

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

中嶋 徳正[†] 藤野 清次^{††} 立居場 光生^{†††}

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、計算の主要部は最終的に密な係数行列を持つ大規模な連立1次方程式の計算に帰着されることが多い。そしてその次元数は入射波長に対する物体のサイズ、物体の数などに依存する。そのため、解析対象の問題がより実際的なになればなるほど、連立1次方程式の求解の高速化はきわめて重要になってくる。そこで、本研究の目的は、より大規模で実際の電磁波散乱問題への適用を目指して、反復法の収束性について研究し、高速計算法を見出すことにある。反復法にはBiCG系統の反復法の適用を検討した。その結果、初期Shadow残差ベクトルに擬似一様乱数を代入しかつBlock Jacobi前処理を適用したCGS法およびTFQMR法が最も速く収束することが分かった。

Fast Computation for Electromagnetic Wave Scattering Problem with Many Dielectric Cylinder

NORIMASA NAKASHIMA,[†] SEIJI FUJINO^{††} and MITSUO TATEIBA^{†††}

Solving a large-scale linear system of equations with dense coefficient matrix which arises from electromagnetic wave scattering problem with many dielectric cylinder stands often the most time-consuming part of computation. The larger the size of problem, the more significant the effect will be. It is clear that fast computation of a linear system of equations is of particular interest today. The purpose of this paper is to establish a fast and robust computational method suited to electromagnetic wave scattering problem. The convergence property of BiCG like iterative methods is presented. Our test results show that block Jacobi preconditioned CGS and TFQMR methods with pseudo uniform random numbers as initial shadow residual are the most promise for realizing a high-performance computation.

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は主に理論的立場から解析が行われ、通信・探査技術に応用されてきた。著者の1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た^{15),16)}。しかし、扱える粒子の形状や個数などに制限があり、より高度な理論の提唱やその検証に数値計算が必要不可欠となってきた。

電磁波散乱問題の代表的な数値計算法の1つである境界要素法では、計算の主要部は最終的に密な係数行列を持つ連立1次方程式の計算に帰着される。このよ

うに密な係数行列を持つ問題では、ガウス消去法のような直接解法がこれまで多く利用されてきたが、反復法の方が十分な精度を持つ解を直接解法より短時間で得ることができるため、最近では直接解法より反復法の方が多く用いられるようになってきた。反復法では算法中に行列-ベクトル積の計算が現れる。密行列の場合、その次元数を L とすると、行列-ベクトル積の計算量はオーダー $O(L^2)$ で見積もられる。この計算量は、反復法全体の計算量の中で、行列-ベクトル積と前処理を除いた残りの部分の演算量：オーダー $O(L)$ と比べて圧倒的に多い。

この行列-ベクトル積の計算に対して有効とされる高速多重極アルゴリズム(Fast Multipole Algorithm, 以下FMAと略す)は、元々Poisson方程式の解法としてRokhlinによって1985年に提案された²⁰⁾。その後、 N 体問題や分子動力学をはじめとするいろいろな分野の問題に応用された^{8),13),19),21)}。電磁波散乱問題の分野では、Chewら³⁾のグループによりいくつかの改良アルゴリズムが提案された。そして、これらを用いておもに入射波長に比べて非常に大きい物体によ

[†] 九州大学大学院システム情報科学府
Graduate School of Information Science and Electrical Engineering, Kyushu University

^{††} 九州大学情報基盤センター
Computing and Communications Center, Kyushu University

^{†††} 九州大学大学院システム情報科学研究院
Faculty of Information Science and Electrical Engineering, Kyushu University

る電磁波散乱の大規模数値計算が行われた^{3),9),14)}。著者らは、Greengard^{10),11)}の N 体問題のFMAを、その物理的な観点から電磁波の問題に適用できることを見出し、計算量とメモリ量を大幅に削減できることを実証した^{17),18)}。

一方、反復法は解くべき問題の性質により収束性が大きく異なることが多い。ここでは、BiCG系統の反復法を研究対象の反復法とする。そして、著者らの提案による新しいタイプの反復法⁷⁾や初期Shadow残差ベクトルの与え方を工夫し収束性を改善した反復法⁶⁾を適用する。さらに、解くべき連立1次方程式の係数行列の性質からBlock Jacobi前処理を導出し、その前処理を施した反復法の収束性などを検討する。また、行列-ベクトル積の計算には、Greengard-RokhlinのFMA(以下、GRFMAと略す)を適用し、その効率とメモリ量および精度の観点から検討する。

