

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 -

中嶋 徳正 立居場 光生 藤野 清次[†]

(九州大学大学院システム情報科学府, 九州大学情報基盤センター[†])

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最終的に密な係数行列をもつ連立 1 次方程式の計算に帰着される。また、連立 1 次方程式の次元数は入射波長に対する物体のサイズ、物体の数に依存する。本稿で扱う電磁波散乱の問題は、大規模な数値計算になり、連立 1 次方程式の求解の高速・高効率化は極めて重要である。いままで、筆者らは主に反復法における行列・ベクトル積計算の高速・高効率化を図り成功してきた。次の課題は効率のよい反復法を探すことである。本稿では、BiCG 系統の反復法を適用し、その収束性と計算時間などを評価する。

Accerelation of Computation for Scattering Problem with Many Dielectric Cylinders by means of a Fast Multipole Algorithm.

- An Evaluation of Efficiency for BiCG-like Solvers -

Norimasa NAKASHIMA, Mitsuo TATEIBA and Seiji FUJINO[†]

(Graduate School of Information Science and Electrical Engineering, Kyushu University,
Computing and Communications Center, Kyushu University[†])

The computation of EM wave scattering problem by means of the boundary element method results in solving a linear system of equations with dense coefficient matrix. The number of unknowns for the linear system depends on the size and the number of scatterers. In the past research, we have reduced drastically the floating point operations and the amount of used memory for matrix-vector product appeared in iterative methods. In this article we treat with a large scaled scattering problem, and evaluate a variety of BiCG-like iterative methods in view of efficiency and the amount of necessary memory.

1. はじめに

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、最終的に L 次元の密な係数行列をもつ連立 1 次方程式をの計算に帰着される。連立 1 次方程式を解く方法は直接解法と反復解法の二つに大別される。反復解法 (特に非定常反復解法) は次元数 L よりも少ない反復回数で十分な精度の近似解を得られることや必要なメモリ量が少ないなどの理由から使用されることが多い。非定常反復解法の算法中には行列・ベクトル積の計算が含まれ、その計算量は $O(L^2)$ で見積られる。筆者らは、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を行列・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減少させることを初めて示した [3, 4]。しかし、一般に非定常反復解法は問題に

より収束性が異なることが知られており、解くべき問題に応じて反復回数や計算時間が最も少ない解法を選ぶことは非常に重要である。

本稿では、多数の誘電体円柱による電磁波散乱問題において、連立 1 次方程式の求解に BiCG 系統の反復解法を採用し、収束性と計算時間を評価する。以下において、虚数単位は $j = \sqrt{-1}$ 、電磁波の時間変動は $e^{j\omega t}$ 、電磁波の角周波数は ω で表す。

2. 多数の誘電体柱による散乱の数値計算

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、ここでは、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 $\varepsilon_0, \mu_0, k_0 = \omega\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}$

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 $\varepsilon_r^{(i)}$, $\mu_r^{(i)}$, $k_i = k_0 \sqrt{\varepsilon_r^{(i)} \mu_r^{(i)}}$ 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，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．この方程式では TM 入射波 E_z^{inc} によって生じる各誘電体表面上の電界 (表面磁流) E_z とその法線方向微分 (表面電流) $\partial E_z/\partial n$ を未知関数としている．式 (1), (2) は境界要素法により離散化すると連立 1 次方程式に帰着される．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， $2NM$ 次元の連立 1 次方程式 ($Ax = b$) が得られる．行列 A は M 次の密なブロックからなり次のように表せる．

$$A = \begin{bmatrix} a_{11}^{\text{out}} & \cdots & a_{1N}^{\text{out}} & b_{11}^{\text{out}} & \cdots & b_{1N}^{\text{out}} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N1}^{\text{out}} & \cdots & a_{NN}^{\text{out}} & b_{N1}^{\text{out}} & \cdots & b_{NN}^{\text{out}} \\ a_{11}^{\text{in}} & & 0 & b_{11}^{\text{in}} & & 0 \\ & \ddots & & & \ddots & \\ 0 & & a_{NN}^{\text{in}} & 0 & & b_{NN}^{\text{in}} \end{bmatrix} \quad (3)$$

