらの図より明らかなように、球関数展開の解と積分方程式の解はきわめて良好に一致している。

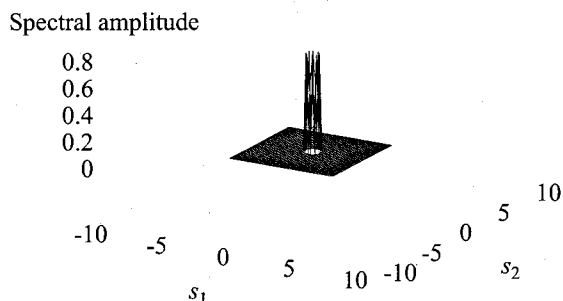


図-16 散乱波のスペクトル構造 ($s_3 = 0.5$)

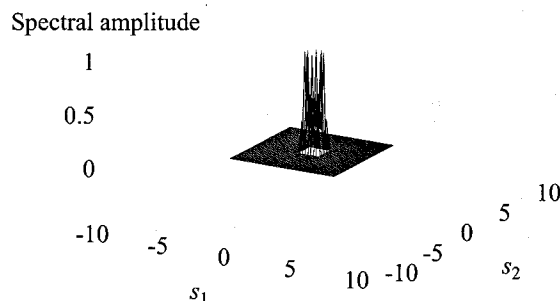


図-18 散乱波のスペクトル構造 ($s_3 = 1.5$)

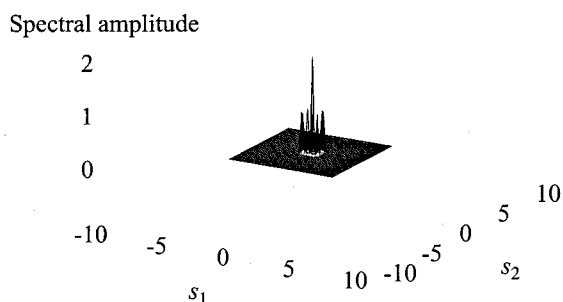


図-17 散乱波のスペクトル構造 ($s_3 = 1.0$)

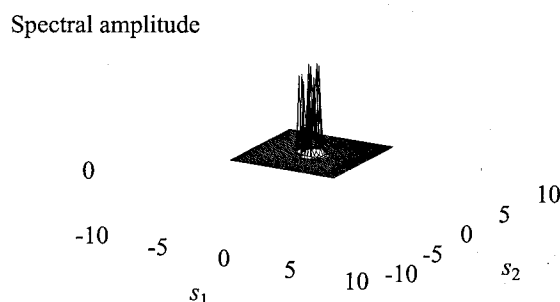


図-19 散乱波のスペクトル構造 ($s_3 = 2.0$)

また、散乱波の振幅は $x_3 =$ 一定の平面の原点付近でピークを持ち、 x_1 と x_2 の値が大きくなる遠方へ向かって振幅がゆるやかに減少してゆく。散乱波の振幅のピークは x_3 の値の増加とともに正負を入れ替えながら伝播する様子が現れている。

最後に散乱波のスペクトルを一定の波数空間の平面上で示し、スペクトル構造について検討する。これらのスペクトルの振幅は単位振幅の入射波のスペクトルの比として無次元化している。ここで、図-16 から図-19 の図は、 $s_3 = 0.5$ から $s_3 = 2.0$ でのスペクトル特性を示したものである。これらの図より明らかなように、いずれの s_3 座標においても原点付近でピークとなっている。特に、このピークは $s_3 = 1.0$ で最も大きく、これは $q(\xi - \bar{k})$ のピークの現れる場所と一致する。また、スペクトルは非常に狭帯域の構造を持つことが図-16 から図-19 の結果から理解できる。また、図-12 から図-15 で示した x_3 平面上の散乱波の波面形状のなだらかさは、散乱波のスペクトルの狭帯域性を反映しているものと言える。

