円外帰着波動問題基本解近似解法への多倍長数値計算の適用 Application of Multiple Precision Computing to an FSM Approximation Method

for Reduced Wave Problems in a Domain Exterior to a Disc

千葉 文浩* 牛島 照夫*

* 電気通信大学 電気通信学部 情報工学科 計算科学講座

Chiba, Fumihiro* Ushijima, Teruo*

* Computational Science Group, Department of Computer Science, Faculty of Electro-Communications, The University of Electro-Communications

Abstract

Katsurada and Okamoto[3] studied the mathematical analysis of the charge simulation method applied to the Dirichlet boundary value problem of Laplace equation in a disc. We show the extension of this method to semi analytic approximate method (Fundamental Solution Method, **FSM**) for the reduced wave problems in a domain exterior to a disc with Dirichlet or Neumann boundary condition. The corresponding numerical tasks are not necessarily well conditioned. We show that the discrete Fourier transform technique with multiple precision arithmetic is effective for certain cases of the problems obtained by FSM.

1. はじめに

円内ラブラス方程式のディリクレ境界値問 題を代用電荷法によって近似する場合の数学 解析は電荷点拘束点・等間隔・同相配置の場 合に桂田-岡本[3]によって行われた。われわ れは、ディリクレ型またはノイマン型の円外 帰着波動問題にこの近似法を拡張した半解析 的近似解法 (Fundamental Solution Method, FSM) とそれを用いた数値計算について述べ る.この場合、悪条件の下で問題を解くことに なるが、多倍長計算と離散フーリエ変換を組み 合わせた計算法が有効であることが分かった。 以下では、これまでの数値実験の結果、今 回の数値実験の目的,問題設定,それに適用 される近似解法,その数値計算法,今回の計 算結果と今後の課題について述べる.

これまでの数値実験の結果 と今回の実験の目的

2.1 これまでの数値実験の結果

以前の報告 [8] では、ディリクレ問題を単色 波データ (cos 16 θ),平面波データ ($e^{i\kappa\cos\theta}$)の 場合に正規化波数 κ = 1, 10, 100, 1000 のそれ ぞれにつき、半径比 γ = 0.1(0.2)0.9 の場合を 選点数 $N = 2, 4, \dots, 2^{10} = 1024$ として数値計算 した結果につきのべた. (κ, γ については節3. を参照)この時拘束条件に対応する Gq = fの 解法には消去法を用いFORTRANによる四倍 精度計算を実施した. この結果を粗くまとめ ると,次の様になる.「(1) $\kappa = 1,10$ の低周波 問題においては,理論的に得られる事前誤差 評価[8]に整合する良好な収束状況を数値的に 確認することが出来る.」「(2) $\kappa = 100,1000$ の高周波問題においては. 低周波のときのよ うな良好な収束状況を観測することは出来な かった.特に $\kappa = 1000$ における平面波問題の 場合は、 $\gamma = 0.1(0.2)0.9$ の5ケースの全てに わたって収束状況が見られなかった.」

2.2 今回の数値実験の目的

この結果を踏まえて我々は次のような観点 で考えた.「 $(a) \kappa = 100$ で良好な収束状況を 観測するためにはどのような数値計算をした ら良いか」,「 $(b) \kappa = 1000$ で収束しないのは 何故か.収束状況を観測するためにはどのよ うにしたら良いか.」この二つを当面の課題と して数値計算による追究を実施した.我々の 用いた戦略を述べると,「1.計算精度の向上, 2.計算法の変更, 3. 選点数の増加」となる.

3. 円外帰着波動問題の設定

3.1 定義域と記号の設定

原点を中心とし半径を*a*とする円 (境界)を Γ_a ,円の外部領域を Ω_e とする.複素数 $r \cdot e^{i\theta}$ に対応する平面上の点を $r = r(\theta)$ とする.境 界上の点 (選点)を $a = a(\theta) = a \cdot e^{i\theta}$ とし, 円内の点 (波原点)を $\rho = \rho(\theta) = \rho \cdot e^{i\theta}$ とす る. Γ_a 上の内向き法線方向ベクトルを*n*とす る.波数ベクトルを(l,m)とし,その長さを $k = \sqrt{l^2 + m^2}$ と定める.これら,記号の関係 は図 Fig.1.の (1)で表される.

