

高速多重極アルゴリズムを適用した多数の誘電体円柱による電磁波散乱の数値計算の高速化について(2) : 2段階Block Jacobi前処理について

中嶋, 徳正
九州大学大学院システム情報科学府

藤野, 清次
九州大学情報基盤センター

立居場, 光生
九州大学大学院システム情報科学研究院

<https://doi.org/10.15017/4784351>

出版情報 : 九州大学情報基盤センター年報. 3, pp.47-56, 2003-03. 九州大学情報基盤センター
バージョン :
権利関係 :

高速多重極アルゴリズムを適用した多数の誘電体円柱による 電磁波散乱の数値計算の高速化について (2)

— 2段階 Block Jacobi 前処理について —

中嶋 徳正 (九州大学大学院システム情報科学府)
藤野 清次 (九州大学情報基盤センター)
立居場 光生 (九州大学大学院システム情報科学研究院)

概要: 物体による電磁波散乱の境界要素法による数値計算では, 計算に最も多くの時間を費やす部分は密な係数行列を持つ連立1次方程式の求解の部分である. そのため, 解くべき問題が実際になるほど連立1次方程式の求解の高速化はより重要となる. 従来著者らは高速多重極アルゴリズムを利用して反復法中に現れる行列-ベクトル積計算の高速化を図ってきた. 本論文では, 連立1次方程式の求解に前処理付きのGMRES法を使用する. また, 係数行列がブロック構造をしていることを利用し, その構造上の特徴を利用した新しい前処理を考案する. そして数値実験を通して, 提案する2段階 Block Jacobi 前処理が大規模問題に対して有用であることを明らかにする.

Acceleration of Computation for Electromagnetic Wave Scattering Problem with Many Dielectric Circular Cylinders by Means of a Fast Multipole Algorithm (2)

— On Two-Step Block Jacobi Method for Block Partitioned Matrix —

Norimasa NAKASHIMA (Graduate School of Information Science and Electrical Engineering,
Kyushu University)
Seiji FUJINO (Computing and Communications Center, Kyushu University)
Mitsuo TATEIBA (Faculty of Information Science and Electrical Engineering,
Kyushu University)

Abstract: In the computation of electromagnetic wave scattering problem, the most time-consuming part is that of solving a linear system of equations. This is largely caused by its dense coefficient matrix. This motivates the reduction of amount of operations. In the previous paper, we reduced drastically the amount of operations and necessary memory for matrix-vector product using a fast multipole algorithm. In this paper, we focus on variants of preconditioner. Moreover the GMRES method is adopted as an iterative method. The matrices with a natural block form often arise when the boundary element method is used. This situation is a key to improvement of efficiency of computation. Numerical results show that our proposed two-step block Jacobi method is effective for realizing a high-performance computation as well as standard block Jacobi preconditioner.

1. はじめに

多数の粒子からなるランダム媒質による電磁波の多重散乱現象に対して主に理論的立場から有力な近似理論が提唱され, それらは通信・探査技術に応用されてきた. 著者の一人も従来の理論とは異なる新しい視点から多重散乱理論を提唱し [1][2], その理論に基づいたランダム媒質の電氣的・磁氣的等価な媒質定数算定法を導出した [3]. その結果, 媒質定

数算定法は適用範囲の広さから現在最も優れた算定法とされている. しかし, これらの近似理論は扱える粒子の形状やサイズ, 数などに制限があり, より厳密かつ汎用性の高い理論を構築するには, 数値計算による実験的立場からの解析が必要である.

電磁波散乱問題の代表的な数値計算法の一つである境界要素法では, 計算の主要部は最終的に L 次元の密な係数行列をもつ連立1次方程式の求解の部分

である。一般に、連立1次方程式を解く方法は直接法と反復法の二つに大別される。密な係数行列を持つ連立1次方程式の計算では直接法がこれまで利用されたが、反復法は直接法よりも短時間で十分な精度を持つ近似解を得ることができるため、最近では反復法が多く利用されるようになってきた。反復法の中の行列-ベクトル積の計算はその計算量がオーダー $O(L^2)$ で見積られる。著者らは、その物理的な観点から、L. Greengard と V. Rokhlin により提案された高速多重極アルゴリズム [4, 5] が行列-ベクトル積の計算に応用できることに着目し、計算量とメモリ量を大幅に削減できることを示した [6]-[9]。また、多くの反復法の中から、BiCG 系統に属する7種類の反復法の性能評価を行い、初期 Shadow 残差ベクトル \mathbf{r}_0 に擬似一様乱数を代入すると、CGS 法 [14][16] および TFQMR 法 [12][16] が最も速く収束することを示した [8]。同時に、1回の反復計算における行列-ベクトル積の計算時間の全計算時間に対する割合が極めて大きいこともわかった [9]。

本論文では、多数の誘電体円柱による電磁波散乱問題の数値計算において、連立1次方程式の求解に前処理つきの GMRES 法 (一般化最小残差法 [11]) を採用する。そして、境界要素法により導出された連立1次方程式の係数行列がブロックと呼ばれる小行列より構成されることに着目し、ブロック構造を利用した2段階 Block Jacobi 前処理を提案し、従来の Block Jacobi 前処理との比較検討を行なう。

本研究の最終目的は、多数の誘電体円柱を用いてランダム媒質をモデル化し、電磁波散乱問題において現れる密な係数行列を持つ連立1次方程式の求解に有効な高速計算法を提案することにある。

