

高速多重極法の境界要素解析への応用

APPLICATION OF FAST MULTIPOLE ALGORITHM
IN BOUNDARY ELEMENT METHOD

福井卓雄*, 服部純一**, 土居野優***

Takuo FUKUI, Jun'ichi HATTORI and Masaru DOINO

* 工修 福井大学講師 工学部環境設計工学科 (〒910 福井市文京 3-9-1)

** 福井大学大学院 工学研究科環境設計工学専攻 (〒910 福井市文京 3-9-1)

*** 福井大学大学院 工学研究科環境設計工学専攻 (〒910 福井市文京 3-9-1)

The fast multipole method is applied to the boundary element method to reduce both the computational complexity and the memory requirement. The fast multipole algorithm is used to compute matrix-vector product in solving the discretized linear equations iteratively. This reduces both the computing time and the memory requirement. This method is implemented for the two-dimensional potential problem, then a numerical experiment is performed and two application problems are demonstrated. The experiment shows that both the time complexity and the memory requirement are $O(N)$ in $1,000 < N < 200,000$, and that, if the leaf cell of the clustered tree includes 16-32 elements, the performance is ten times improved than the case that the leaf cell includes only one element. Two applications, one is to determine Wiener capacity of a region bounded by a fractal curve and the other is to compute the flow field by the vortex sheet tracking method, confirm the wide applicability of this method.

Key Words : Boundary element method, Fast multipole algorithm, Complexity, Memory requirement, Vortex sheet method

1. はじめに

本論文は、これまで境界要素法の大きな壁であった密行列を解くことによる計算量と必要記憶容量の増大という問題を解決することを目的としている。具体的には、 N 体問題の解析において広く使われている高速多重極法 (Fast Multipole Method) を境界要素解析に応用することにより、計算量および必要記憶容量を圧倒的に軽減し、従来困難であった境界要素法による大規模数値解析を可能にすることを目的としている。

境界要素法は、場に生じるある擾乱による全域的な影響を重ね合わせることによって、場を解析する数値解析法である。全域的な影響を基礎とすることによって領域の不要な分割を回避できる一方、離散化によって得られる方程式はつねに密行列を係数に持つ。このために、問題の規模が大きくなるとともに、計算量は $O(N^3)$ で、記憶容量は $O(N^2)$ で増大し、大規模な解析が困難であるという欠点があった。同様の問題は N 体問題を解析する場合にも存在する。この分野では Rokhlin¹⁾ によって提案されたアルゴリズムを発展させ^{2),3)} 洗練させて、最近の 10 年間に天体物理学⁴⁾ 分子動力学⁵⁾ 流体力学 (渦法)⁶⁾ などの分野で巨大な問題を解析できるようになっている。このアルゴリズムは高速多重極法と呼ばれている。高速多重極法の基本的なアイデアは、遠方に生じるたくさんの擾乱からの影響をたった一つの擾乱からの影響とみなしてしまうということにある。

この方法は、解析の基礎を同じくする境界要素法にも当然適用できるはずであるが、その研究が始まったのはごく最近のことである。^{7),8),9)} 著者らも最近になって研究を開始し、この方法の有効性と適用可能性を検討してきた。^{10),11),12)} ここでは、著者らの得てきた知見をまとめ、さらに新たな結果を加えて報告する。

本論文では、まず、 N 体問題における高速多重極法を概観する。つぎに、高速多重極法を利用した境界要素法について考察し、2次元ポテンシャル問題にこれを適用して、その効果を確認し、最適な適用法を探索する。最後に、応用例として、フラクタルな境界を持つ領域の解析と渦膜法による流れ解析に適用した例を示す。

2. 高速多重極法

2次元ポテンシャル問題を例として、高速多重極法について簡単に解説する。以下では、記述を簡潔にするために、適宜、実数表現と複素数表現を混用する。

2.1 多重極展開

点 y に源点があるとき、点 x における対数ポテンシャルの値 $U(x)$ を評価することを考えよう。図-1に示すように、源点 y の近傍に点 y_0 をとると、 $R = |x - y_0|$ が $r_0 = |y - y_0|$ よりも十分に大きければ、点 x における対数ポテンシャルの値は次のように表現すること