後で述べる解の解析表示では、 ディリクレ問



Fig.1. (1) The domain (Ω_e) exterior to the disc and other symbols (The figure on the left). (2) The equi-distant equally phased arrangement of source points $(\rho(\theta) = \rho \cdot e^{i\theta})$ and collocation points $(a(\theta) = a \cdot e^{i\theta})$ (The figure on the right).

題, ノイマン問題, それぞれの離散近似公式に おいて以下の正規化されたパラメータ γ,δ,κ を用いている.

$$\gamma = \frac{\rho}{a}, \quad \delta = \frac{r}{a}, \quad \kappa = ka.$$

 γ (半径比) は波原点の位置、 δ は Ω_e の点の原 点からの距離、 κ (正規化波数) は波数に対応 する、後に述べる数値実験では $\delta = 1$ と固定 し、 κ, γ を実験パラメータとして用いる。

3.2 問題設定

以下の円外帰着波動方程式のディリクレ型 境界値問題 (E_f)を扱う.円周上で境界データ fが与えられるとする.ここで第3式はゾン マフェルドの外向き放射境界条件である.

$$(\mathbf{E}_f) \begin{cases} -\Delta u - k^2 u = 0 \quad \text{in } \Omega_e, \\ u = f \quad \text{on } \Gamma_a, \\ \lim_{r \to \infty} \sqrt{r} \left\{ \frac{\partial u}{\partial r} - iku \right\} = 0. \end{cases}$$

同様にして,以下の円外帰着波動方程式の ノイマン型境界値問題(F_v)を扱う.円周上で

$$(\mathbf{F}_{\psi}) \begin{cases} -\Delta u - k^2 u = 0 \quad \text{in } \Omega_e, \\ \frac{\partial u}{\partial n} = \psi \quad \text{on } \Gamma_a, \\ \lim_{r \to \infty} \sqrt{r} \left\{ \frac{\partial u}{\partial r} - iku \right\} = 0. \end{cases}$$

3.3 厳密解

変数分離法により問題 $(E_f) \ge (F_{\psi})$ の厳密 解を無限級数表示で求めることができる.こ れで解析学の世界では、問題 $(E_f) \ge (F_{\psi})$ は 完全に解かれたことになる、しかし、これら の表現式から関数の数値を求めることは、高 次ハンケル関数の計算やそれを各項の因子 して含む級数の打ち切り判定などの手続きに より、容易ではない、そこで、節4.では厳密 解を用いる方法にかわる方法を提案する.

基本解近似解法による近似 問題

4.1 波源点選点等間隔同相配置,基 底関数

ここでは、基本解近似解法による問題の定 式化を述べる、解法で用いられる波原点 $\rho_j = \rho(\theta_j)$,選点 $a_j = a(\theta_j)$ は下の式および Fig.1. の (2) のようにして等間隔同相に配置される、 ここで N は選点の数である、

 $\begin{aligned} \theta_j &= j \cdot 2\pi/N, \quad \boldsymbol{\rho}_j = \rho \cdot e^{i\theta_j}, \quad \boldsymbol{a}_j = a \cdot e^{i\theta_j}, \\ 0 &\leq j \leq N-1. \end{aligned}$

また、これから用いる基底関数 $G_j(\mathbf{r})$ は以下 のように表される.以降では、 $H_n^{(1)}(z)$ は第1

種のn次ハンケル関数である.

$$\begin{split} G_j(\boldsymbol{r}) &= H_0^{(1)}(k|re^{i\theta} - \rho e^{i\theta_j}|), \\ \boldsymbol{r} &= \boldsymbol{r}(\theta) = r \cdot e^{i\theta}, \quad 0 \leq j \leq N-1. \end{split}$$

4.2 基本解近似解法

ディリクレ問題での場合は, (E_f) の近似問題 $(E_f^{(N)})$ は以下のように表される.