以下において、虚数単位は $j = \sqrt{-1}$ とする。電磁波は角周波数 ω で時間変動し、 $e^{j\omega t}$ で表す。

2. N 個の誘電体円柱による散乱数値計算

$$\frac{1}{2}E_z(\rho_i) = E_z^{\text{inc}}(\rho_i) - \frac{j}{4} \sum_{n=1}^N \left[\int_{C_n} \left\{ E_z(\rho'_n) \frac{\partial H_0^{(2)}(k_0|\rho_i - \rho'_n|)}{\partial n'_n} - H_0^{(2)}(k_0|\rho_i - \rho'_n|) \frac{\partial E_z(\rho'_n)}{\partial n'_n} \right\} dl'_n \right] \quad (1)$$

$$\frac{1}{2}E_z(\rho_i) = \frac{j}{4} \int_{C_i} \left\{ E_z(\rho'_i) \frac{\partial H_0^{(2)}(k_i|\rho_i - \rho'_i|)}{\partial n'_i} - H_0^{(2)}(k_i|\rho_i - \rho'_i|) \mu_r^{(i)} \frac{\partial E_z(\rho'_i)}{\partial n'_i} \right\} dl'_i \quad (2)$$

$$(i = 1, 2, \dots, N)$$

2.1 定式化

真空中に z 軸を柱軸とし、互いに重なり合うことなく配置された N 個の無限長誘電体柱による電磁波散乱問題を考える。さらに、これを z 軸に垂直な平面に関する2次元問題と考える。誘電体柱断面の境界を C_1, C_2, \dots, C_N とする。真空中の誘電率、透磁率、波数は各々 $\epsilon_0, \mu_0, k_0 = \omega\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$ とする。また、 i 番目の誘電体柱の比誘電率、比透磁率、波数を各々 $\epsilon_r^{(i)}, \mu_r^{(i)}, k_i = k_0\sqrt{\epsilon_r^{(i)}\mu_r^{(i)}}$ とする。 i 番目の境界上の観測点を ρ_i 、積分点を ρ'_i とする。入射波が TM 波の場合は、以下の式 (1) と (2) で与えられる電界積分方程式 (EFIE) を満足する。ここで、 $H_0^{(2)}(\cdot)$ は0次の第2種 Hankel 関数、 $\partial/\partial n_n$ および dl'_n は各々 C_n 上の法線方向微分および線要素を表す。式 (1), (2) を境界要素法により離散化する。各境界を M 個の境界要素に分割し、未知関数を M 個の長方形パルス関数で展開する。さらに、Dirac のデルタ関数を用いて境界条件を整合させると、最終的に $2NM$ 次元の連立1次方程式 ($A\mathbf{x} = \mathbf{b}$) が得られる。係数行列 A の性質については次節で記述する。ベクトル \mathbf{x}, \mathbf{b} は以下の式で表される。

$$\mathbf{x} = \left(\alpha^{(1)}, \dots, \alpha^{(N)}, \beta^{(1)}, \dots, \beta^{(N)} \right)^T, \quad (3)$$

$$\mathbf{b} = \left(e_z^{(1)}, \dots, e_z^{(N)}, \mathbf{0}, \dots, \mathbf{0} \right)^T. \quad (4)$$

ここで、“ T ” は行列の転置を、ベクトル $\alpha^{(i)}, \beta^{(i)}$ は C_i 上の未知関数 E_z および $\partial E_z/\partial n_i$ を長方形パルス関数で展開したときの係数、 $e_z^{(i)}$ は C_i 上の入射波を各々表す。 $\mathbf{0}$ は零ベクトルである。これらのベクトルは各々 M 個の成分を持つ。

2.2 係数行列の物理的意味と数値的性質

式 (1) と式 (2) の積分方程式は、TM 入射波 E_z^{inc} によって生じた各誘電体表面 (境界) 上の電界 (表面磁流) E_z とその法線方向微分 (表面電流) $\partial E_z/\partial n$ を未知関数とし、これらの波源により生じる誘電体外部および内部の波動場 (この場合は電界) に関す

る性質を表す。この積分方程式を離散化して得られる連立1次方程式の係数行列 A は次式のような4つの NM 次のブロックに分けられる。

$$A = \begin{bmatrix} A_{out} & B_{out} \\ A_{in} & B_{in} \end{bmatrix} \quad (5)$$

ここで、記号“out”, “in”は誘電体外部と内部領域の波動場に関する積分方程式(1), (2)の離散化から得られたことを意味する。また、 A および B は磁流および電流による影響を各々表す。各ブロックは以下に示すようにその要素が密で M 次のブロックである。ここで、 0 は零要素を表す。

$$A = \begin{bmatrix} A_{11}^{out} & \cdots & A_{1N}^{out} & B_{11}^{out} & \cdots & B_{1N}^{out} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N1}^{out} & \cdots & A_{NN}^{out} & B_{N1}^{out} & \cdots & B_{NN}^{out} \\ A_{11}^{in} & & 0 & B_{11}^{in} & & 0 \\ & \ddots & & & \ddots & \\ 0 & & A_{NN}^{in} & 0 & & B_{NN}^{in} \end{bmatrix} \quad (6)$$

ここで、 M 次のブロック A_{ij} , B_{ij} は、1つの境界を M 個の境界要素に分割することで得られ、 m 行 n 列の要素の物理的意味は以下のとおりである。

- $[A_{ij}]_{mn}$ は、 j 番目の境界(誘電体)にある n 番目の境界要素上の単位磁流による、 i 番目の境界にある m 番目の境界要素に置かれた観測点上の波動場を表す。
- $[B_{ij}]_{mn}$ は、 $[A_{ij}]_{mn}$ に関する上記の文章中の“磁流”を“電流”に置き換えたものである。

2次元波動問題では、波源から放射される波動場の振幅は伝搬距離(源点-観測点間距離を波長で規格化)のおよそ $-1/2$ 乗で減衰する。外部領域の波動場は、式(1)の積分路からわかるように、すべての境界上の波源を考慮しており、したがってブロック A_{out} , B_{out} は密行列となる。また、 A_{ij}^{out} および B_{ij}^{out} は以下の性質を持つ。

- $i \neq j$ の場合、観測点と波源が異なる誘電体上にあるため、伝搬距離は2つの誘電体の距離に依存する。
- $i = j$ の場合、観測点と波源が同一誘電体上にあり、伝搬距離は誘電体の大きさに依存する。

したがって、 A_{out} および B_{out} の非対角ブロックの要素の絶対値は、対象となる2つの誘電体の距離がそれ自体の大きさよりも大きいとき、対角ブ

ロックの要素の絶対値より小さくなる。また、対角ブロックの対角要素については、波源と観測点が同一境界要素上にあり、伝搬距離が最も短いため、振幅の絶対値は最大となる。

各誘電体の内部領域の波動場は、式(2)の積分路からわかるように、個々の境界上の波源を考慮しており、 A_{in} , B_{in} は式(6)のように M 次の対角ブロックのみで構成される。 A_{ii}^{out} と B_{ii}^{out} は、各々 A_{ii}^{out} と B_{ii}^{out} と同様の性質を持つ。ただし、誘電体内部での電磁波の波長は外部のその $1/\sqrt{\epsilon_r^{(i)} \mu_r^{(i)}}$ 倍となることに注意を要する。