ができる。

$$\begin{aligned}\log \frac{1}{r} &= \log \frac{1}{R} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{r_0^n}{nR^n} \cos n(\varphi_x - \varphi_y) \\ &= \operatorname{Re} \left[-\log z + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z_0^n}{nz^n} \right] \quad (1)\end{aligned}$$

ここに、 $r = |x - y|$ であり、 $z = R \exp(i\varphi_x)$ および $z_0 = r_0 \exp(i\varphi_y)$ である。

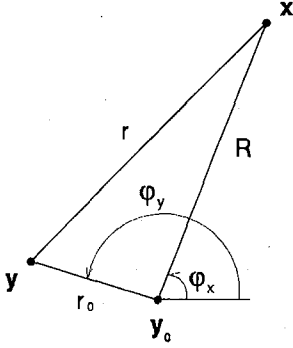


図-1 源点 y と多重極点 y_0

同様に、点 y におかれた方向 ν を持つ双極子によるポテンシャルについても

$$\begin{aligned}\frac{\nu \cdot (x - y)}{r^2} &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{r_0^{n-1}}{R^n} \cos [n\varphi_x - (n-1)\varphi_y - \varphi_\nu] \\ &= \operatorname{Re} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\nu z_0^{n-1}}{z^n} \right] \quad (2)\end{aligned}$$

と表すことができる。ここに、 $\nu = \exp(i\varphi_\nu)$ は方向ベクトル ν を表す。

(1) および (2) はいずれも、点 x におけるポテンシャルの値を、点 y_0 に関する展開形で

$$\begin{aligned}U(x) &= a_0 \log \frac{1}{R} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{a_n \cos n\varphi_x + b_n \sin n\varphi_x}{R^n} \\ &= \operatorname{Re} \left[-M_0 \log z + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{M_n}{z^n} \right] \quad (3)\end{aligned}$$

という形で表現している。ここに、 $M_0 = a_0$ 、 $M_n = a_n + ib_n$ とした。実際、対数ポテンシャルに対して

$$M_0 = 1, \quad M_n = z_0^n / n \quad (4)$$

双極子に対して

$$M_0 = 0, \quad M_n = \nu z_0^{n-1} \quad (5)$$

である。一般に、ある領域に含まれる源点や双極子の集合に対し、その領域から離れた点におけるポテンシャルの値は (3) の形で表現することができる。このようなポテンシャルの展開表現を多重極展開と呼んでいる。

多重極展開 (3) は無限級数であるが、 $R = |z|$ が $r_0 = |z_0|$ よりも十分に大きければ級数は速く収束し、有限の

項数をとっても十分な計算精度の値が得られる。通常は $R > 2r_0$ の範囲で使われる。使用する項数は必要とされる計算精度に依存するが、通常は 10~20 項程度が用いられる。

2.2 多重極点の移動と場の Taylor 展開

多重極展開 (3) を使って、ある領域に含まれる多くの源点や双極子の集合に対して、その領域から離れた多くの点におけるポテンシャルやその勾配の値を効率良く計算しようとする方法が高速多重極法である。この方法では (3) を直接に使うのではなく、つぎの三過程を経て計算を効率化する。まず、多重極の集合をまとめてさらに新しい多重極で表現する、つぎに、ポテンシャル場は値を求める点の近傍の点のまわりの Taylor 展開により表現する、さらに、Taylor 展開の係数はより近傍の点からの Taylor 展開の形に変換して使う。ここでは、これらの計算過程について述べ、高速多重極法のアルゴリズム導入の準備とする。

多重極の集合はまた別の一つの多重極として表現することができる。このためには、ある多重極点を別の多重極点に移動させたときの係数の変換関係が必要である。いま、多重極点 y_0 を別の多重極点 $\tilde{y}_0$ に移動させるとする。 $z_0 \equiv y_0 - \tilde{y}_0$ ($\equiv$ は右辺の複素数表現を意味する) とおくと、(3) を用いて、新しい係数 $\tilde{M}_n$ は古い係数 M_n から

$$\tilde{M}_0 = M_0, \quad \tilde{M}_n = \frac{z_0^n}{n} M_0 + \sum_{m=1}^n \binom{n-1}{m-1} z_0^{n-m} M_m \quad (6)$$