ブロック b_{ij} , a_{ij} の成分は，Hankel 関数とその法線方向微分の境界要素積分で表される．添字 “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) を各々離散化したことにより得られたことを意味する．0 は零要素である．ベクトル x , b は M 個の成分を持つベクトルからなり次のように表される．

$$x = \left(\alpha^{(1)}, \dots, \alpha^{(N)}, \beta^{(1)}, \dots, \beta_m^{(N)} \right)^T \quad (4)$$

$$b = \left(e_z^{(1)}, \dots, e_z^{(N)}, 0, \dots, 0 \right)^T \quad (5)$$

ベクトル $\alpha^{(i)}$, $\beta^{(i)}$ は C_i 上の未知関数 E_z , $\partial E_z/\partial n_i$ 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．0 は零ベクトルである． T は転置を表す．

連立 1 次方程式を非定常反復解法で解く場合，算法中の行列 - ベクトル積の計算が必要になる．本研究の場合，行列 - ベクトル積は，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計算する．ここで， A の上半分は誘電体外部の波動場に関する積分方程式 (1) を離散化したもので，全ての境界要素による影響を考慮している．したがって，計算量は $O((NM)^2)$ となる．これに対して， A の下半分は誘電体内部の波動場に関する積分方程式 (2) を離散化したもので，各境界の境界要素による影響を考慮している．したがって，計算量は $O(NM^2)$ となる．本稿では，行列の上半分とベクトルとの積の計算に Greengard-Rokhlin の高速多重極アルゴリズム (以下，GRFMA と略す) を適用して計算量を減少させる．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．

3. Greengard-Rokhlin の高速多重極アルゴリズム (GRFMA)

本節では，行列 - ベクトル積の高速で高効率な計算法：GRFMA について簡単に説明する．アルゴリズムの詳細は文献 [1]–[3] を参照されたし．

GRFMA では，セルを用いて全ての境界要素と観測点をグループ化し，以下の五つの計算過程を経て波動場 (行列 - ベクトル積) を計算する．

1. 境界要素より放射される波動場の多重極展開
2. 多重極展開の中心の移動 (M2M)
3. 多重極展開から局所展開への変換 (M2L)
4. 局所展開の中心の移動 (L2L)
5. 局所展開による観測点上の波動場計算

以上の計算手順により，観測点のグループに対して遠方にある多くの境界要素のグループからの影響をまとめて計算することにより計算量を減少させる．

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

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

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

状に配置された誘電体円柱による電磁波散乱問題を扱う．各誘電体円柱の比誘電率 $\varepsilon_r^{(i)}$ および比透磁率 $\mu_r^{(i)}$ は ε_r, μ_r で統一し， $\mu_r = 1.0$ とする．正方形セルの大きさは $386k_0a$ と固定する． 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．GRFMA による計算では $\varepsilon_{tol} = 10^{-10}$ として展開項数を設定する．演算は全て倍精度演算で，計算は全て COMPAQ Alpha 21264 (クロック 667MHz) のプロセッサ搭載の計算機で行った．使用言語は C，コンパイルオプションは “-fast” を使用した．メモリは 2GB である．

5.1 GRFMA による行列 - ベクトル積の計算

ここでは，円柱の数を 3×3 個 (行列の次元数 $2NM$ は 576) から，格子間隔を半分ずつにしながら 129×129 個 (同次元は 1,065,024) まで増加させ，通常の方法および GRFMA により行列 - ベクトル積の計算を行った．ただし，メモリ容量の制限により通常の方法では 9×9 個 (同次元数は 5184) までしか計算できなかった．図 1 に各計算時間をプロットしたものを示す．通常の方法の結果 (図中で 3 個の印) および GRFMA の結果 (図中で 9 個の印) をプロットした．この図は GRFMA を一部適用した行列 - ベクトル積の計算時間はおおよそ $O(NM)$ を示している．係数行列 (3) の下半分とベクトルの積の計算量は直接計算を行っているため行列 - ベクトル積の計算時間は $O(NM^2)$ となることが最初予想されたが， M の値が N に比べて十分小さいため， $O(NM^2)$ の影響がほとんど無視されたと考えられる．図 2 にメモリ量をプロットした．GRFMA の適用によりおおよそ $O((NM)^{3/4})$ にまでメモリ量は減少した．

つぎに，GRFMA による行列 - ベクトル積の相対誤差を次の式で評価する．

$$\text{相対誤差} = \frac{\|A_{\text{通常}}x - A_{\text{FMA}}x\|_2}{\|A_{\text{通常}}x\|_2} \quad (7)$$

$A_{\text{FMA}}x$ および $A_{\text{通常}}x$ は GRFMA および通常の方法による行列 - ベクトル積を表す．ベクトル x の各成分には実部，虚部ともに区間 $[0, 1]$ の一様乱数で与えた．表 1 に GRFMA による行列 - ベクトル積の相対誤差を $\varepsilon_r = 2.0, 32.0$ の場合について示す．GRFMA による行列 - ベクトル積計算の相対誤差は， $\varepsilon_{tol} = 10^{-10}$ よりも十分小さいので，行列 - ベクトル積計算が良好に行われたことを示している．