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、その変動を $e^{j\omega t}$ で表す。

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

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

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

2. 多数の誘電体柱による散乱の数値計算

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)で与えられる電界形積分方程式(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) $\partial E_z/\partial n$ を未知関数とする。そして、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 次の密な小行列から構成されたブロック構造をした行列で次のように表せる。

$$A = \left[\begin{array}{ccc|ccc} A_{11}^{\text{out}} & \cdots & A_{1N}^{\text{out}} & B_{11}^{\text{out}} & \cdots & B_{1N}^{\text{out}} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N1}^{\text{out}} & \cdots & A_{NN}^{\text{out}} & B_{N1}^{\text{out}} & \cdots & B_{NN}^{\text{out}} \\ \hline A_{11}^{\text{in}} & & \mathbf{O} & B_{11}^{\text{in}} & & \mathbf{O} \\ & \ddots & & & \ddots & \\ \mathbf{O} & & A_{NN}^{\text{in}} & \mathbf{O} & & B_{NN}^{\text{in}} \end{array} \right] \quad (3)$$

ここで、小行列 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。 \mathbf{O} は要素が零であることを意味する。ベクトル x, b は各々 M 個の成分を持つ N 個のベクトルから次のように構成される。

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

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

ここで、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。 $\mathbf{0}$ は零ベクトルである。 T は転置を表す。

2.2 行列-ベクトル積の計算

連立1次方程式を反復法で解く場合、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とにあたる。ここで、行列 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、すべての境界要素による影響を考慮している。したがって、計算量はオーダ $O((NM)^2)$ 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、計算量はオーダー $O(NM^2)$ となる。

本研究では、行列の上半分とベクトルとの積の計算に GRFMA 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通常定義どおりの直接計算（以下、直接計算と略す）をする。

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

ここでは、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 10), 13), 17) を参照）。

GRFMA では、セルを用いてすべての境界要素と観測点をグループ化し、以下の 5 つの計算過程を経て目的の波動場を計算する。括弧内の記号は各過程の略号を表す。

- (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

上記の計算過程を経て、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。なお、観測点に対して近傍にある境界要素からの影響は直接計算で評価する。境界要素数および観測点数を L としたとき、GRFMA による波動場計算（行列-ベクトル積）の計算量は $O(L)$ となることが理論的に示されている¹⁰⁾。

2次元散乱問題を扱うとき、上の計算手順は Bessel 関数の加法定理 (Graf の定理¹⁾) を利用して行う。Graf の定理は数学的には無限級数で表現されるが、数値計算では $\pm p$ 項までの和で打ち切る。ここで、 p は打ち切り項数であり波動場計算の精度に影響する。また、M2M、M2L および L2L は展開係数の変換であり、その計算は離散量み込みで表現されるため、計算量は $O(p^2)$ になる。そこで、 p が十分大きいとき高速 Fourier 変換 (FFT) を利用し、計算量を $O(P \log P)$ に減少させる。ただし、 P は M2M および L2L については $P = 2^c > 2p + 1$ 、M2L については $P = 2^c > 4p + 1$ を満足する最小の自然数、 c は自然数とする¹⁸⁾。

GRFMA に起因する誤差は、Graf の定理における無限級数を $\pm p$ 項までの和で打ち切ったことにより生じる。もちろん、打ち切り項数 p が多いほど計算精度は向上するが、全体の計算量およびメモリ量は増大する。本研究では、 p は 1 個の点源による波動場を

GRFMA で実際に使われるセルと個々の計算手順を用いて計算したとき、厳密解に対する相対誤差が ε_{tol} 程度となるように与えるものとする。このとき、 p はセルの大きさ (kl) の関数で表現される。

4. 反復法と前処理

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、本研究で扱う係数行列は式 (3) 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して多くの反復法が提案されてきた。それらは BiCG 系統の反復法と GMRES 系統の反復法の 2 つに大別できる。本研究では、共役転置行列とベクトルの積の計算を含まない BiCG 系統の反復法および TFQMR について性能評価を行う。

BiCG 系統の反復法は、双共役勾配法 (BiCG 法) が元になって研究開発されてきた反復法である。表 1 に収束性のテストに使用した 7 種類の反復法を示す⁵⁾。

表の最後に記した 2 つの解法のパラメータ (m, l) と L は、最初のパラメータ (m, l) は反復過程の各反復ステップでの BiCGStab と GPBiCG の選び方、2 番目のパラメータ L は BiCGStab(L) における外部反復 (BiCG 法) 部分における繰返し回数を各々意味する。これらの反復法は反復 1 回あたり行列-ベクトル積の計算を 2 度行う必要がある。また、これらの反復法では、計算の最初に初期残差ベクトル r_0 の外に初期 Shadow 残差ベクトル r_0^* と呼ばれるものを与える必要がある。通常は、 $r_0^* = r_0$ と便宜的に与えるが、本研究では初期 Shadow 残差ベクトル r_0^* に擬似一様乱数を代入して収束性を調べた。このアイデアは著者らによって提案されたものであるが⁶⁾、その有効性を実際の電磁波散乱問題でも検証する。

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のが一般的である。前処理行列 K には、(a) 連立 1 次方程式の係数行列 A に近いこと、また、(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。本研究で扱う連立 1

表 1 収束性のテストに使用した反復法
Table 1 Iterative methods used for test of convergence.