以上の議論から、式(5)で示す4ブロックは各々対角優位である、すなわち、行列の対角要素の絶対値が非対角要素のそれより大きいことがわかる。

2.3 高速多重極アルゴリズムの適用

連立1次方程式を反復法で解く場合の行列-ベクトル積の計算は、ここでは係数行列の物理的意味から、ベクトルの各成分で与えられる境界要素上の電流および磁流による観測点上の波動場を意味する。また、係数行列の上半分とベクトルの積は誘電体の外部領域の波動場計算を、係数行列の下半分とベクトルの積は各誘電体の内部領域の波動場計算を各々表す。計算量については、係数行列の上半分に対してはオーダー $O((NM)^2)$ 、一方下半分に対してはオーダー $O(NM^2)$ で見積られる。本研究は誘電体の数: N が多いときが主目的であるので、 M は定数とみなす。そのとき、計算量の見積りは各々オーダー $O(N^2)$ およびオーダー $O(N)$ となる。そして、行列-ベクトル積の計算に対して、GreengardとRokhlinにより提案された高速多重極アルゴリズム(以下、GRFMAと略す)を外部領域の波動場計算(行列の上半分とベクトルとの積)に適用する。一方、内部領域の波動場計算(下半分の行列とベクトルとの積)については定義通りの通常の方法で計算する。

文献[9]において、我々は誘電体の数: N に対する行列-ベクトル積の計算とメモリ量のオーダーを $O(N)$ まで減少させ、行列-ベクトル積の高速計算を実現した。さらに、GRFMAを使用した行列-ベクトル積の計算でも通常の計算法と同様の十分な計算精度が保たれ、反復法の収束性に影響を及ぼさないことも明らかにした。一方、BiCGシステムの反復法における1反復あたりの計算時間に占めるGRFMAの計算時間の割合は非常に大きく、実に99%以上

も占めることがわかった。

3. GMRES 法

連立 1 次方程式を反復法で解く場合、係数行列がエルミートかつ正定値のとき共役勾配法が最適な解法とされる。しかし、本論文で扱う係数行列は式 (6) で示すように非エルミート行列であり、このような行列に対する多くの反復法が従来提案されてきた。それらは Lanczos 原理に基づく BiCG 系統の反復法と Arnoldi プロセスに基づく GMRES 系統の反復法の 2 つに大別できる。本論文では後者の GMRES 法を取り上げその収束性を調べる。

GMRES 法は Krylov 部分空間法と呼ばれる反復法の 1 つである。この算法では、最初に初期解ベクトル x_0 を与え、初期残差ベクトル ($r_0 = b - Ax_0$) を求める。次に、第 i 回目の反復における残差 L_2 ノルムを次式のように与える。

$$\min_{z \in K_i} \|b - A(x_0 + z)\|_2 = \min_{z \in K_i} \|r_0 - Az\|_2 \quad (7)$$

ここで、ベクトル z は Krylov 部分空間：

$$K_i(A, r_0) = \{r_0, Ar_0, A^2r_0, \dots, A^{i-1}r_0\} \quad (8)$$

の上の正規直交系から生成され、式 (7) を満たすように選ばれる。GMRES 法では、反復回数が増えるに従って Krylov 部分空間の次元が増加する。そのため新たな正規直交ベクトルを生成させる。したがって、計算量は反復回数が増えるに従って急激に増加する。同様に、メモリ量についても反復回数の増加に従って急激に増加する。一方、1 反復あたりの行列-ベクトル積の計算回数は 1 回で済み、BiCG 系統の反復法の 2 回に比べ、これは非常に優位な点である。したがって、本研究のように、1 反復あたりの計算時間に占める行列-ベクトル積の割合が非常に大きい場合には、計算時間の短縮に非常に有利に働くものと思われる。

我々のプログラムでは、行列-ベクトル積の計算を除いた反復 Q 回繰り返した時点の 1 反復あたりの浮動小数点四則演算数と総メモリ量は次の式のように表される [10]。ただし、式 (9) において定数項は省略し、式 (10) の総メモリ量は倍精度複素数のとき 16 byte を掛ければよい。

- 演算数： $\left(4Q + 18 + \frac{8}{Q}\right)L + \frac{20}{3}Q^2 + 21Q$ (9)

- 総メモリ量： $(Q + 4)L + Q^2 + 7Q$ (10)

反復回数の増加に伴って急激に増える演算量とメモリ量をできるだけ少なくするために、Krylov 部分空間の次元を比較的小さな数 m に限定し、反復回数が m 回を超えるときはそのときの近似解を新しい初期解としてリスタートさせる GMRES(m) 法と呼ばれる反復法がある。 m はリスタート周期と呼ばれる。リスタート周期を使うと演算量やメモリ量を低く抑えることができるが、リスタート周期 m が小さ過ぎると収束性が悪化する。このため、リスタート周期 m はできるだけ大きな値をとることが望ましい。

3.1 GMRES 法の前処理について

連立 1 次方程式を反復法で解くとき、収束性向上のために前処理を施すことが一般的である。いま L 次の正方行列 $K = K_1 K_2^H$ を考える。この行列を用いて解くべき連立 1 次方程式 ($Ax = b$) を次のように変換する。

$$\bar{A}\bar{x} = \bar{b} \quad (11)$$

ただし、 \bar{A} 、 \bar{x} 、 \bar{b} は各々次式で与えられる。

$$\bar{A} = K_1^{-1} A K_2^{-H}, \quad \bar{x} = K_2^H x, \quad \bar{b} = K_1^{-1} b \quad (12)$$

ここで、添字 “ H ” は共役転置を表す。このような変換は前処理、行列 K は前処理行列と各々呼ばれる。行列-ベクトル積の計算に GRFMA を適用する場合、そのアルゴリズムの性質から係数行列の全要素を保存しないため、式 (12) を使う前処理は不可能である。そこで、式 (11) に対する反復計算の式 (反復公式) に式 (12) を用いて反復公式を書き換えている。書き換えられた反復公式には K^{-1} とベクトルとの積が部分的に追加される。なお、GMRES 法に前処理を適用する場合は、 K_1 を単位行列 I とおき、 $K = K_2^H$ とする右前処理に基づいた反復公式の書換えが通常よく行われる [10]。

