

I - A91

二次元拡散方程式に対する境界積分方程式法の高速化

京都大学大学院 非会員 高橋徹
 京都大学工学研究科 正会員 西村直志
 京都大学工学研究科 フェロー ○小林昭一

1 序

従来の境界積分方程式法が有する計算量は、問題の自由度を N とすると $O(N^2)$ である。このため N が大きな問題に対して従来法を適用することは事実上困難であった。ところが近年、多重極積分方程式法 [1] やパネルクラスティング積分方程式法 [2] あるいは Wavelet 積分方程式法などのように、有する計算量が $O(N)$ 程度である高速解法の研究が盛んに行われており、ポテンシャル問題 [1] や筆者らの静弾性問題 [3][4] の解析においては既に成功を納めている。さらに筆者らは、時間域問題に対する高速解法の開発の重要性に着目し、その第一歩として、パネルクラスティング法に基づく二次元拡散方程式の高速解法について検討した。

ここで提案する拡散方程式の高速解法とは、まず境界積分方程式 (後述の式 (2)) に含まれる積分を評価するアルゴリズムとして、その積分を Taylor 展開の形で表現し、その展開係数を 4 分木構造で表現された空間の上で集結・移動・分散することによって $O(N)$ 程度の計算量で評価するというアルゴリズムを組み立て、それに繰り返し解法を組み合わせ、式 (2) の離散行列を未知境界量に関して解くというものである。ここで、積分の展開に Taylor 展開を用いているという点で、本手法はパネルクラスティング積分方程式法に属するものと考えられる。ただし、これまで提案されてきたパネルクラスティング積分方程式法 (あるいは多重極積分方程式法) のアルゴリズムと異なる点は、拡散方程式では時間軸を考慮しなくてはならないという点である。これに伴ってアルゴリズムを多少改変しなくてはならないが、多くの点では既存するパネルクラスティング積分方程式法のアルゴリズムと同様である。したがって次節では、紙面の都合にもより、既存のパネルクラスティング積分方程式法の運用の際に必要な諸公式に対応する式を示すにとどめる。すなわち、式 (2) に含まれる積分のモーメントによる評価式 (式 (5))・モーメントの原点移動公式 (式 (7))・M2M 変換公式・局所展開係数による積分の評価式 (式 (8))・モーメントから局所展開係数への変換公式 (式 (9))・M2L 変換公式・局所展開係数の原点移動公式 (式 (10))・L2L 変換公式を明示する。また、要する記憶容量に関しては考慮する時間ステップ数を M とすると、従来法においては過去の時間ステップで得られた解を記憶する際に $O(MN)$ 程度の容量を要するが、本手法では比較的容量を要しないモーメントを記憶することで代用できるので $O(N)$ 程度の記憶量で済む。したがって本手法では時間ステップ数も極めて大きくできる可能性がある。

2 定式化

二次元領域 $D \in R^2$ における拡散方程式の初期値境界値問題とは、与えられた初期条件と境界条件の元で支配方程式

$$\frac{\partial u(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) u(\mathbf{x}, t) + f(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} = (x_1, x_2) \in D; \quad t \in [0, \infty) \quad (1)$$

を満たすようなポテンシャル $u(\mathbf{x}, t)$ を求める問題である。ただし、 $f(\mathbf{x}, t)$ は非同次項を表す。さて、 D の境界 S が区分的に滑らかで、非同次項と初期条件が全て 0 であると仮定した場合、式 (1) より次の境界積分方程式が得られる [5]。

$$\frac{1}{2}u(\mathbf{x}, t) + \int_{t_0}^t \int_S \frac{\partial K(\mathbf{x} - \mathbf{y}, t - \tau)}{\partial \mathbf{n}(\mathbf{y})} u(\mathbf{y}, \tau) dS_y d\tau = \int_{t_0}^t \int_S K(\mathbf{x} - \mathbf{y}, t - \tau) q(\mathbf{y}, \tau) dS_y d\tau \quad (2)$$

ただし、 S 上の点 $\mathbf{x}$ における境界外向き単位法線ベクトルを $\mathbf{n}(\mathbf{x})$ と表すとき、 $q(\mathbf{x}, t)$ は $\partial u(\mathbf{x}, t) / \partial \mathbf{n}(\mathbf{x})$ と定義される流束であり、関数 K は式 (1) に対する基本解である。さて、基本解を点 $\mathbf{y}$ に関して点 $\mathbf{c}$ を原点として Taylor 展開すると、

$$K(\mathbf{x} - \mathbf{y}, t - \tau) = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} O_m(\mathbf{x}_1 - c_1, t - \tau) O_n(\mathbf{x}_2 - c_2, t - \tau) I_m(\mathbf{y}_1 - c_1) I_n(\mathbf{y}_2 - c_2) \quad (3)$$

が得られる [6]。ただし、 H_m を m 次の Hermite 多項式として、関数 I_m および O_m は以下のように定義したものである。

$$I_m(x) = \frac{x^m}{2^{m/2} m!}, \quad O_m(x, t) = \frac{k(x, t) H_m\left(\frac{x}{\sqrt{2t}}\right)}{t^{m/2}} \quad (4)$$

キーワード: 境界積分方程式法, 拡散方程式, パネルクラスティング法, 高速解法

連絡先: 〒 606-8501 京都市左京区吉田本町 TEL: 075-753-5115 FAX: 075-753-5066

式(3)を用いると S の部分 S_c に対して式(2)に含まれる積分は次のように評価することができる。

$$\begin{aligned} & \int_{t_0}^t \int_{S_c} \left(\frac{\partial K(\mathbf{x} - \mathbf{y}, t - \tau)}{\partial \mathbf{n}(\mathbf{y})} u(\mathbf{y}, \tau) - K(\mathbf{x} - \mathbf{y}, t - \tau) q(\mathbf{y}, \tau) \right) dS_y d\tau \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \int_{t_0}^t O_m(x_1 - c_1, t - \tau) O_n(x_2 - c_2, t - \tau) M_{m,n}(c, \tau) d\tau \end{aligned} \quad (5)$$