	反復法	名称
1	CGS ²³⁾	自乗共役勾配法
2	TFQMR ⁴⁾	転置不要擬似最小残差法
3	BiCGStab ²⁴⁾	安定化双共役勾配法
4	GPBiCG ²⁵⁾	一般構型共役勾配法
5	BiCGStab ²¹²⁾	—
6	GPBiCG(m, l) ⁷⁾	—
7	BiCGStab(L) ²²⁾	—

次方程式の係数行列は、式 (3) の形から分かるようにブロック構造をしている．そこで、GRFMA に即した前処理を考える．係数行列 (3) の対角項： $A_{11}^{out} \sim A_{NN}^{out}$ および $B_{11}^{in} \sim B_{NN}^{in}$ に着目し、それらを対角に並べる．次に、各小行列ごとに逆行列を求める．ただし、逆行列の計算は実際にそれを求めるのではなく、LU 分解を経由して効率良く行う．この前処理を Block Jacobi 前処理（以下、BJ 前処理と略す）と呼ぶ²⁾．前処理行列 K は次式で与えられる．

$$K = \left[\begin{array}{cc|cc} A_{11}^{out} & & & \\ & \ddots & & \\ & & & \\ \hline & & A_{NN}^{out} & \\ & & & \\ & & & \\ \hline & & & B_{11}^{in} & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ \hline & & & & B_{NN}^{in} \end{array} \right] \quad (6)$$

対角ブロック A_{ii}^{out} ($i = 1, \dots, N$) は、観測点および積分点と同じ円柱上にあり、この部分の行列-ベクトル積は GRFMA ではなく、直接計算を行うことが多い．また、 B_{ii}^{in} ($i = 1, \dots, N$) は誘電体内部を表しており、この部分の行列-ベクトル積は今回は直接計算を行う．したがって、前処理を行わない場合でも、各ブロックをメモリ領域に記憶するため K の生成は容易である．また、 K^{-1} も対角ブロックで構成されるため、メモリ量の増加も最小限で抑えられる．

5. 数値実験

ここでは、数値計算例として正方形セル内に規則的な格子状に配置された N 個の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 $\epsilon_r^{(i)}$ 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．連立 1 次方程式の次元数： $L = 2NM$ とし、境界分割数 M は 32 と固定する．GRFMA による計算では $\epsilon_{tol} = 10^{-10}$ として打ち切り項数を設定する．演算はすべて倍精度演算で、計算はすべて Compaq Alpha 21264 (クロック 667 MHz) で行った．OS は Digital UNIX v4.0F, 使用言語は C (dec cc v5.9), コンパイルオプションは “-fast” を使用した．メインメモリは 2 GB, 1 次命令・データキャッシュはともに 16 kB, 2 次キャッシュは 4 MB 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 (次元数 $L=576$) から、格子間隔を半分ずつにしながら 129×129 個 (同 $L=1,065,024$) まで増加させ、直接計算および

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直接計算では 9×9 個 (同 $L=5184$) までしか計算できなかった．

図 1 に、直接計算の場合の計算時間 (図中で 3 個の ● 印) と GRFMA の場合の計算時間 (図中で 7 個の △ 印) をプロットした．最小二乗法を用いて計算時間のオーダの評価を行った．その結果、直接計算ではオーダ $O(L^2)$, GRFMA ではオーダ $O(L)$ になることが分かった．

同様に、図 2 に 2 つの場合のメモリ量をプロットした．ここでも、最小二乗法を用いてメモリ量のオーダを評価した．その結果、直接計算の場合はオーダ $O(L^2)$ であった．GRFMA の場合は、次元数が十分多い図の右側の 4 個のデータを用いて漸近的なオーダ評価を行い、オーダ $O(L)$ の評価を得た．以上の結果から、直接計算のオーダ $O(L^2)$ の評価は、GRFMA を使用すると行列-ベクトル積の計算時間およびメモリ量をいずれもオーダ $O(L)$ の評価へと低減させられることが分かった．したがって、より多くの誘電体からの散乱問題を解析する場合、GRFMA を使用する