のように変換される。多数の多重極を一つの多重極に集合させる場合には、それぞれの多重極に対して新しい多重極点の係数を求め、それらを加え合わせる。

多重極展開により表現されるポテンシャルの場は変動の少ない滑らかな場であるので、これを Taylor 展開

$$U(x) = \operatorname{Re} \left[\sum_{n=0}^{\infty} L_n z^n \right] \quad (7)$$

で表現することができる。ここに、展開の中心点 x_0 に対して $z \equiv x - x_0$ である。係数 L_n は (3) を点 x_0 のまわりで Taylor 展開すれば、多重極の係数 M_n から

$$L_0 = -M_0 \log z_0 + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{M_m}{z_0^m} \quad (8)$$

$$L_n = \frac{(-1)^n}{z_0^n} \left[\frac{M_0}{n} + \sum_{m=1}^{\infty} \binom{n+m-1}{m-1} \frac{M_m}{z_0^m} \right] \quad (9)$$

により得られる。ここに、多重極点 y_0 に対して $z_0 \equiv x_0 - y_0$ である。

最後に、Taylor 展開の中心点を x_0 から $\tilde{x}_0$ へ移動させる場合の新しい係数 $\tilde{L}_n$ は (7) に二項定理を用いて、

$$\tilde{L}_n = \sum_{m=n}^{\infty} \binom{m}{n} z_0^{m-n} L_m \quad (10)$$

となる。ここに、 $z_0 \equiv \tilde{x}_0 - x_0$ である。

ポテンシャル場の勾配は (7) を微分することにより、

$$\frac{\partial U}{\partial x} - i \frac{\partial U}{\partial y} = \sum_{n=1}^{\infty} n L_n z^{n-1} \quad (11)$$

で求まる。

2.3 高速多重極アルゴリズム

N 個の源点が存在するとき、それら源点相互の影響を効率良く計算することを考えよう。ここでは、Green-gard と Rokhlin³⁾ によって提案された高速多重極アルゴリズムについて紹介する。

(1) 領域の木表現

高速多重極アルゴリズムの基本的なアイデアは、領域を階層構造化し、その構造を利用して多重極の計算と影響値(ポテンシャル値あるいはその勾配の値)の計算を効率良く実行しようとするものである。階層構造としては、2分木、 2^D 分木(D は次元)、多重格子などが用いられている。ここでは、2次元空間の4分木構造を例として、木によるアルゴリズムについて述べる。

4分木構造を得るためには、図-2の上図に示すように、まず、領域全体を含む正方形をとり、それを根とする。つぎに、その正方形を4等分して4つの子のセル(正方形)を作成し、すべての源点をそれぞれのセルに分配する。この4分割の操作を順次子のセルについて行なっていく、最小のセルが定めた数の源点を含むか、枝の深さがある値になるまで繰り返す。何も含まないセルについてはそれ以上の分割は行なわない。

図-2では、境界上に分布した15個の点に対して、領

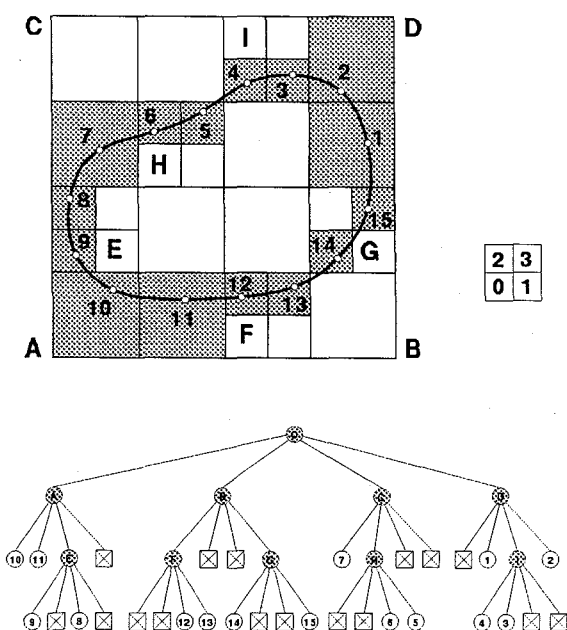


図-2 領域のクラスター分割とその4分木表現

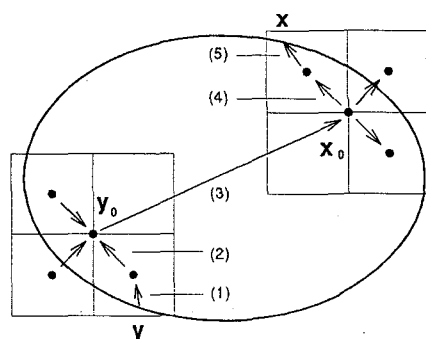


図-3 多重極展開によるポテンシャル値評価の過程

域を深さ3まで分割し、最小のセル(葉、着色)は1個の点を含むようにした例を示している。得られたクラスターを4分木で表現すると図-2の下図のようになる。図で、白丸は葉を、色のついた丸は幹(枝)を、四角は点を含まないセルを示す。