一般に前処理行列 K は、(a) 連立 1 次方程式の係数行列 A に近いこと、(b) K^{-1} の計算が少ない手間でできること、などの性質を有することが望まれる。ここでは、(i) 連立 1 次方程式の係数行列はブロック構造をしていること、(ii) ブロック A_{iii}^{out} 、 B_{iii}^{out} とベクトルの積の計算についてはアルゴリズムの性質から GRFMA ではなく直接計算で評価することが多いこと、さらに、(iii) ブロック A_{iii}^{in} 、 B_{iii}^{in} とベクトルの積の計算は直接計算で行なうことから、前処理を適用しない通常の計算においてはこれらのプロセ

クの要素を全部記憶させている。したがって、本論文ではこれらのブロックの逆行列から K^{-1} を構成することにする。この方法をとれば、 K^{-1} は簡単に計算できる。また、メモリ使用量の増加も最少限に抑えられる。

4. ブロック構造を利用した前処理

ブロック構造を利用した前処理行列の逆行列 K^{-1} について考察する。以下では、表記を簡略にするため、ブロック A_{out} , B_{out} に対して、その対角ブロック (A_{ii}^{out} , B_{ii}^{out}) のみで構成されるブロックを新たに \tilde{A}_{out} , \tilde{B}_{out} で定義する。

● Block Jacobi 前処理 (BJ と略す) [15]

Block Jacobi 前処理はブロック構造を持つ前処理法として広く利用されている。Block Jacobi 前処理による K^{-1} は次式で与えられる。

$$K^{-1} = \begin{bmatrix} \tilde{A}_{out}^{-1} & 0 \\ 0 & B_{in}^{-1} \end{bmatrix} \quad (13)$$

Block Jacobi 前処理後の係数行列 A' は次式となる。 I は NM 次の単位行列を表す。

$$A' = \begin{bmatrix} A_{out}\tilde{A}_{out}^{-1} & B_{out}B_{in}^{-1} \\ A_{in}\tilde{A}_{out}^{-1} & I \end{bmatrix} \quad (14)$$

● 前処理 1 (Pre1 と略す)

一般に連立 1 次方程式を反復法で解く場合、係数行列が対角優位のとき収束性にとって好ましいことが多い。2.2 節においてすでに調べたように、係数行列を構成する 4 つのブロックは各々を単独で見た場合対角優位性を持っている。しかし、係数行列全体では対角優位性を持つとは限らない。そこで、右上の B_{out} と左下の A_{in} が持つ対角優位性を打ち消すあるいは弱めるような働きをする前処理を考える。前述の Block Jacobi 前処理では、式 (14) の形から、前処理によって B_{out} , A_{in} の対角優位性が打ち消されたとは言いがたい。そこで、前処理後の係数行列ができるだけ対角優位になるように K^{-1} を以下のように定める。

$$K^{-1} = \begin{bmatrix} -A_{in}^{-1} & \tilde{A}_{out}^{-1} \\ B_{in}^{-1} & -\tilde{B}_{out}^{-1} \end{bmatrix} \quad (15)$$

この前処理では係数行列 A' は次式で与えられる。

$$A' = \begin{bmatrix} -A_{out}A_{in}^{-1} + B_{out}B_{in}^{-1} & A_{out}\tilde{A}_{out}^{-1} - B_{out}\tilde{B}_{out}^{-1} \\ 0 & A_{in}\tilde{A}_{out}^{-1} - B_{in}\tilde{B}_{out}^{-1} \end{bmatrix} \quad (16)$$

式 (16) より、新しい係数行列の左下のブロックは零行列となる。一方、右上のブロックを構成する M 次のブロックは次式で与えられる。

$$\begin{aligned} & [A_{out}\tilde{A}_{out}^{-1} - B_{out}\tilde{B}_{out}^{-1}]_{ij} \\ &= \begin{cases} A_{ij}^{out}(A_{jj}^{out})^{-1} - B_{ij}^{out}(B_{jj}^{out})^{-1} & (i \neq j) \\ 0 & (i = j) \end{cases} \quad (17) \end{aligned}$$

式 (17) より、右上のブロックの対角ブロックは零行列となる。このように、左下および右上のブロックが持つ対角優位性が打ち消されたことにより、係数行列全体で見ると対角優位になる。

● 前処理 2 (Pre2 と略す)

前処理 1 における係数行列は式 (16) で示すように、左下のブロックが零行列である。さらに、右下のブロックも単位行列となるように K^{-1} を以下のように定める。

$$K^{-1} = \begin{bmatrix} -A_{in}^{-1} & 0 \\ B_{in}^{-1} & B_{in}^{-1} \end{bmatrix} \quad (18)$$

この前処理では係数行列 A' は次式で表される。

$$A' = \begin{bmatrix} -A_{out}A_{in}^{-1} + B_{out}B_{in}^{-1} & B_{out}B_{in}^{-1} \\ 0 & I \end{bmatrix} \quad (19)$$

この結果、前処理後の連立 1 次方程式

$$A'(Kx) = b \quad (20)$$

の解ベクトル Kx の下半分の要素はすべて 0 になる。そこで、 $Kx = [x' \ 0]^T$ と新しく定義し、元の問題を以下の連立 1 次方程式を解く問題に帰着させる。

$$(-A_{out}A_{in}^{-1} + B_{out}B_{in}^{-1})x' = b_{up} \quad (21)$$

ここで、 b_{up} は式 (4) の右辺ベクトルの上半分のベクトルを表す。ベクトル x' が求められた後に以下の変換を施すことにより、解ベクトル x が求められる。

$$x = K^{-1} \begin{bmatrix} x' \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -A_{in}^{-1}x' \\ B_{in}^{-1}x' \end{bmatrix} \quad (22)$$

前処理 2 では、扱う方程式の次元数が元の方程式の次元数の半分に減少する。したがって、GMRES 法が持つ弱点、すなわち、反復回数が増えるに従って急激に増大するメモリ量を抑えることができる。しかし、1 回の反復計算に対する GRFMA を用いた波動場計算 (行列-ベクトル積) は、前処理なしのときと同様に、 A_{out} , B_{out} の双方に対して行われ

るため、1 反復当たりの計算時間は変わらない。

● 2 段階 Block Jacobi 前処理：前処理 3 (Pre3 と略す)