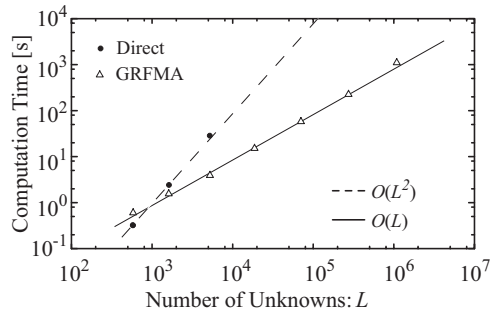


図 1 行列-ベクトル積 1 回に要する計算時間 (単位: 秒)
Fig. 1 CPU time in seconds for single matrix-vector computation.

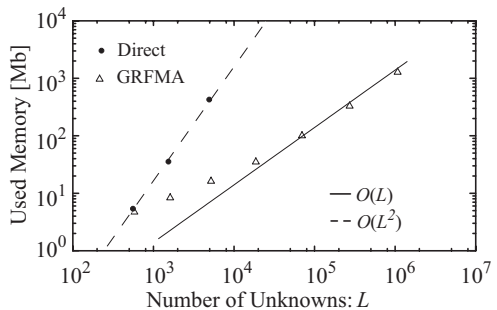


図 2 行列-ベクトル積の計算に必要なメモリ量
Fig. 2 Amount of memory needed for matrix-vector computation.

表 2 GRFMA による行列-ベクトル積の計算の相対誤差
Table 2 Relative error for matrix-vector computation using GRFMA.

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

と計算時間とメモリ量の急激な増加を抑えられる。

次に、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。

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

$A_{\text{GRFMA}}x$ および $A_{\text{直接}}x$ は GRFMA および直接計算による行列-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 $[0, 1]$ の擬似一様乱数 (組み込み関数の `drand48` (seed) 関数を使用した。seed は出発値を表す) で与えた。ここで $\|\cdot\|$ は l_2 ノルムを表す。表 2 に GRFMA による行列-ベクトル積の相対誤差を $\varepsilon_r = 2.0$ と 32.0 の場合について各々示す。 N が 9×9 よりも多いときはメモリ上の制限から直接計算ができなかったため比較できた場合のみを示す。表から分かるように、GRFMA による行列-ベクトル積計算の相対誤差は、前述の打ち切り項数の設定において導入した 1 個の点源による波動場計算の相対誤差 $\varepsilon_{\text{tol}} = 10^{-10}$ より十分小さいので、行列-ベクトル積の計算を GRFMA で行うのは妥当だと判断した。

5.2 反復法の性能評価

ここでは、 9×9 個の誘電体円柱を解析モデルとし、 ε_r を 2.0 から 64.0 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 5,000 回で、反復過程で相対残差ノルムが 10^6 を超えたときは発散と見なし反復計算を中断させた。解ベクトルの初期値 x_0 はすべて零とした。初期 Shadow 残差ベクトル r_0^* は、 $r_0^* = r_0 (= b - Ax_0)$ の場合と実部、虚部ともに区間 $[0, 1]$ の擬似一様乱数を代入した場合の 2 通り、前処理については、前処理なしの場合と BJ 前処理をした場合の 2 通り、合計 4 通りの組合せで計算を行った。

表 3 に、反復 1 回あたりの GRFMA による行列-ベクトル積の計算時間 (単位: 秒) とその割合 (単位: %) を示す。ここには、反復法における行列-ベクトル積と前処理を除いた部分の演算量が最も少ない CGS 法と逆に最も多い BiCGStab(16) 法の結果を示す。これ以外の反復法の結果はこれら 2 つの解法の結果の

表 3 反復 1 回あたりの GRFMA による行列-ベクトル積の計算時間とその割合 (上段: 時間 (単位: 秒), 下段: 比率 (%))
Table 3 CPU time and ratios for matrix-vector by GRFMA per one iteration (Upper: CPU time in seconds, Lower: ratios (%)).