(2) 影響値評価の手続き

木の構造を使って N 個の源点相互の影響を計算する手順について述べよう(図-3参照)。

第一段階は、木の葉(枝の先端)のセルからはじめて、根に向かって、すべてのセルについて、そのセルに含まれる源点によるポテンシャルをセルの代表点(中心点)における多重極展開で置き換える。まず、葉のセルに含まれるすべての源点について、それぞれによるポテンシャルを葉のセルの中心点における多重極展開(1)(あるいは(2))で表し、それらを加え合わせて一つの多重極とする(図-3の(1))。つぎに、一段上の親のセルに移って、親のセルに含まれる子セルの多重極展開を集めて親セルの多重極展開で置き換える(式(6)および図-3の(2))。この過程を繰り返して根のセルに到達すれば、すべてのセルについて多重極の係数 M_n が計算できたことになる。実際には、根と第1レベルのセルについては、係数は使われないので計算は不要である。

第二段階は、根(実際には第2レベルのセル)からはじめて葉に向かい、求めるべき点の影響値(ポテンシャルの値、勾配など)を決定する。このために、各セルに含まれる計算点のポテンシャルの値をセルの代表点のまわりのTaylor展開(7)で表し、その係数 L_n を求める。まず、第2レベルのセルについて、十分遠くにある同じレベルのセルからの多重極展開によるポテンシャルのTaylor展開の係数を(8)、(9)を使って求める(図-3の(3))。つぎに、子のセルに移って、親のセルのTaylor展開を展開の中心を子のセルの中心に移動させる(係数の変換(10))ことによって引き継ぐ(図-3の(4))。同時に、親のセルの近傍ではあるが子のセルにとっては遠方にあるセルからの多重極展開によるポテンシャルを

Taylor 展開の形で求めて加える (図-3の (3) を子のレベルのセル同志で行なう)。この操作を順次枝を下りながら繰り返し、葉のセルに至る。葉のセルでは最終的に得られた Taylor 展開の係数を使って、求めるべき点のポテンシャルの値、勾配などを決定する (図-3の (5))。

最後に、近傍の源点 (以上の計算過程で除外されたもの) からの影響を (1)(あるいは (2)) の左辺を使って直接に計算し、上の結果に加える。ここでいう近傍とは、上の過程で影響を計算できなかった源点を含んでいることに注意が必要である。源点の分布が偏在している場合には (境界要素法では通常の状態である)、枝の途中に葉が存在するのが普通である。そのような葉のセルに含まれる源点からの影響は子のセルに伝わらないことがあるので、こういう源点はここでいう近傍に含まれることになる。

第二段階では、一つのセルに対して、その遠方のセルからの影響を計算するために、同じレベルのセル同志の間に遠方と近傍という区分が必要である。二つのセルがお互いに遠方にあるとは、二つのセルの間に一つか二つのセルがはさまれている状態をいうことにする。図-4に二つのレベルのセルについて、その遠方と近傍のセルの関係を示した。親セル (太線) の遠方は太線のセルで、子セル (着色) の遠方は着色のセルで表している。親のセルの近傍がさらに子のセルの遠方と近傍と

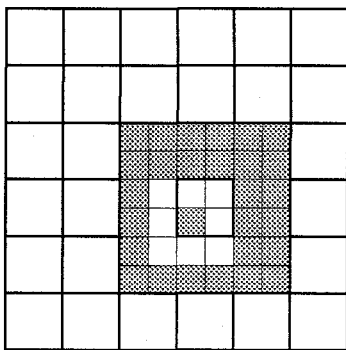


図-4 二つのレベルのセルの遠方と近傍のセルの関係

に分けられている。

以上の計算により、 N 個の源点によるそれぞれの点上のポテンシャル (勾配) の値が計算される。この計算過程の計算量は $O(N)$ である。なぜなら、源点に直接に関係する計算 (図-3の (1) と (5)) は各点について一度だけで済むから $O(N)$ である。上行の計算 (図-3の (2)) と下行の計算 (図-3の (3) と (4)) は中間のセルの数だけ必要である。この数は、もし木が深さ n レベルであり、すべての点が n レベルのセルに一つづつ含まれるとすると、 $N = 4^n$ (2次元の場合) であり、根を含む中間のセルの数は $1 + 4 + 4^2 + \dots + 4^{n-1} = (1 - 4^n)/(1 - 4) = (N - 1)/3$