$$(\mathbf{E}_{f}^{(N)}) \begin{cases} u^{(N)}(\boldsymbol{r}) = \sum_{j=0}^{N-1} q_{j} G_{j}(\boldsymbol{r}), \\ u^{(N)}(\boldsymbol{a}_{j}) = f(\boldsymbol{a}_{j}), \\ 0 \leq j \leq N-1. \end{cases}$$

ノイマン問題の場合は以下の (F_{ψ}) の近似問題 $(F_{\psi}^{(N)})$ で表される.

$$(\mathbf{F}_{\psi}^{(\mathbf{N})}) \begin{cases} u^{(N)}(\boldsymbol{r}) = \sum_{j=0}^{N-1} q_j G_j(\boldsymbol{r}), \\ \left(\frac{\partial}{\partial n} u^{(N)}\right)(\boldsymbol{a}_j) = \psi(\boldsymbol{a}_j), \\ 0 \le j \le N-1. \end{cases}$$

これらの方法は、N 個の複素定数 q_{j} ,0 $\leq i \leq N - 1$ を選点での拘束条件から定めよう とするものである.これらの一意可解性につ いては、ディリクレ問題については[7]におい て、ノイマン問題については[6] で述べた.

5. 離散フーリエ変換による解 析表示

基本解近似解法のディリクレ問題 ($E_f^{(N)}$),ノ イマン問題 ($F_{\psi}^{(N)}$)の式において、それぞれ第 1式の解の畳み込み積表示の式を第2式の拘 束条件の式に代入すると、 $q = (q_j)_{0 \le j \le N-1}$ に 関する連立1次方程式になる、それぞれの係 数行列は複素対称巡回行列になるので、基本 解近似解法を離散フーリエ変換を使って表現 することができる.そこで,離散フーリエ変 換の計算に高速なアルゴリズムが適用可能に なる.解析表示を導く手順についてはここで は述べない.

ディリクレ問題の場合は以下のようになる.

$$(\mathbf{E}_{f}^{(N)}) \begin{cases} G_{n}^{(N)} = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} g(\theta_{j}) \, \omega^{-nj}, \\ F_{n}^{(N)} = \frac{1}{NG_{n}^{(N)}} \sum_{j=0}^{N-1} f(\boldsymbol{a}_{j}) \, \omega^{-nj}, \\ U_{n}^{(N)}(\boldsymbol{r}(\theta)) \\ = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} g(\theta - \theta_{j}, \delta : \kappa, \gamma) \omega^{jn}, \\ u^{(N)}(\boldsymbol{r}(\theta)) = \sum_{n=0}^{N-1} F_{n}^{(N)} U_{n}^{(N)}(\boldsymbol{r}(\theta)). \end{cases}$$

ここで

$$g(\theta, \delta : \kappa, \gamma) = H_0^{(1)}(\kappa | \delta - \gamma e^{-i\theta} |)$$

$$g(\theta) = H_0^{(1)}(\kappa | 1 - \gamma e^{-i\theta} |).$$

ノイマン問題の場合は以下のようになる.

$$(\mathbf{F}_{\psi}^{(N)}) \begin{cases} H_{n}^{(N)} = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} h(\theta_{j}) \, \omega^{-nj}, \\ \Psi_{n}^{(N)} = \frac{1}{kNH_{n}^{(N)}} \sum_{j=0}^{N-1} \psi(\boldsymbol{a}_{j}) \, \omega^{-nj}, \\ V_{n}^{(N)}(\boldsymbol{r}(\theta)) \\ = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} g(\theta - \theta_{j}, \delta : \kappa, \gamma) \omega^{jn}, \\ u^{(N)}(\boldsymbol{r}(\theta)) = \sum_{n=0}^{N-1} \Psi_{n}^{(N)} V_{n}^{(N)}(\boldsymbol{r}(\theta)). \end{cases}$$

ここで

$$g(\theta, \delta: \kappa, \gamma) = H_0^{(1)}(\kappa | \delta - \gamma e^{-i\theta} |),$$

$$h(\theta) = \frac{1 - \gamma \cos \theta}{|1 - \gamma e^{-i\theta}|} \cdot H_1^{(1)}(\kappa | 1 - \gamma e^{-i\theta} |).$$