前処理 2 で新しく導出された連立 1 次方程式 (21) に対して Block Jacobi 前処理をもう一度適用する。このとき、 K^{-1} は次式で与えられる。

$$K^{-1} = (-\tilde{A}_{out}A_{in}^{-1} + \tilde{B}_{out}B_{in}^{-1})^{-1} \quad (23)$$

この前処理は 2 段階に分けて前処理を行い収束性を向上させたものと考えられる。ただ、(23) 式の計算には行列-行列積の計算が含まれているため、全体の計算時間の増減については数値実験で確かめる必要がある。

5. 数値計算例

ここでは、数値計算例として格子状に配置された 9×9 個および 17×17 個の誘電体円柱による電磁波散乱問題を扱う。円柱の縦、横方向の間隔は 9×9 個のときは $48k_0a$ 、 17×17 個のときは $24k_0a$ とする。 k_0a は誘電体円柱の規格化半径で $k_0a = 3.0$ とする。境界分割数 M は 32 とする。各誘電体円柱の比誘電率 $\epsilon_r^{(i)}$ と比透磁率 $\mu_r^{(i)}$ は ϵ_r 、 $\mu_r = 1.0$ と固定する。連立 1 次方程式の次元数は 9×9 個の場合は 5184、 17×17 個の場合は 18496 になる。初期解ベクトル x_0 は零とする。最大反復回数はどちらの場合も 5000 回とし、GMRES 法のリスタート周期 m は 2500 とする。以下、通常の表記 GMRES(2500) 法は GMRES 法と略記する。反復計算は相対残差 L_2 ノルム $\|r_k\|_2 / \|b - Ax_0\|_2$ が 10^{-12} 以下のとき収束したとみなした。GRFMA による波動場 (行列ベクトル積) 計算では、計算精度の目安として、点源を用いた波動場計算の相対誤差が 10^{-10} 程度となるように展開項数を決めた。計算は全て倍精度演算で行ない、COMPAQ Alpha 21264 (クロック周波数 667MHz) のプロセッサ搭載の計算機を使用した。使用言語は C 言語、コンパイルオプションは “-fast” を使用した。メインメモリは 2GB である。

5.1 前処理の効果 (6 ケースの ϵ_r の場合)

表 1 に 17×17 個の問題に対する GMRES 法の収束までの計算時間と反復回数を示す。比誘電率 ϵ_r は 2.0, 4.0, 8.0, 16.0, 32.0, 64.0 の 6 ケースの場合である。各々の反復回数および前処理なしのときの結果を 100% としたときの各々の計算時間の比率

(単位: %) を示す。表中で、各 ϵ_r に対して最も速く収束したものを太字で表す。計算時間とメモリ量の計測には組み込み関数: getrusage 関数を使用した。

この表からわかるように、Block Jacobi 前処理 (BJ と表記) と前処理 3 (Pre3 と表記) が最も速く収束した。前処理なしのときの結果を 100% としたときの各反復回数の比率は 22.2% ~ 68.8% で、前処理の効果が大きく得られた。同様に、計算時間の比率については 20.4% ~ 66.9% の効果が得られた。この結果から、Block Jacobi 前処理と前処理 3 は計算時間の短縮に非常に有効であることがわかった。ただ、ある ϵ_r の値に対して計算時間が逆に増えることもあり、どちらの前処理がより有効であるかを見究めるためには今後一層の研究が必要である。

我々のプログラムでは、リスタート周期 $m=2500$ 回の反復で生成される正規直交ベクトルをすべて保存するため予め領域をその分だけ確保している。このため、前処理なし、Block Jacobi 前処理、前処理 1 の場合いずれも 933MB のメモリが必要であった。一方、前処理 2 および前処理 3 では、前述のように解くべき連立 1 次方程式の未知数が半分になるため、必要なメモリも 532MB (≒約 57%) に削減された。したがって、大規模問題になればなるほど前処理 3 が他の前処理よりも有利になると予想される。

5.2 反復回数の変化

図 1 と図 2 に、比誘電率 ϵ_r を 1.2 から 64.0 まで 0.2 刻みで変化させたとき、合計 315 ケースに対する GMRES 法の収束までの反復回数の変化を示す。図 1 は 9×9 個の場合、図 2 は 17×17 個の場合である。また、各図の右上の拡大図は $1 < \epsilon_r \leq 8$ のときの変化の様子を詳しく観察するために表した。前処理を用いない場合の反復回数は ϵ_r の変化に対して振動的な増減を繰り返していることがわかる。また、図 3 は 9×9 個の問題に対する GMRES 法、CGS 法、BiCGStab(16) 法で計算を行ったときの収束までの反復回数が振動する様子を表したものである。なお、CGS 法および BiCGStab(16) 法の結果は文献 [9] から引用した。図 3 中に挿入した縦方向に伸びた多くの実線は振動の山の位置を、同じく多くの破線は谷の位置を各々表したものである。この図からわかるように、 ϵ_r の変動に対して、3 つの反復法の反復回数の増減の様子、すなわち、振動の山と谷の位置はほとんどの場合一致している。したがって、このように反復回数が ϵ_r の変動に対して

振動する原因は使用した反復法の側にはないことがわかる。いまのところ、誘電体内部領域の波動場計算での ϵ_r による伝搬距離の変化と電磁波の周期性がこのような反復回数の振動に関連しているのではないかと考えられている。

5.3 周期的な反復回数の変化に対する考察

2.2 節で考察したように、誘電体内部の波長は外部のその $1/\sqrt{\epsilon_r}$ で変化し、ブロック A_{in} , B_{in} の要素はパルス状の波源による内部領域の波動場を表している。このとき、比誘電率 ϵ_r の変化により、伝搬距離が変化するため、ブロック A_{in} , B_{in} の要素も変化する。また、電磁波は周期的に変化するため、ブロックの要素も周期的に変化する。したがって、係数行列の性質も周期的に変化し、そのため反復回数もそれに伴って周期的な変動をするのではないかと考えられる。ただし、実際には伝搬距離の約 $-1/2$ 乗で波動場の振幅は減衰するため、反復回数への影響は小さい可能性も残っている。