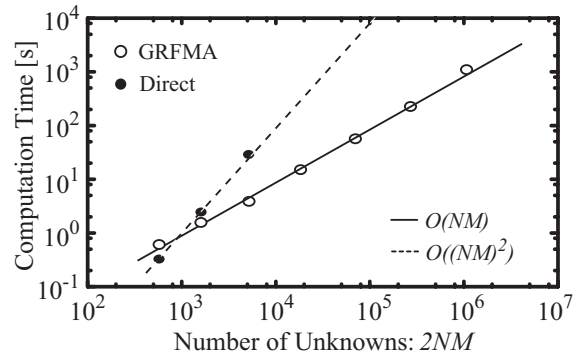


図 1: 行列 - ベクトル積 1 回に要する計算時間

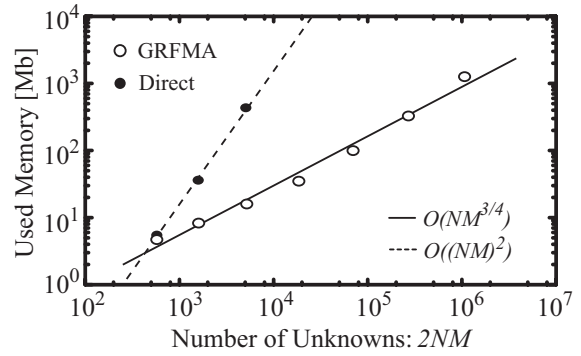


図 2: 行列 - ベクトル積に必要なメモリ量

表 1: GRFMA による行列-ベクトル積の相対誤差

N	M	$2NM$	$\varepsilon_r = 2.0$	$\varepsilon_r = 32.0$
3×3	32	576	$8.97\text{e-}13$	$1.27\text{e-}12$
5×5	32	1600	$1.07\text{e-}12$	$1.50\text{e-}12$
9×9	32	5184	$4.52\text{e-}12$	$5.80\text{e-}12$

5.2 BiCG 系統の反復解法の性能評価

ここでは， 9×9 個の誘電体円柱を例として， ε_r を 2.0 から 32.0 まで変化させる．このときの各解法による反復回数を比較する．連立 1 次方程式の次元数は 5184 で，相対残差ノルム $\|r_k\|_2 / \|b\|_2 < 10^{-12}$ のとき反復を終了する．最大反復回数は 5000 回で， $\|r_k\|_2 / \|b\|_2 > 10^6$ のときは発散したとみなして反復を強制終了させる．解ベクトルの初期値は全て零とした．初期 Shadow 残差 r_0^* については，(i) $r^* = r_0$ と (ii) 実部，虚部ともに区間 $[0, 1]$ の一様乱数を代入した場合，さらに (iii) Block Jacobi 前処理 (以下，BJ 前処理と略す) の有無，合計 4 つの場合について計算をさせた．

結果を表 2 から表 5 に示す．なお，各表において解法の名称は “BiCG” を省いた簡略な形で示した．また，表中の “×” 印は相対残差ノルムの発散，“-” 印は停滞または最大反復回数までで収束しなかったことを表す．

表 2 および表 3 に $r_0^* = r_0$ としたときの結果を示

す．BiCGStab(16) や BiCGStab(8) が非常に速く収束した．BJ 前処理を施すと，反復回数が減少したり，CGS や TFQMR の場合のように今まで収束しなかったものが収束するようになるなど，収束が改善される場合が多くなった．しかし， $\varepsilon_r = 2.0$ のときではほとんどの反復法の反復回数が増大したり， $\varepsilon_r = 8.0, 64.0$ のときでは，残差ノルムが停滞したりする．以上のことから，BJ 前処理が反復回数をいつも減らすわけではないことを表している．

表 4 および表 5 に r_0^* を一様乱数としたときの結果を示す． $r_0^* = r_0$ のとき，これまでほとんどの場合について収束しなかった CGS, TFQMR が逆に最も速く収束した．一方，これ以外の反復解法については， $r_0^* = r_0$ の結果と比べて反復回数はパラメータごとに傾向が異なる．BJ 前処理の適用効果については，CGS, TFQMR 以外の反復法では，前述の結果とほぼ同じであるが，CGS と TFQMR では $\varepsilon_r = 2.0$ の場合を除いて反復回数が減少した．以上のことから， r_0^* に一様乱数を代入する方法および BJ 前処理は，CGS および TFQMR の反復回数を減少させる極めて有用な方法であると思われる．