反復法	前処理	GRFMA	その他	合計
CGS	なし	7.767 s	0.006 s	7.773 s
		99.923	0.077	100
BJ		7.771 s	0.010 s	7.781 s
		99.871	0.129	100
BiCGStab(16)	なし	7.766 s	0.014 s	7.780 s
		99.820	0.130	100
BJ		7.757 s	0.027 s	7.784 s
		99.646	0.354	100

ちょうど中間の数字であった。表の中の“その他”とは、反復法の係数行列と下半分とベクトルの積 (直接計算部分)、前処理行列とベクトルの積 (直接計算) および算法中の内積やベクトルの加算や乗算部分などの計算に要した時間の合計を意味する。時間の計測には `getrusage` 関数を使用し、反復を 1,000 回繰り返して平均値をとる試行を数度行った。表の数字はその平均の値である。

この結果から、反復 1 回あたりの GRFMA による行列-ベクトル積の計算の占める比率が非常に高いことが分かる。したがって、(i) GRFMA による計算量 $O(L)$ の比例定数は大きいこと、(ii) 基礎となる反復法の計算量が多少多くなっても収束までの反復回数が少ない解法が望ましいこと、同様に、(iii) 前処理についてもその計算量が多くても収束を確実に加速する方法が望ましいこと、などが分かった。

表 4 から表 7 に各反復法の収束までの反復回数を示す。パラメータ ε_r ごとにテストした反復法の中で最も計算時間が少なかったものはその反復回数を太字で表す。計算時間については、表 3 に示した結果から分かったように、GRFMA の計算部分が圧倒的に大きいため、各反復法の 1 反復あたりの計算時間はほとんど同じだった。そのため反復回数の優劣がそのまま計算時間の優劣と見なせる。そこで、以下では紙面の制約から計算時間は割愛し、収束までの反復回数で各反復法の収束性を評価する。なお、表の中で GPBiCG(m, l) および BiCGStab(L) において同じ解法が続くときはそのパラメータの数字だけを括弧つきで表示した。たとえば、第 1 欄の (1,3) とは GPBiCG(1,3) を、(4) とは BiCGStab(4) を意味する。また、表中の“×”印は相対残差ノルムの発散、“-”印は残差の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 4 および表 5 は $r_0^* = r_0$ としたときの結果である。BiCGStab(16) や BiCGStab(8) が非常に速く収

束した．BJ 前処理を施すと，収束までの反復回数が減少したり，CGS や TFQMR の場合のように発散していたものが収束するようになったりするなど，収束が改善される場合が増えた．しかし， $\varepsilon_r = 2.0$ のとき反復回数が増える反復法が多くなり， $\varepsilon_r = 8.0$ や 64.0 のときは残差ノルムが停滞した．以上のことから，BJ 前処理についてはまだ工夫の余地があることが分かった．

表 4 各反復法の収束までの反復回数と最少時間の反復回数 (太字) ($\mathbf{r}_0^* = \mathbf{r}_0$, 前処理なし)

Table 4 Iterations and that with minimum computation time for convergence ($\mathbf{r}_0^* = \mathbf{r}_0$, non-preconditioning).

解法	パラメータ ε_r					
	2.0	4.0	8.0	16.0	32.0	64.0
CGS	×	×	×	×	×	×
TFQMR	×	×	×	×	×	×
BiCGStab	1413	2930	-	-	2313	-
GPBiCG	487	903	1315	1266	688	1526
BiCGStab2	544	888	1819	1031	627	2534
GPBiCG(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
GPBiCG(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
BiCGStab(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 5 各反復法の収束までの反復回数と最少時間の反復回数 (太字) ($\mathbf{r}_0^* = \mathbf{r}_0$, BJ 前処理)

Table 5 Iterations and that with minimum computation time for convergence ($\mathbf{r}_0^* = \mathbf{r}_0$, BJ preconditioning).

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
BiCGStab	971	446	-	673	190	-
GPBiCG	518	232	-	291	101	1449
BiCGStab2	724	244	-	306	111	-
GPBiCG(1,2)	560	263	-	338	111	-
(1,3)	556	223	-	269	114	-
(1,4)	586	230	-	333	113	-
(1,5)	601	247	-	365	110	-
GPBiCG(2,1)	626	257	-	327	127	-
(3,1)	600	266	-	410	120	-
(4,1)	726	280	-	435	139	-
(5,1)	786	320	-	444	140	-
BiCGStab(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 6 および表 7 は \mathbf{r}_0^* は擬似一様乱数を代入したときの結果である．従来よく用いられてきた $\mathbf{r}_0^* = \mathbf{r}_0$ という初期 Shadow 残差ベクトルの与え方ではほとんど収束しなかった CGS, TFQMR が，この場合は逆に最も速く収束に成功した．これは擬似一様乱数が固有ベクトル成分を多く持つため収束性が堅固になったためと思われる⁶⁾．一方，これ以外の反復法については， $\mathbf{r}_0^* = \mathbf{r}_0$ の結果と比べてパラメータごとに収束性

表 6 各反復法の収束までの反復回数と最少時間の反復回数 (太字) ($\mathbf{r}_0^* =$ 擬似一様乱数, 前処理なし)

Table 6 Iterations and that with minimum computation time for convergence ($\mathbf{r}_0^* =$ random, non-preconditioning).