比誘電率が $1 < \epsilon_r \leq 16$ のとき、反復回数は振動の間隔が短くなり回数は増加する傾向を示している。これは、 ϵ_r が 1 に近いほど、ブロック A_{in}^{out} と B_{in}^{out} は各々 A_{in}^{out} と B_{in}^{out} に近づき、反復法の収束は速くなる。しかし、内部の波動場の波長は外部のその $1/\sqrt{\epsilon_r}$ 倍の大きさがあり、 ϵ_r の変化による伝搬距離の変化が大きいため、 ϵ_r の僅かな変化に対しても、ブロック A_{in}^{out} , B_{in}^{out} の性質は大きく変化する。したがって、この範囲の ϵ_r に対して、反復回数は振動の間隔が短かつ増加する傾向を示すのではないかと考えられる。

一方、比誘電率が $\epsilon_r \geq 16$ のとき、振動の間隔が徐々に長くなり、反復回数が減少する傾向が見られる。これは、 ϵ_r の変化による伝搬距離の変化が小さく、ブロック A_{in}^{out} , B_{in}^{out} の変化が緩やかになること、さらに誘電体内部の波動場計算における伝搬距離が長くなるため、 A_{in}^{out} , B_{in}^{out} の非対角要素がさらに減少しその結果対角優位性が強くなったため、と考えられる。

この外的原因として、 ϵ_r の増加により誘電体内部の電磁波の波長が短くなると、電磁波の波長に対して誘電体の大きさが相対的に大きくなるため、共振現象により非物理的な解(共振解)が混入し、連立 1 次方程式が解きにくくなることも予想される。今後、数学・物理的な立場からの詳細な考察が必要である。

5.4 前処理の効果 (BJ と Pre3 前処理)

ブロック構造を利用した前処理を適用したときの反復回数は、比誘電率 ϵ_r の変化に対して、前節と同様、振動的に変化する。しかし、前処理なしの場合と比較して振動の間隔は長く、 $\epsilon_r \geq 16$ における反復回数の減少傾向も顕著であり、前処理の効果が現われている。表 2 は ϵ_r の変化に対して、反復回数が最も少なかった前処理の比率の度数分布を表す。ただし、比率は前処理なしの結果を 100%として集計しそれを分類したものである。右表に示した 17×17 個の問題において、合計数が 314 と 1 つ数が不足している。これは、 $\epsilon_r = 3.2$ のとき、前処理なしが最も少ない反復回数で収束したためである。図 4 に各前処理に対する収束の履歴を示す。

表 2 の結果からわかるように、Block Jacobi 前処理および前処理 3 が多くの場合反復回数が最も少なく、前処理なしの結果を 100%としたときの反復回数の比率はほとんどの例で 25%以下で非常に反復回数の減少に効果があった。さらに、図 1 と図 2 で見たように、この 2 つの前処理による反復回数の振動を見比べると、 $\epsilon_r \geq 8$ において、振動の山と谷の位置が交互に入れ替わり、互いの弱点を補うような特徴を示していることがわかる。

図 5~ 図 7 は、最も速く収束した前処理つき GMRES 法の収束履歴を表している。ただし、プロットした履歴は前処理なしの結果を 100%としたとき反復回数の比率が最も小さいときの履歴である。図 5 は Block Jacobi 前処理、図 6 は前処理 2、図 7 は前処理 3 の場合である。

6. おわりに

多数の誘電体円柱による電磁波散乱問題を扱い、境界要素法を用いて数値計算を行った。連立 1 次方程式の求解では前処理つきの GMRES 法を使用し、行列-ベクトル積の計算に GRFMA を使用した。また、係数行列が持つブロック構造を利用して新しい前処理法を提案した。

前処理の効果については、調べたほとんどの比誘電率 ϵ_r に対して、通常の Block Jacobi 前処理と前処理 3、すなわち 2 段階 Block Jacobi 前処理が計算時間の短縮に有効で、前処理なしのときの結果を 100%としたとき反復回数の比率はほとんどの場合 25%以下に激減した。この 2 つの前処理は、反復回数の振動の山と谷が逆転し、互いに不利となる ϵ_r

に対して相補完するような特徴を有することがわかった。さらに、2段階 Block Jacobi 前処理で必要になるメモリ量は通常の Block Jacobi 前処理の約半分で、反復回数の削減効果だけでなく使用メモリ量の削減においても非常に有効な手法であることがわかった。

さらに、誘電体の比誘電率 ϵ_r を変化させたとき現れる反復回数の振動の原因を、 ϵ_r による伝搬距離のずれと電磁波の周期性から考察した。今後、より詳細な考察が必要である。また、今回の計算では、比誘電率 ϵ_r を変化させ、係数行列の下半分の要素を変化させた。これに対して、係数行列の上半分の要素は円柱間の距離に依存する。粒子間距離は、多数の粒子からなる媒質に対する粒子の体積占有率に依存し、散乱特性に基づいた電気的特性を評価する上で重要なパラメータである。したがって、円柱間距離をパラメータとしたときの数値計算についても提案した前処理の適用を検討したい。

謝辞

本研究の一部は、日本学術振興会 科学研究費補助金 (課題番号 A:12305027) の助成による。

参考文献

[1] M. Tateiba, "A New Approach to the Problem of Wave Scattering by Many Particles", *Radio Science*, Vol. 22, No. 6, pp. 881-884, 1987.
 [2] M. Tateiba, "Electromagnetic Wave Scattering in Media Whose Particles are Randomly Displaced from a Uniformly Ordered Spatial Distribution", *IEICE Trans. Electron.*, Vol. E78-C, No. 10, October 1995.
 [3] Y. Nanbu and M. Tateiba, "A Comparative Study of the Effective Dielectric Constant of a Medium Containing Randomly Distributed Dielectric Spheres Embedded in a Homogeneous