全体として，比誘電率 ε_r をパラメータとしたとき， ε_r が小さいほど反復回数が多く，逆に ε_r が大きいほど反復回数が少ない傾向にある．BJ 前処理や r_0^* に一様乱数を代入する方法の場合， ε_r が大きいほど反復回数は大幅に減少する．しかし， $\varepsilon_r = 2.0$ のときは BJ 前処理をすると逆に反復回数は増加した．このことから，多数の誘電体円柱がある散乱問題では，比誘電率が高いほど連立 1 次方程式は解きやすい性質を有すると予想される．

BiCG 系統の反復解法の反復 1 回あたりの浮動小数点演算の回数（プログラム中でカウント）と計算時間を表 6 に示す．ただし，浮動小数点演算の回数は GRFMA による行列 - ベクトル積の計算部分を除く．この結果からわかるように，浮動小数点演算の回数は反復解法や前処理の適用の有無により最大で 3.65 倍もの差が生じた．これに対して，計算時間の方は反復 1 回あたり 8 秒前後とほぼ一定の値である．5.1 節の結果より GRFMA による行列 - ベクトル積の計算量のオーダは反復解法における行列 - ベクトル積以外の計算過程のそれと同じになることを示した．しかし，GRFMA による行列 - ベクトル積の浮動小数点演算回数は反復解法における行列 - ベクトル積を以外の計算過程のそれと比べ圧倒的に多いため，演算量の比に対して計算時間はほ

ぼ一定となる結果を示した．

表 6：反復 1 回当たりの浮動小数点演算回数（GRFMA による行列 - ベクトル積を除く），計算時間とベクトル数

反復法	CGS		BiCGStab(16)	
	演算量	比率	演算量	比率
演算量	582	1094	845	2125
比率	(1.00)	(1.88)	(1.45)	(3.65)
計算時間	7.81	7.84	8.27	8.08
比率	(1.00)	(1.00)	(1.06)	(1.03)
ベクトル数	8	8	38	39

6. おわりに

本稿では，多数の誘電体円柱による電磁波散乱問題を設定し，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 7 種類の BiCG 系統の反復法で行ない，その収束性と計算時間を評価した．BiCG 系統の反復法では，初期 Shadow 残差に一様乱数を代入しかつ BJ 前処理付きの CGS と TFQMR が最も速く収束するがわかった．また，BJ 前処理付きの BiCGStab(8) や BiCGStab(16) も高い収束性を示した．比誘電率 ε_r を変化させたとき，反復回数は ε_r が小さいほど増加して解きにくくなる．また， $\varepsilon_r = 2.0$ のときのように，BJ 前処理をすると逆に収束が遅くなる場合もあった．

さらに，行列 - ベクトル積の計算の一部に GRFMA を組み込み性能を評価した．その結果，GRFMA は行列 - ベクトル積に対する高速で高効率な計算法であることを示した．しかし，反復 1 回の中で行列 - ベクトル積の計算が占める割合が非常に大きいことも再確認した．

今後は，GMRES 系統の反復法を適用し，BiCG 系統の反復法の結果と比較検討する予定である．また，BJ 前処理以外の前処理法あるいは散乱現象に基づいた初期ベクトルの与え方などについても検討していきたい．

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] L. Greengard and V. Rokhlin, "A Fast Algorithm for Particle Simulations", *J. Comput. Phys.*, vol. 73, pp. 325-348, 1987.

- [2] 小林 昭一編著, “波動解析と境界要素法”, 京都大学出版局, 2000.
- [3] 中嶋 徳正, 立居場 光生, “2 次元電磁波散乱の数値計算 - 高速多重極法の適用 -”, 電気学会電磁界理論研究会資料, EMT-00-55, Oct. 2000.
- [4] 中嶋 徳正, 立居場 光生, “高速多重極法を用いた導体円柱散乱の数値計算 - 高速フーリエ変換の適用 -”, 電気学会電磁界理論研究会資料, EMT-01-50, Jun. 2001.
- [5] R. W. Freund, “A Transpose-free Quasi-Minimal Residual Algorithm for Non-Hermitian Linear Systems”, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 14, No. 2, pp. 470-482, Mar. 1993.
- [6] 藤野 清次, 張 紹良, “反復法の数理”, 朝倉書店, 1996.
- [7] R. Barrett, *et al.*, “Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods”, *SIAM*, Philadelphia, PA, 1994.
- [8] S. Fujino, GPBiCG(m, l): A hybrid of BiCGSTAB and GPBiCG methods with efficiency and robustness, *Applied Numerical Mathematics*, Vol.41, pp. 107-117, 2002.
- [9] G. L. G. Sleijpen and D. R. Fokkema, “BiCGSTAB(L) for Linear Equations Involving Unsymmetric Matrices with Complex Spectrum”, *Elect. Trans. Numer. Anal.*, Vol. 1, pp. 11-32, Sep. 1993.
- [10] 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 2 : 収束までの反復回数 ($r_0^* = r_0$, 前処理なし)