6. 数値実験

境界データを与えて、境界上で解の近似値 を計算し、その誤差を測定した、境界データ 毎に κ (正規化波数)、 γ (半径比)、N(選点数) を変えて計算した、また、多倍長演算で計算 桁数を変えて計算を行った、

6.1 実験パラメータ

Dirichlet $\vec{\tau} - \beta \ge \mathbf{l} \subset f = \cos 16\theta \pm \hbar t \mathbf{i}$ $f = e^{i\kappa\cos\theta} \underbrace{\mathbf{k}} \ge \mathbf{c} \times \mathbf{k}$. Neumann $\vec{\tau} - \beta \ge \mathbf{l} \subset \mathbf{k}$ $\frac{1}{k}\psi = \lambda_{16}\cos 16\theta \pm \hbar t \mathbf{i} \frac{1}{k}\psi = i\cos\theta e^{i\kappa\cos\theta} \underbrace{\mathbf{k}}$ $\ge \mathbf{c} \times \mathbf{k}$. $\Xi \subset \mathbf{v} \lambda_{16} = -(\frac{d}{dz}H_{16}^{(1)})(\kappa)/H_{16}^{(1)}(\kappa)$ $\mathbf{v} = \mathbf{k}$.

以下, $f = \cos 16\theta$ または $\frac{1}{k}\psi = \lambda_{16}\cos 16\theta$ のケースを単色波データと呼び, $f = e^{i\kappa\cos\theta}$ と $\frac{1}{k}\psi = i\cos\theta e^{i\kappa\cos\theta}$ のケースを平面波デー タと呼ぶことにする.

パラメータ κ (正規化波数), γ (半径比), δ (誤 差評価点) については, $\kappa = 1, 10, 100, 1000,$ $\gamma = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9, \delta = 1(境界上) とし$ $た. 選点の数 Nは2 <math>\leq N \leq 1024$ もしくは2 $\leq N \leq 8192$ (2のべき)とした. 誤差評価点の数 NNはN ≤ 1024 の時, NN = 2048, 2048 $\leq N \leq 8192$ の時, NN = 16384(2のべき)とし た. 計算桁数は 30, 100, 200, 400, 800, 1600 と した.

なお,2048 ≤ N ≤ 8192 の場合は計算時間 が非常に掛かるため,30 桁と100 桁のみで計 算した.

6.2 誤差評価

各境界データについて κ, γ, N を変えて,以下の式を使って誤差を測定した.境界上の点は以下の式を用いて与えた.ここでNNは2048($N \leq 1024$ の時)または16384(2048 $\leq N \leq 8192$ の時)とした.

$$\begin{aligned} \theta_1^{(NN)} &= 2\pi/NN, \quad \theta_j^{(NN)} = j\theta_1^{(NN)}, \\ \boldsymbol{a}(\theta_j^{(NN)}) &= a \cdot e^{i\theta_j^{(NN)}}, \quad 0 \leq j \leq NN-1. \end{aligned}$$

真の解の数値が容易に計算できる時は以下の 式を誤差の評価に用いた.

 $E^{(N)} =$

$$\max_{0 \le j \le NN-1} \left| u(\boldsymbol{a}(\theta_j^{(NN)})) - u^{(N)}(\boldsymbol{a}(\theta_j^{(NN)})) \right| \quad (6.1)$$

真の解の数値が容易に計算できない時は以下 の式で数値解の挙動を調べた.今回はノイマン 問題で平面波データの場合でこの式を用いた. $\tilde{E}^{(N)} =$

 $\max_{0 \le j \le NN-1} \left| u^{(2N)}(\boldsymbol{a}(\theta_j^{(NN)})) - u^{(N)}(\boldsymbol{a}(\theta_j^{(NN)})) \right|^{(6.2)}$

6.3 実験環境

使用したマシンの CPU は Alpha 21164/ 533MHz, L2キャッシュは 2MB, メモリーは 512MB である. OS は Linux-2.4, コンパイラ は gcc-2.95 を用いた.

ソフトウェアは、C言語の多倍長計算ライブ ラリーとして MPFR[4] を用いた. MPFR は 多倍長数計算ライブラリー GMP[2] に多倍長 実数計算に便利な機能を追加するもので,現 在は GMP パッケージのオプションでもある.