となる。計算に使う展開の項数を N に無関係に定めれば、この計算量は $O(N)$ となる。

3. 高速多重極境界要素法

境界要素法には、直接法と呼ばれる一般化された Green 公式を基礎とする方法、間接法と呼ばれる一般化された層ポテンシャルを基礎とする方法、あるいは、仮想境界を用いる方法など、いろいろな方法がある。いずれに対しても高速多重極法を適用することができるが、ここでは、直接法を例にとって高速多重極法を利用した境界要素法 (高速多重極境界要素法) を説明する。

3.1 境界要素法

境界要素法 (直接法) においては、場は

$$C(x)u(x) = \int_{\partial B} G(x, y)s(y) dS_y - \int_{\partial B} S(x, y)u(y) dS_y \quad (12)$$

で表される。ここに、 G と S はそれぞれ基本特異解 (一重層核) と第二基本特異解 (二重層核) であり、2次元のポテンシャル問題の場合には、(1) および (2) を 2π で割ったもので与えられる。 C は点 x の位置に依存するパラメータで、点 x が領域 B 内のとき 1、境界 ∂B 上のとき $1/2$ である。また、 $s = \partial u / \partial n$ は Neumann 境界値である。境界 ∂B において、境界条件 $u = \hat{u}$ あるいは $s = \hat{s}$ が与えられるとき、(12) は未知境界関数 s または u に関する積分方程式となる。

境界積分方程式 (12) を数値的に解くために、境界上の関数 u, s をつぎのように近似する。

$$u(x) = \sum_i^N \phi_i(x)u_i, \quad s(x) = \frac{\partial u}{\partial n}(x) = \sum_i^N \phi_i(x)s_i \quad (13)$$

ここに、 N 個の近似基底 $\phi_i(x)$ は、境界上にとった N 個の点 $x_1, x_2, \dots, x_N$ について $u(x_i) = u_i$ を満足するように選ぶものとする。(13) を (12) に代入すると、右辺の積分は近似されて、

$$C(x)u(x) = \sum_i^N A_i(x)s_i - \sum_i^N B_i(x)u_i \quad (14)$$

となる。ここに、 $A_i(x), B_i(x)$ は、それぞれ s_i, u_i に対する影響関数で、

$$\begin{aligned} A_i(x) &= \int_{\partial B} G(x, y)\phi_i(y) dS_y, \\ B_i(x) &= \int_{\partial B} S(x, y)\phi_i(y) dS_y \end{aligned} \quad (15)$$

である。積分方程式を近似的に解くために、境界上の N 個の点 $x_1, x_2, \dots, x_N$ について (14) を満足させると、

$$\sum_j^N A_j(x_i)s_j = \sum_j^N \left[\frac{1}{2}\delta_{ij} + B_j(x_i) \right] u_j \quad (16)$$

が得られる。ここに、 δ_{ij} は Kronecker のデルタである。(16) において、 $u_i = \hat{u}(x_i)$ が与えられれば s_i が未

知数に, $s_i = \hat{s}(x_i)$ が与えられれば u_i が未知数になるので, (16) は N 個の未知数についての連立一次方程式となる。この方程式を解いて境界上のすべての u_i, s_i が求まれば, 領域内の他の量は (14) から求まる。

3.2 高速多重極境界要素法

方程式 (16) の係数行列は密行列である。このために, 必要記憶容量は, 離散化自由度 N に対して, N^2 程度となり, 方程式を解く計算時間は, 直接法を用いれば $O(N^3)$, 効率の良い繰り返し法を用いても $O(N^2)$ となる。高速多重極境界要素法は, 従来の境界要素法の密行列を解くという難点を回避して, 必要記憶容量, 計算量とともに $O(N)$ の程度に改善しようとする方法である。