Background Medium", *Waves in Random Media*, Vol. 6, No. 4, pp. 347-360, October, 1996.
 [4] L. Greengard and V. Rokhlin, "A Fast Algorithm for Particle Simulations", *J. Comput. Phys.*, Vol. 73, pp. 325-348, 1987.
 [5] 小林 昭一編著, "波動解析と境界要素法", 京都大学出版局, 2000.
 [6] 中嶋 徳正, 立居場 光生, "2次元電磁波散乱の数値計算 一高速多重極法の適用一", 電気学会電磁界理論研究会資料, EMT-00-55, October 2000.
 [7] N. Nakashima and M. Tateiba, "Numerical Calculation of Scattering from N Conducting Circular Cylinders by Using Greengard-Rokhlin's Fast Multipole Algorithm", *IEEE AP-S International Symposium*, San Antonio, TX, June, 2002.
 [8] 中嶋 徳正, 立居場 光生, 藤野 清次, "高速多重極アルゴリズムを用いた多数の誘電体円柱による電磁波散乱の数値計算の高速化について - BiCG 系統の反復解法の性能評価 -", 情報処理学会 HPC 研究会資料, HPC-91-1, August, 2002.
 [9] 中嶋 徳正, 藤野 清次, 立居場 光生, "多数の誘電体円柱の電磁波散乱問題の高速計算について", 投稿中.
 [10] 藤野 清次, 張 紹良, "反復法の数理", 朝倉書店, 1996.
 [11] Y. Saad and M. Schultz, "GMRES: A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems", *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol. 7, No. 3, pp. 856-869, 1986.
 [12] Freund, R.W.: A Transpose-free Quasi-Minimal Residual Algorithm for Non-Hermitian Linear Systems, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 14, No. 2, pp. 470-482(1993).
 [13] Sleijpen, G.L., Fokkema, D.R.: BICGSTAB (L) for Linear Equations Involving Unsymmetric Matrices with Complex Spectrum, *Elect. Trans. Numer. Anal.*, Vol. 1, pp. 11-32(1993).
 [14] Sonneveld, P.: CGS: A Fast Lanczos-type Solver for Nonsymmetric Linear Systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol. 10, pp. 36-52(1989).
 [15] R. Barrett, et al., "Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods", *SIAM*, Philadelphia, PA, 1994.
 [16] 藤野清次, 阿部邦美, "BiCG 系統の反復法に対する効果的な収束改善法について", HPCS2002, 2002.1.

表 1: 各前処理つき GMRES 法の収束までの反復回数, 計算時間および前処理なし (Nopre) の場合との比率 (円柱の数: 17×17 , 上段: 反復回数, 計算時間 (単位: 秒), 下段: 比率 (単位: %))

前処理	比誘電率 ϵ_r											
	2.0		4.0		8.0		16.0		32.0		64.0	
	Iter.	Time	Iter.	Time	Iter.	Time	Iter.	Time	Iter.	Time	Iter.	Time
Nopre	1088	9400.4	1691	15247.3	1479	13182.1	1047	9069.3	836	7136.6	1538	13734.5
	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100
BJ	1747	15829.3	1023	8859.6	1386	12276.1	373	3099.8	323	2674.8	422	3519.0
	160.6	168.4	60.5	58.1	93.7	93.1	35.6	34.2	38.6	37.5	27.4	25.6
Pre1	1482	13112.3	1359	11932.2	1495	13225.3	954	8166.4	1418	12479.1	919	7846.1
	136.2	139.5	80.4	78.3	101.1	100.3	91.1	90.0	169.6	174.9	59.8	57.1
Pre2	1215	10250.6	1064	8930.1	1353	11471.6	718	5958.2	1004	8414.0	634	5244.7
	111.7	109.0	62.9	58.6	91.5	87.0	68.6	65.7	120.1	117.9	41.2	38.2
Pre3	749	6287.1	414	3419.4	821	6922.2	429	3545.9	1129	9675.0	341	2805.9
	68.8	66.9	24.5	22.4	55.5	52.5	41.0	39.1	135.1	135.6	22.2	20.4

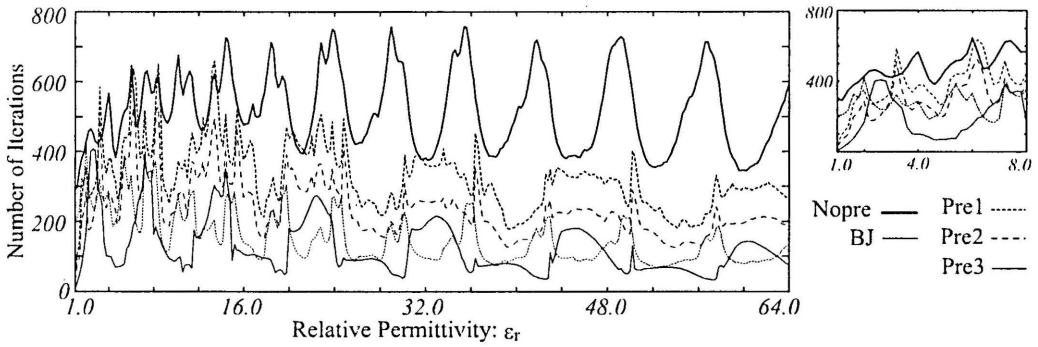


図 1 : 比誘電率 ϵ_r ごとの反復回数の変化 (円柱の数 : 9×9 個のとき) および拡大図

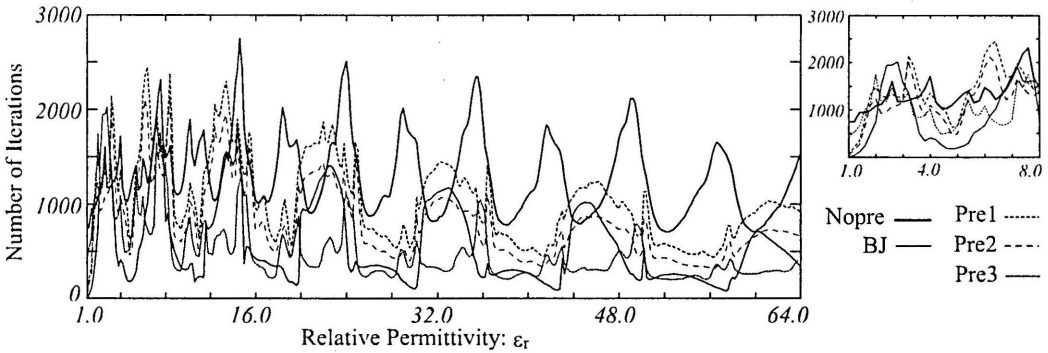


図 2 : 比誘電率 ϵ_r ごとの反復回数の変化 (円柱の数 : 17×17 個のとき) および拡大図

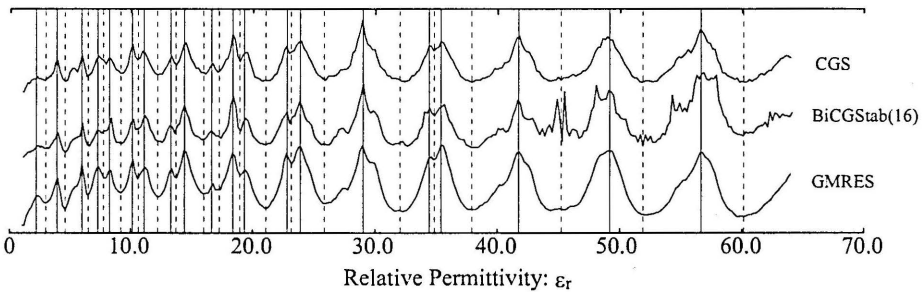


図 3 : 反復法の違いによる比誘電率 ϵ_r ごとの反復回数の変化 (円柱の数 : 9×9 個, 前処理なしの場合)