ハンケル関数計算ルーチンは大浦拓哉氏[5] 作成のプログラムをの参考に作成した.多倍 長版・高速フーリエ変換のプログラムについ てはFFTの教科書[1]のコードを参考にして 作成した.

計算時間は、境界条件1通り、 $\kappa e 4 通 り$ 、 $\gamma e 5 通 り$ 、N e 10 通 り の計 200 ケース e 計算した場合、各桁数で、以下の表のようになる、

| 100桁 | 200桁 | 400桁 | 800桁 | 1600桁 |
|------|------|------|-------|-------|
| 260分 | 320分 | 900分 | 2500分 | 7800分 |

6.4 グラフの見方

Fig.3. はディリクレデータが $f = \cos 16\theta$ (単 色波データ)の場合, Fig.4. はディリクレデー タが $f = e^{i\kappa\cos\theta}$ (平面波データ)の場合に対応 する. Fig.3. と Fig.4. のグラフの列は左から 30 桁, 200 桁, 800 桁計算に対応する.

Fig.5. は左の列がディリクレデータが $f = e^{in\cos\theta}$ (平面波データ)の場合に、右の列がノイ マンデータが $\frac{1}{k}\psi = i\cos\theta e^{in\cos\theta}$ (平面波デー タ)の場合に対応する、ともに "2 $\leq N \leq$ 8192"の場合に対応する、

各列の上から順に, κ=1, 10, 100, 1000 で ある. 各グラフの縦軸は誤差の絶対値の常用 対数, 横軸は選点数である. 各グラフで, ダイ ヤ記号が乗っている実線の折れ線は $\gamma = 0.1$, 星記号が乗っている点線の折れ線は $\gamma = 0.3$, 4角記号が乗っている1点鎖線の折れ線は $\gamma =$ 0.5, 3角形記号が乗っている破線の折れ線は $\gamma = 0.7$,小さい丸の記号が乗っている2点 鎖線の折れ線は $\gamma = 0.9$ に対応する. (Fig.2. 参照)

誤差の評価式は, Fig.5.の右の列で(6.2)を 用いたのをのぞけば,全て(6.1)を用いた.

γ=0.1 γ=0.3 γ=0.5 γ=0.7 γ=0.9

Fig.2. Symbols attached to polygonal lines for various γ

7. 今回得られた数値実験結果 と今後の課題

7.1 今回の数値実験結果

単色波データ $\kappa = 1,10$ では収束状況は良 好. $\kappa = 100,1000$ の場合は桁数を800にする と, N = 1024で、全ての $\gamma(0.1 \le \gamma \le 0.9)$ で 収束傾向が見られた、一般に、小さい γ では 収束が速くなり、大きな γ では収束が遅くな ることが観察された、

平面波データ $\kappa = 100$ では 800 桁計算で 全ての $\gamma(0.1 \le \gamma \le 0.9)$ で収束傾向が見ら れた. $(2 \le N \le 1024)$ 小さい γ では収束 が速くなり,大きな γ では収束が遅くなるが, $\gamma = 0.1, 0.3$ の場合はほぼ同じ収束傾向である.

平面波データ $\kappa = 1000$ では桁数を 1600 に しても、N = 1024までの計算ではどの γ につ いても収束傾向は見られない。そこで選点数 N を 8192 まで 2 進的に増加させて 30 桁およ び 100 桁計算を実行した。このとき、 $\gamma = 0.7$ のケースでは 100 桁計算の場合かすかに収束 傾向が認められた.γ = 0.9 のケースでは 30 桁と 100 桁の両者において収束傾向が認めら れた.

7.2 今後の課題

平面波で大きな κ の場合については,当初 設定した問題の解答を得るにはいたっていな い. γ に応じて、「(1)桁数をさらに多くとれば, 収束傾向が見られるのか」,あるいは、「(2)桁 数を固定してもNを大きくすれば、やがては 収束するのか」、判然としない、数値実験で確 かめるためには、アルゴリズムを工夫し、さ らにハイパフォーマンスの計算機を使う必要 がある。

本来の帰着波動問題に立ち戻ると、そもそ もこのような高周波数問題を計算することの 意味を問わなければならない.この点での見 識は今のところ特に持ち合わせていない.こ の点についてもコメントをいただければ幸い である.