ここに、 $M_{m,n}(c, \tau)$ は次式に従って計算されるもので、点 c を原点とするモーメントと呼ぶ。

$$M_{m,n}(c, \tau) = \int_S \left(\frac{\partial I_m(y_1 - c_1) I_n(y_2 - c_2)}{\partial \mathbf{n}(\mathbf{y})} u(\mathbf{y}, \tau) - I_m(y_1 - c_1) I_n(y_2 - c_2) q(\mathbf{y}, \tau) \right) dS_y \quad (6)$$

また、原点を点 c から点 c' に移動する場合に対応するモーメントは以下のように変換される (M2M 変換公式と呼ぶ)。

$$M_{k,l}(c', \tau) = \sum_{m=0}^k \sum_{n=0}^l I_{k-m}(c_1 - c'_1) I_{l-n}(c_2 - c'_2) M_{m,n}(c, \tau) \quad (7)$$

式(5)の評価に際しては、同式を点 $\mathbf{x}$ に関して点 $\mathbf{a}$ を原点として Taylor 展開した表現を用いる。すると式(2)の積分は

$$\int_{t_0}^t \int_{S_c} \left(\frac{\partial K(\mathbf{x} - \mathbf{y}, t - \tau)}{\partial \mathbf{n}(\mathbf{y})} u(\mathbf{y}, \tau) - K(\mathbf{x} - \mathbf{y}, t - \tau) q(\mathbf{y}, \tau) \right) dS_y d\tau = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} I_k(a_1 - x_1) I_l(a_2 - x_2) L_{k,l}(\mathbf{a}, t) \quad (8)$$

と計算される。ここに、 $L_{k,l}(\mathbf{a}, t)$ は

$$L_{k,l}(\mathbf{a}, t) = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \int_{t_0}^t O_{m+k}(a_1 - c_1, t - \tau) O_{n+l}(a_2 - c_2, t - \tau) M_{m,n}(c, \tau) d\tau \quad (9)$$

と計算されるものであり、点 $\mathbf{a}$ を原点とする局所展開係数と呼ぶ (式(9)を M2L 変換公式と呼ぶ)。また、局所展開の原点を点 $\mathbf{a}$ から点 $\mathbf{a}'$ に移動する場合に対応する局所展開係数の変換公式は次式のように計算される (L2L 変換公式)。

$$L_{k,l}(\mathbf{a}', t) = \sum_{m=k}^{\infty} \sum_{n=l}^{\infty} I_{m-k}(a'_1 - a_1) I_{n-l}(a'_2 - a_2) L_{m,n}(\mathbf{a}, t) \quad (10)$$

以上で本手法を運用するにあたって必要となる道具が全て揃ったことになる。

3 数値解析

本報では、繰り返し解法として restart 版の GMRES を用いた (restart 回数は 10)。また、その前処理にはブロック対角スケーリング法を用いた [7]。

さて、一辺の長さが 1 の正方形領域を考え、その境界条件は、一つの辺ではポテンシャルを 0 とし、その対辺では 1 とする。残る二辺では流束を 0 とする。また、解析すべき時刻は $t = 0.01$ から 0.01 毎に 10 ステップとした。なお、過去の時間ステップで求めた解は一切記憶しないものとした。

図 1 は、境界要素数 N に対する総計算時間 (CPU 時間 [s]) を従来法と本手法について log-log でプロットしたものである。従来法がほぼ勾配 2 を示すのに対して本手法は 1 よりもやや大きな勾配を示し、 N が 3000 程度で従来法よりも速くなることがわかる。なお、従来法では利用した計算機の主記憶容量 (512MB) の制約を越えたために、およそ 1 万要素以上では解析できなかった。また、両手法で得られた解はほぼ同一であった。以上より、本手法の有効性が確認されたものと思われる。

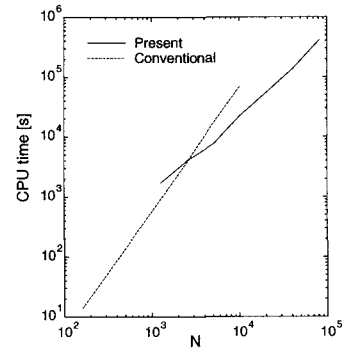


図 1. 要素数に対する総計算時間の比較

参考文献

- [1] L. Greengard, The rapid evaluation of potential fields in particle systems, The MIT Press, Cambridge, 1988.
- [2] W. Hackbusch and Z.P. Nowak, On the fast matrix multiplication in the boundary element method by panel clustering, Numer. Math., **54**, 463-491, 1989.
- [3] 吉田研一, 西村直志, 小林昭一, 多重極積分方程式法を用いた 3 次元静弾性クラック問題の解析, 応用力学論文集 vol.1, 365-372, 1998.
- [4] 高橋 徹, 小林昭一, 西村直志, 改良型円錐孔底応力解放法への多重極積分方程式法の適用, 境界要素法論文集, **15**, 105-110, 1998.
- [5] 例えば, 田中正隆, 松本敏郎, 中村正行, 境界要素法, 培風館, 140-144, 1991.
- [6] D.V. Widder, The heat equation, ACADEMIC PRESS, 1975.
- [7] 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, 計算工学講演会論文集 **1**, 315-318, 1996.