表 2 : 反復回数が最も少なかった前処理の比率に応じた度数分布 (前処理なしの場合を 100%とした)
(円柱の数 : 9×9 個 (左表), 17×17 個 (右表))

ratio[%]	BJ	Pre1	Pre2	Pre3	Total
75 ~ 100	0	0	0	0	0
50 ~ 75	6	0	0	3	9
25 ~ 50	33	0	3	14	50
0 ~ 25	73	0	0	183	256
Total	112	0	3	200	315

ratio[%]	BJ	Pre1	Pre2	Pre3	Total
75 ~ 100	1	0	5	1	7
50 ~ 75	10	0	0	5	15
25 ~ 50	47	0	0	18	65
0 ~ 25	125	0	0	102	227
Total	183	0	5	126	314

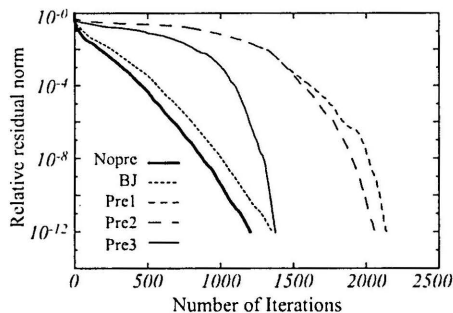


図 4：前処理なしの場合が最も速く収束したときの収束の履歴 (17 × 17 個, $\epsilon_r = 3.2$ のとき)

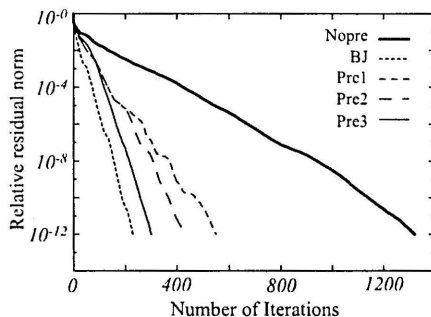
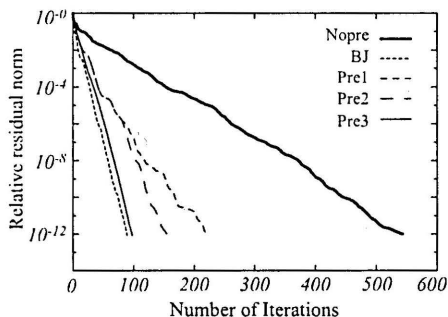


図 5：Block Jacobi 前処理が最も速く収束したときの収束の履歴 (ただし、前処理なしのときの結果を 100%としたとき反復回数の比率が最も小さい場合 (左：9 × 9 個, $\epsilon_r = 17.6$, 比率 16.39%, 右：17 × 17 個, $\epsilon_r = 28.2$, 比率 17.40%))

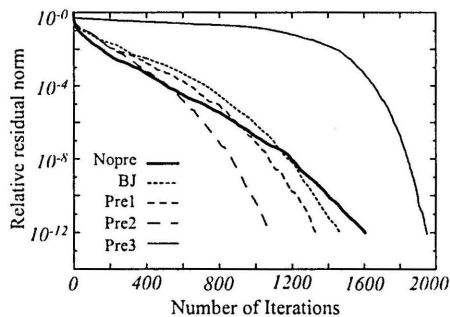
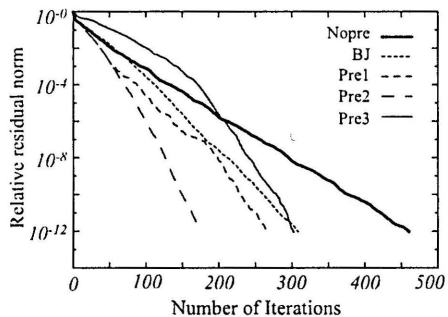


図 6：前処理 2 が最も速く収束したときの収束の履歴 (ただし、前処理なしのときの結果を 100%としたとき反復回数の比率が最も小さい場合 (左：9 × 9 個, $\epsilon_r = 2.2$, 比率 38.40%, 右：17 × 17 個, $\epsilon_r = 2.6$, 比率 67.17%))

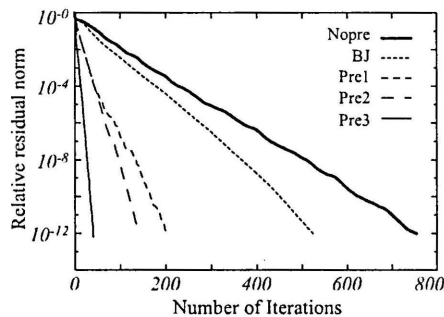
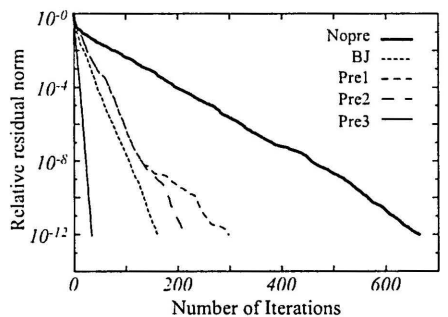


図 7：前処理 3 が最も速く収束したときの収束の履歴 (ただし、前処理なしのときの結果を 100%としたとき反復回数の比率が最も小さい場合 (左：9 × 9 個, $\epsilon_r = 57.4$, 比率 4.98%, 右：17 × 17 個, $\epsilon_r = 1.2$, 比率 5.31%))