式 (16) に示すように領域積分方程式の Fourier 積分変換は Green 関数のスペクトル、媒質の揺らぎのスペクトルおよび散乱波のスペクトルを関係付ける方程式である。本数値計算では、媒質の揺らぎが狭帯域であ

ること、Green 関数の Fourier 積分変換も特異点付近でピークを持つことから、散乱波のスペクトルも狭帯域であることは容易に推察できる。このように、散乱波のスペクトル特性は Green 関数と媒質の揺らぎのスペクトル特性で説明することが可能となる。

4. 結論

本論文では、大規模スパース行列のための反復解法の適用可能性の検討を積分方程式の離散化で得た行列に対して行った。また、実際に反復解法を適用して得た積分方程式による波動場の考察を行った。検討に用いたスパース行列のための反復解法として、古典的と言われる Gauss-Seidel 法、近年のクリロフ部分空間反復解法として位置づけられる GCR 法、Bi-CGSTAB 法、Bi-CGSTAB2 法を取り上げた。また、GCR 法、Bi-CGSTAB 法、Bi-CGSTAB2 法については前処理技法としての不完全 LU 分解の効果についても検討した。

これらの反復解法の検討によれば、不完全 LU 分解を施した場合には、期待される結果はそれほど得られなかったものの、反復解法そのものは領域積分方程式の離散化で得られる行列に対して非常に有効であることが分かった。特に、近年のクリロフ部分空間反復解法

ばかりでなく、古典的と考えられる Gauss-Seidel 法によっても良好な結果が得られており、このことは積分方程式の離散化で得られるスパース行列の反復解法の選択肢を広げるものと言える。しかしながら、反復解法の性能は与えられた行列のスペクトル構造に依存すると考えられ、媒質の揺らぎの特性が変化すれば、また反復解法の性能も変化すると考えられる。さまざまな媒質の揺らぎの構造に対する解析を通して、反復解法に対する知見を拡大することは今後に残された課題である。

また、反復解法の適用によって積分方程式の離散化のための Haar 基底の解像度を上げることが可能になり、積分方程式の数値解の精度は向上した。本論文では、この解像度での解析を通して波動場のスペクトル特性についての考察も行った。Fourier 変換された領域積分方程式は、媒質の揺らぎのスペクトルと Green 関数のスペクトル、散乱波のスペクトルの関係を明らかにする。数値計算結果によっても、散乱波のスペクトル特性は媒質の揺らぎのスペクトル特性を反映して、きわめて狭帯域の構造を持ち、スペクトル構造からも波動場の特性を十分説明していることが明らかになった。

参考文献

- 1) Colton, D. and Kress, R. *Inverse acoustic and electromagnetic scattering theory*, Berlin, Springer, 1988.
- 2) Kitahara, M., Niwa, Y., Hirose, S. and Yamazaki, M.: Coupling of numerical Green's matrix and boundary integral equations for the elastodynamic analysis of inhomogeneous bodies on an elastic half-space, *Applied Mathematical Modelling*, Vol. 8, pp. 397-407, 1984.
- 3) Niwa, Y., Hirose, S. and Kitahara, M.: Elastodynamic analysis of inhomogeneous anisotropic bodies, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 22, pp. 1541-1555, 1986.
- 4) 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, pp. 163-173, 2006
- 5) 小国力編著: 行列計算ソフトウェア, 丸善, 1998.
- 6) 藤野清次, 張紹良: 反復法の数理, 応用数値計算ライブラリー, 朝倉書店, 1996.
- 7) 今村勤: 物理と Green 関数, 岩波書店, 1994.
- 8) Williams, J.R. and Amaratunga, K.: Introduction to wavelets in engineering, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 37, pp. 2365-2388, 1994.
- 9) <http://www.netlib.org/>
- 10) Barrett, M., Berry, M., Chan, T.F. et al.: *Templates for the solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods*, SIAM, 1994.

(2006 年 4 月 13 日 受付)