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
BiCGStab	1331	2670	3506	-	2952	-
GPBiCG	645	1008	1547	1445	1108	2425
BiCGStab2	468	758	1032	999	669	1269
GPBiCG(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
GPBiCG(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
BiCGStab(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 7 各反復法の収束までの反復回数と最少時間の反復回数 (太字) ($\mathbf{r}_0^* =$ 擬似一様乱数, BJ 前処理)

Table 7 Iterations and that with minimum computation time for convergence ($\mathbf{r}_0^* =$ random, BJ preconditioning).

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
BiCGStab	872	380	-	620	155	-
GPBiCG	606	236	-	309	105	-
BiCGStab2	674	260	-	285	115	-
GPBiCG(1,2)	605	237	-	254	116	-
(1,3)	620	233	-	311	119	-
(1,4)	612	217	-	305	112	-
(1,5)	633	225	-	326	114	-
GPBiCG(2,1)	735	242	-	355	114	-
(3,1)	786	266	-	397	130	-
(4,1)	849	300	-	422	130	-
(5,1)	858	276	-	396	126	-
BiCGStab(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

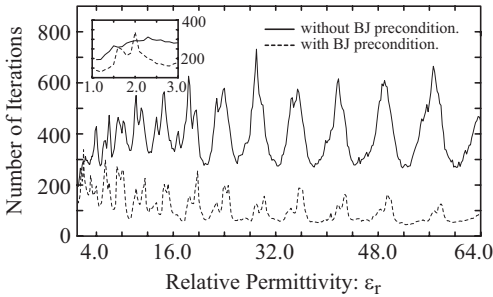


図3 ϵ_r ごとの反復回数の変化 (CGS, $r_0^* =$ 擬似一様乱数のとき)

Fig. 3 Fluctuation of iterations for ϵ_r (CGS, $r_0^* = \text{random}$).

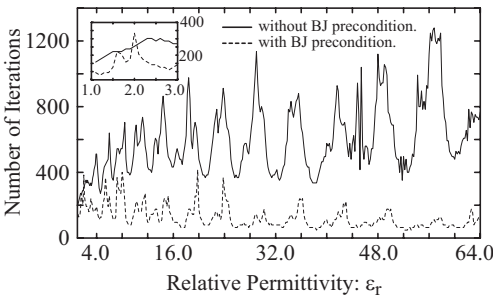


図4 ϵ_r ごとの反復回数の変化 (BiCGStab(16), $r_0^* = r_0$ のとき)

Fig. 4 Fluctuation of iterations for ϵ_r (BiCGStab(16), $r_0^* = r_0$).

が向上した場合とそうでない場合が混在する結果が得られた。また、出発値の異なる擬似一様乱数の反復回数への影響を調べるために、CGS法で $\epsilon_r = 32.0$ に対して出発値を変えて 40 回実験をした。その結果、平均反復回数は前処理なしで 287.7 回、BJ 前処理で同 64.95 回であった。したがって、擬似一様乱数の出発値の違いによる反復回数への影響は小さいと思われる。

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傾向を示したが、CGS と TFQMR ではごく少数の例外(たとえば $\epsilon_r = 2.0$ のとき)を除いて反復回数が減少した。また、表 3 の“その他”の欄に示した数字の中には BJ 前処理にかかる時間も含まれており、BJ 前処理による計算時間の増加の割合はきわめて小さいことが分かる。以上のことから、初期 Shadow 残差ベクトル r_0^* に擬似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きわめて有用な方法であると判断できる。

図 3 および図 4 に比誘電率 ϵ_r に対する反復回数の変化を示す。 ϵ_r の値は理論的下限值である 1.0 から 64.0

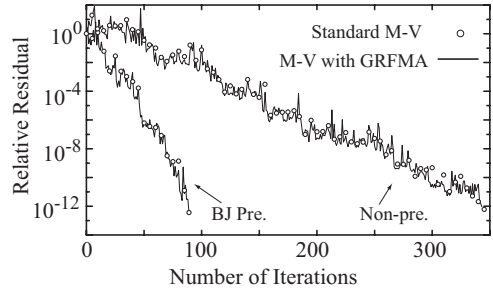


図5 CGS における収束の履歴 ($\epsilon_r = 16$)

Fig. 5 Convergence history of CGS method with $\epsilon_r = 16$.