解法	パラメータ ε_r					
	2.0	4.0	8.0	16.0	32.0	64.0
CGS	×	×	×	×	×	×
TFQMR	×	×	×	×	×	×
Stab	1413	2930	-	-	2313	-
GP	487	903	1315	1266	688	1526
Stab2	544	888	1819	1031	627	2534
GP(1,2)	528	958	1515	1156	602	1432
(1,3)	580	914	1391	1003	595	1288
(1,4)	588	1039	1476	1037	619	1455
(1,5)	482	997	1420	964	714	1510
GP(2,1)	623	1118	2113	1209	744	3269
(3,1)	772	1244	2556	1644	869	4526
(4,1)	764	1396	2507	1551	1091	4003
(5,1)	799	1564	3214	2413	1000	2971
Stab(2)	550	888	1510	1226	632	1722
(4)	360	600	740	564	460	840
(8)	328	552	552	448	400	704
(16)	304	512	544	432	400	768

表 3 : 収束までの反復回数 ($r_0^* = r_0$, BJ 前処理)

解法	パラメータ ε_r					
	2.0	4.0	8.0	16.0	32.0	64.0
CGS	×	×	×	171	94	144
TFQMR	×	×	×	158	98	144
Stab	971	446	-	673	190	-
GP	518	232	-	291	101	1449
Stab2	724	244	-	306	111	-
GP(1,2)	560	263	-	338	111	-
(1,3)	556	223	-	269	114	-
(1,4)	586	230	-	333	113	-
(1,5)	601	247	-	365	110	-
(2,1)	626	257	-	327	127	-
(3,1)	600	266	-	410	120	-
(4,1)	726	280	-	435	139	-
(5,1)	786	320	-	444	140	-
Stab(2)	530	226	-	334	106	-
(4)	428	192	3592	176	92	348
(8)	376	176	616	128	72	128
(16)	384	192	400	96	80	112

表 4 : 収束までの反復回数 ($r_0^* = \text{Random}$, 前処理なし)

解法	パラメータ ε_r					
	2.0	4.0	8.0	16.0	32.0	64.0
CGS	293	429	403	343	289	451
TFQMR	292	433	423	344	289	469
Stab	1331	2670	3506	-	2952	-
GP	645	1008	1547	1445	1108	2425
Stab2	468	758	1032	999	669	1269
GP(1,2)	474	744	1031	982	571	1448
(1,3)	480	770	1029	1004	650	1331
(1,4)	453	765	1003	1230	717	1430
(1,5)	486	755	925	1071	610	1319
GP(2,1)	545	864	1255	1698	747	1788
(3,1)	570	776	1501	2356	864	2585
(4,1)	635	1068	1668	2025	996	2027
(5,1)	734	1029	1839	1910	1119	2797
Stab(2)	420	798	890	1160	576	1136
(4)	328	600	580	576	412	852
(8)	320	472	520	472	376	672
(16)	304	464	512	464	352	592

表 5 : 収束までの反復回数 ($r_0^* = \text{Random}$, BJ 前処理)

解法	パラメータ ε_r					
	2.0	4.0	8.0	16.0	32.0	64.0
CGS	338	196	254	89	64	91
TFQMR	337	196	257	89	64	91
Stab	872	380	-	620	155	-
GP	606	236	-	309	105	-
Stab2	674	260	-	285	115	-
GP(1,2)	605	237	-	254	116	-
(1,3)	620	233	-	311	119	-
(1,4)	612	217	-	305	112	-
(1,5)	633	225	-	326	114	-
GP(2,1)	735	242	-	355	114	-
(3,1)	786	266	-	397	130	-
(4,1)	849	300	-	422	130	-
(5,1)	858	276	-	396	126	-
Stab(2)	562	232	-	316	120	-
(4)	416	200	3324	156	100	156
(8)	384	184	736	112	72	104
(16)	368	176	368	128	80	112