(1) 境界要素法の多重極表現

方程式を繰り返し解法で解くことにする。この場合に必要な計算は (16) における行列ベクトル積

$$\sum_j^N A_{ij} s_j, \quad \sum_j^N B_{ij} u_j \quad (17)$$

の評価である。ここに, $A_{ij} = A_j(x_i)$, $B_{ij} = B_j(x_i)$ とした。この積の評価は, $A_j(x)$, $B_j(x)$ というポテンシャルを持つ N 個の要素からの影響を N 個の点の上で求めることと等価であるから, 高速多重極法を直接に利用して計算量を減らすことができる。また, 高速多重極法では係数 A_{ij} , B_{ij} を記憶しておく必要がないので, 計算量とともに記憶容量も減少させることができる。

(17) を多重極展開で表現すると,

$$\begin{aligned} \sum_j^N A_{ij} s_j &= \sum_j^N A_{ij}^{\text{near}} s_j + \sum_k^N \mathbf{L}_{ik}^{\text{far}} \sum_{j \in \text{Cell } k} \mathbf{M}_{kj}^A s_j \\ \sum_j^N B_{ij} u_j &= \sum_j^N B_{ij}^{\text{near}} u_j + \sum_k^N \mathbf{L}_{ik}^{\text{far}} \sum_{j \in \text{Cell } k} \mathbf{M}_{kj}^B u_j \end{aligned} \quad (18)$$

という形に書き直すことができる。この式の右辺は, 高速多重極アルゴリズムの中で計算される量ではあるが, 具体的に記憶される量ではないので注意が必要である。とくに, $\mathbf{L}_{ik}^{\text{far}}$ と $\mathbf{M}_{kj}$ とはアルゴリズムの中での演算を抽象的に表現した演算子である。

(18) において, A_{ij}^{near} と B_{ij}^{near} は選点 x_i の近傍の要素に対する通常の係数行列の成分である。 $\mathbf{M}_{kj}$ は j -要素による k -セルの多重極係数を評価する演算で, アルゴリズムの第一段階, すなわち, 図-3の (1) と (2) の過程に相当する。 $\sum_{j \in \text{Cell } k} \mathbf{M}_{kj}^A s_j$ と $\sum_{j \in \text{Cell } k} \mathbf{M}_{kj}^B u_j$ は k -セルの多重極係数を表している。この演算を (4) (または (5)) を用いて直接に計算することも可能であるが, その場合の計算量は $O(N^2)$ となる。また, $\mathbf{L}_{ik}^{\text{far}}$ は k -セルに置かれた多重極による点 x_i のポテンシャルを評価する演算で, アルゴリズムの第二段階, すなわち, 図-3の (3), (4) および (5) の過程に相当する。当然, これも (3) により直接に計算することもできる。

結局, 境界要素法における行列-ベクトル積の演算は, (1) $\mathbf{M}_{kj}$ の演算, (2) $\mathbf{L}_{ik}^{\text{far}}$ の演算, および, (3) A_{ij}^{near} と B_{ij}^{near} による演算, の高速多重極アルゴリズムの三段階の演算により評価される。

これらの演算のうち, $\mathbf{M}_{kj}$ の (1) の過程, および, A_{ij}^{near} と B_{ij}^{near} だけが影響関数 $A_i(x)$ および $B_i(x)$, すなわち, 積分核の違いや境界要素の近似法に依存していること, これらの計算の計算量は $O(N)$ であることを注意しておこう。残りの演算, すなわち高速多重極アルゴリズムの大部分の演算は, 積分核の違いやその分布の形態には無関係である (式 (3) および (6)-(11) を参照)。したがって, 以上の表現は, 未知境界値を決定した後内部の点におけるポテンシャルや勾配の値を計算する場合や, 非線形問題において内部に要素をおく場合にも, まったく同様に使うことが可能である。