まで 0.2 刻みで調べた。ただし、高い収束性を示した CGS ($r_0^* =$ 擬似一様乱数のとき) と BiCGStab(16) ($r_0^* = r_0$ のとき) の 2 種類の反復法のみ結果を示す。図中で前処理がない場合を実線で、前処理付きの場合を点線で表示した。また、 $1 \leq \epsilon_r \leq 3$ のときの反復回数の変化の様子の拡大図を図の左上部に各々示す。 ϵ_r が大きいほど BJ 前処理による反復回数の減少の割合が大きくなることが分かる。また、少数の例外であるが、 $\epsilon_r = 1.6$ と 2.0 のとき BJ 前処理の効果が得られなかったことも拡大図から分かる。

さらに、 $\epsilon_r = 16$ のときの CGS ($r_0^* =$ 擬似一様乱数のとき) の収束の履歴を図 5 に示す。図において、 \circ 印は直接計算による行列-ベクトル積 (“Standard M-V”) を、実線は GRFMA による行列-ベクトル積 (“M-V with GRFMA”) を行ったときの相対残差ノルムを各々表す。ただし、 \circ 印は反復 5 回おきに表示した。この結果から、2 つの計算方法の違いによる残差ノルムの差異は小さく、反復法の収束性に大きな影響を及ぼしていないことが分かる。

以上の結果が示すように、電磁波散乱の問題では、比誘電率 ϵ_r の大きさによらず、 r_0^* に擬似一様乱数を代入しかつ BJ 前処理をすれば、もっと多数の誘電体円柱が存在する大規模散乱問題でも、CGS と TFQMR が有効であると思われる。

5.3 反復法で得られた近似解の精度の検証

CGS ($r_0^* =$ 擬似一様乱数のとき) で得られた近似解の真の解に対する相対誤差および絶対誤差を表 8 に示す。ここで、相対誤差および絶対誤差は次の式で評価した。行列-ベクトル積の計算に、GRFMA を適用したときの解ベクトルを x_{FMA} および直接計算を行ったときの解ベクトルを $x_{\text{直接}}$ で各々表す。表から相対、絶対誤差とも十分な精度が得られたことが分かる。

$$\text{相対誤差} = \frac{\|x_{\text{直接}} - x_{\text{FMA}}\|_2}{\|x_{\text{直接}}\|_2}, \quad (8)$$

$$\text{絶対誤差} = \|x_{\text{直接}} - x_{\text{FMA}}\|_2. \quad (9)$$

表 8 GRFMA で行列-ベクトル積を求めた CGS 法の近似解の真の解に対する相対誤差および絶対誤差

Table 8 Relative and absolute errors of approximate solutions of CGS using GRFMA for matrix-vector.

ε_r	前処理なし		BJ 前処理	
	相対誤差	絶対誤差	相対誤差	絶対誤差
2.0	6.98e-12	4.75e-10	1.71e-11	1.16e-09
4.0	9.37e-12	6.99e-10	9.36e-12	6.98e-10
8.0	1.58e-11	6.60e-10	1.58e-11	6.60e-10
16.0	1.29e-11	5.51e-10	1.29e-11	5.50e-10
32.0	1.41e-11	6.39e-10	1.41e-11	6.35e-10
64.0	1.53e-11	6.24e-10	1.55e-11	6.50e-10

6. おわりに

多数の誘電体円柱による電磁波散乱問題を考え、境界要素法を用いて数値計算を行った。連立 1 次方程式の求解を 7 種類の反復法で行い、前処理の効果、収束性、計算時間そして得られた近似解の精度を検証した。テストした反復法の中では、初期 Shadow 残差ベクトル r_0^* に擬似一様乱数を代入しかつ BJ 前処理付きの CGS と TFQMR が比誘電率 ε_r を変動させても非常に速く収束することが分かった。また、BiCGStab(8) や BiCGStab(16) も高い収束性を示した。また、反復法の中の行列-ベクトル積の計算に GRFMA を適用し、GRFMA が高速でかつ精度も保持した優れた計算法であることも検証した。今後は、GMRES 系統の反復法や他の前処理法についても研究する予定である。

なお、図 3 と図 4 において観察された反復回数の鋸状の周期的な変動が起こる理由は誘電体内部の ε_r による伝搬距離の変化と電磁波の周期性に関連があると思われるが現在解析中である。今後の課題としたい。

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) Abramowitz, M. and Stegun, I.A.: *Handbook of Mathematical Functions*, Dover (1972).
- 2) Barrett, R., et al.: *Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods*, SIAM (1994).
- 3) Chew, W.C., et al.: *Fast and Efficient Algorithms in Computational Electromagnetics*, Artech House (2001).
- 4) 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).
- 5) 藤野清次, 張 紹良: 反復法の数理, 朝倉書店 (1996).