参考文献

- [1] Brigham, E. Oran., The Fast Fourier Transform, Prentice-Hall, Inc, 1974.
- [2] Granlund, T., GNU MP The GNU Multiple Precision Arithmetic Library Edition 4.1.2, 20 December 2002, Swox AB, 2002, http://www.swox.com/gmp/.
- [3] Katsurada, M. and Okamoto, H., A Mathematical Study of Charge Simulation Method I, J. Fac. Sci. Univ. Tokyo, Sect., IA, Math, Vol. 35(1988), pp. 507– 518.
- [4] The MPFR team at LORIA/INRIA Lorraine, MPFR — The Multiple Precision Floating-Point Reliable Library Edition

2.0.1 April 2002, LORIA/INRIA Lorraine, 2002, http://www.mpfr.org/.

- [5] Ooura, T., Ooura's Mathematical Software Packages, Research Institute for Mathematical Sciences Kyoto University, 2001, http://www.kurims.kyotou.ac.jp/~ooura/index.html.
- [6] 牛島照夫,千葉文浩, 円外帰着波動問題
 の基本解近似解法 —ノイマン条件の場
 合一,2002年応用数学合同研究集会報告
 集 pp.231-234,(発表 2002.12.21).
- [7] Ushijima, T. and Chiba, F., A Fundamental Solution Method for the Reduced Wave Problem in a Domain Exterior to a Disc, Journal of Computational and Applied Mathematics, Vol. 152(2003), pp.545-557.
- [8] Ushijima, T. and Chiba, F., Error Estimates for a Fundamental Solution Method Applied to Reduced Wave Problems in a Domain Exterior to a Disc, Journal of Computational and Applied Mathematics, Vol. 159(2003), pp.137-148.



Fig.3. Behavior of errors on the circle of collocation points for Dirichlet boundary value problem with boundary data $f(\theta) = \cos 16\theta$ in $2 \le N \le 1024$ for various κ , γ and precision. The left column of graphs shows 30 digit precision computation case, the middle column shows 200 digit precision computation case, and the right column shows 800 digit precision computation case. In each column, graphs fall into rank in order of size of κ . In each graph, each polygonal line corresponds to each γ as the above table of γ . The error estimation method (6.1) is employed. The abscissa axis means the number of collocation points (N), and the ordinate axis means the common logarithm of errors $(\log_{10} E^{(N)})$.



 $\gamma=0.1$ $\gamma=0.3$ $\gamma=0.5$ $\gamma=0.7$ $\gamma=0.9$

Fig.4. Behavior of errors on the circle of collocation points for Dirichlet boundary value problem with boundary data $f(\theta) = e^{i\kappa \cos\theta}$ in $2 \le N \le 1024$ for various κ , γ and precision. The left column of graphs shows 30 digit precision computation case, the middle column shows 200 digit precision computation case, and the right column shows 800 digit precision computation case. In each column, graphs fall into rank in order of size of κ . In each graph, each polygonal line corresponds to each γ as the above table of γ . The error estimation method (6.1) is employed. The abscissa axis means the number of collocation points (N), and the ordinate axis means the common logarithm of errors $(\log_{10} E^{(N)})$.



Fig.5. Behavior of errors on the circle of collocation points with 100 digit precision computation in $2 \leq N \leq 8192$ for various κ and γ . The left column of graphs shows Dirichlet problem case with boundary data $f(\theta) = e^{i\kappa\cos\theta}$. The right column shows Neumann problem case with boundary data $\frac{1}{k}\psi(\theta) = i\cos\theta e^{i\kappa\cos\theta}$. In each column, graphs fall into rank in order of size of κ . In each graph, each polygonal line corresponds to each γ as the above table of γ . The error estimation method (6.1) is employed in Dirichlet problem case, and (6.2) is employed in Neumann problem case. The abscissa axis means the number of collocation points (N), and the ordinate axis means the common logarithm of errors $(\log_{10} E^{(N)} \text{ or } \log_{10} \tilde{E}^{(N)})$.