- 6) 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).
- 7) Fujino, S.: GPBiCG(m, l): A Hybrid of BiCGSTAB and GPBiCG methods with efficiency and robustness, *Applied Numerical Mathematics*, Vol.41, pp.107-117 (2002).
- 8) 福井卓雄, 服部純一, 土居野優: 高速多重極法の境界要素解析への応用, 構造工学論文集, Vol.43A, pp.373-382 (1997).
- 9) Geng, N., Sullivan, A. and Carin, L.: Fast Multipole Method for Scattering from 3-D PEC Targets Situated in a Half-space Environment, *Microwave Opt. Tech. Lett.*, Vol.21, No.6, pp.399-405 (1999).
- 10) Greengard, L. and Rokhlin, V.: A Fast Algorithm for Particle Simulations, *J. Comput. Phys.*, Vol.73, pp.325-348 (1987).
- 11) Greengard, L.: *The Rapid Evaluation of Potential Fields in Particle Systems*, MIT Press (1988).
- 12) Gutknecht, M.H.: Variants of BiCGSTAB for Matrix with Complex Spectrum, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol.14, pp.1020-1033 (1993).
- 13) 小林昭一(編著): 波動解析と境界要素法, 京都大学出版局 (2000).
- 14) Jun, H. and Zaiping, N.: Solving Electromagnetic Scattering from Two-dimensional Cavity by FMM with complexifying k-technique, *Microwave Opt. Tech. Lett.*, Vol.20, No.6, pp.430-433 (1999).
- 15) Tateiba, M.: A New Approach to the Problem of Wave Scattering by Many Particles, *Radio Science*, Vol.22, No.6, pp.881-884 (1987).
- 16) Tateiba, M.: Electromagnetic Wave Scattering in Media Whose Particles are Randomly Displaced from a Uniformly Ordered Spatial Distribution, *IEICE Trans. Electron.*, Vol.E78-C, No.10 (1995).
- 17) 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).
- 18) 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).
- 19) 西田徹志, 速水 謙: 高速多重極展開法による 3 次元境界要素法の高速度化, 計算工学論文集, Vol.1, pp.315-318 (1996).
- 20) Rokhlin, V.: Rapid Solution of Integral Equations of Classical Potential Theory, *J. Comput. Phys.*, Vol.60, pp.187-207 (1985).
- 21) Rokhlin, V.: Rapid Solution of Integral Equations of Scattering Theory in Two Dimensions,

- J. Comput. Phys.*, Vol.86, pp.414-439 (1990).
- 22) Sleijpen, G.L. and Fokkema, D.R.: BICGSTAB (L) for Linear Equations Involving Unsymmetric Matrices with Complex Spectrum, *Elect. Trans. Numer. Anal.*, Vol.1, pp.11-32 (1993).
- 23) Sonneveld, P.: CGS: A Fast Lanczos-type Solver for Nonsymmetric Linear Systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol.10, pp.36-52 (1989).
- 24) van der Vorst, H.A.: Bi-CGSTAB: A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol.13, pp.631-644 (1992).
- 25) Zhang, S.-L.: GPBi-CG: Generalized Product-type Methods Based on Bi-CG for Solving Nonsymmetric Linear Systems, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol.18, pp.537-551 (1997).

(平成 14 年 9 月 18 日受付)

(平成 15 年 1 月 14 日採録)



中嶋 徳正

1976 年生。1999 年九州大学工学部情報工学科卒業。2001 年九州大学大学院システム情報科学研究科修士課程修了。現在同大学院博士後期課程在籍。計算電磁気学に興味を持つ。

電子情報通信学会，日本計算工学会，米国電気電子学会会員。



藤野 清次 (正会員)

1950 年生。1974 年京都大学理学部卒業。1993 年博士 (工学, 東京大学)。1994 年広島市立大学情報科学部教授。2001 年九州大学情報基盤センター研究部教授。現在に至る。その間共役勾配法システムの反復法とその前処理の研究を行う。著書: 「反復法の数理」(共著), 朝倉書店。日本応用数理学会会員。



立居場光生

1944 年生。1967 年九州大学工学部電子工学科卒業。1977 年工学博士 (九州大学)。1990 年九州大学工学部教授, 1996 年九州大学大学院システム科学研究科教授を経て, 2000 年同大学院システム情報科学研究科教授。現在に至る。その間 1994 年 Washington 大学客員教授。電磁波理論とその応用に関する研究と教育に従事。著書: “PIER13: Electromagnetic Theory and Network Methods” (EMW Pub., Cambridge, Massachusetts, USA, 1996) 等。電子情報通信学会, 米国電気電子学会, 英国物理学会等会員。1998 年度電子情報通信学会九州支部長。2000 年~2001 年度電子情報通信学会電磁界理論研究専門委員長。