(2) 影響関数の多重極表現

N 体問題と違って, 境界要素法の場合には, 影響関数 $A_i(x)$ と $B_i(x)$, すなわち, 境界上に分布した一重層密度と二重層密度とによるポテンシャルの多重極展開が必要となる。これらの影響関数は (15) により定義されるから, (1) および (2) を要素上で積分すれば求めることができる。さらに, 多重極点 y_0 を固定して考えれば, 積分は z_0 についてだけ考えれば良いから, 結局, 多重極係数 (4) と (5) との要素上の積分

$$\tilde{M}_n = \int_{\partial B} M_n(z_0) \phi_i(y) dS_y \quad (19)$$

を計算すれば良いことになる。¹¹⁾

たとえば, 一定要素の場合, 要素が直線区間 $E_i = [z_1, z_2]$ であり, その上の近似基底が $\phi_i(s) = 1$ であるとする, 線素は

$$dS_y = \frac{|z_2 - z_1|}{z_2 - z_1} dz_0$$

となる。したがって, $A_i(x)$ (一重層) について

$$\tilde{M}_0^A = |z_2 - z_1|, \quad \tilde{M}_n^A = \frac{|z_2 - z_1|}{n(n+1)(z_2 - z_1)} [z_0^{n+1}]_{z_1}^{z_2} \quad (20)$$

$B_i(x)$ (二重層) について, 要素の単位外向き法線が $\nu = -i(z_2 - z_1)/|z_2 - z_1|$ となることを考慮すれば,

$$\tilde{M}_0^B = 0, \quad \tilde{M}_n^B = -\frac{i}{n} [z_0^n]_{z_1}^{z_2} \quad (21)$$

が得られる。

(3) 方程式の解法

方程式は繰り返し解法を使って解く。境界形状が単純で問題が簡単な場合, とくに, 外部 Neumann 問題の場合には SOR 法でも十分に収束する。¹⁰⁾ しかし, 一般の問題を効率良く解くためには, 収束が早くかつ安定な解法を選ぶ必要があり, 解法の選択はとくに重要である。現在は, スケーリングを施した自乗共役勾配法 (CGS 法) および前処理つき双共役勾配安定法 (Bi-CGSTAB 法)¹³⁾ を使用して, まずまずの収束を得ている。

現在知られている繰り返し解法は差分法や有限要素法の解析を目的として開発されたものが多く、対称な疎行列を効率良く解くことを目的としたものが多い。高速多重極境界要素法では、行列ベクトル積を効率的に計算しているものの、非対称な密行列を扱う。したがって、不完全 LU 分解などの疎行列向きの方は使えない。その一方で、境界要素法の方程式には多くの特徴があり、その特性はかなりの程度に限定されている。たとえば、第 2 種積分方程式から導かれた方程式は安定性が高く、第 1 種積分方程式から導かれた方程式は安定性は低いが特異値分解を使えば近似解は比較的求め易い、などである。こういう方程式の特性に適合した非対称密行列向きの繰り返し解法の開発が強く望まれる。

境界要素法の方程式を繰り返し解法で解く場合にとくに注意すべき問題点がある。代数方程式のもととなる積分方程式の中には、解が定数分だけずれたり、ある定関数分だけずれたりして、解の一意性が保証されないものがある。このような代数方程式は、直接解法では解ける(数値誤差のせいであろう)ことがあっても、繰り返し法では解が収束しないことが多い。このような問題を扱う場合には、適切な条件を加えて解の一意性を保証した上で解析することがとくに必要である。

4. 記憶容量と計算量

高速多重極境界要素法を使って大規模な問題を解析するときの記憶容量と計算時間の目安を得るために、比較的単純なモデルを使って数値実験を行なった。数値計算の実行時に決定すべきパラメータとして、多重極展開の項数、遠方セル決定の条件、最小セル(葉)に含まれる要素の最大数、最小セルの深さ(レベル)などがある。これらのパラメータのいずれもが記憶容量と計算時間に影響するが、計算精度に関係するものは、展開の項数と遠方セル決定の条件である。ここでは、展開の項数は 18(実数係数は 37)、二つ分のセル以上離れたセル同志を遠方と決めた。これらの条件のもとで、ポテンシャルの計算における相対誤差は 10^{-10} 以下である。数値実験として、最小セルの最大要素数 M をパラメータとして、要素数 N を変化させて計算し、要素数と計算時間・必要記憶容量との関係を求めると同時に、最適な M を探索した。また、木の深さの最大レベルは 15 としたが、使用した計算機の容量の制約から、この制限に抵触する例はなかった。使用した計算機はワークステーションであり、演算性能は 183 SPECfp92(200 SPECint92)、主記憶は 128MB である。計算はすべて主記憶上で実行させている。

例題としたのは、長径と短径の比が 2:1 の楕円境界の外部 Neumann 問題である。一定要素を用いた境界要素法を使い、要素の中心をその代表点としてクラスター分割を行なった。要素数 $N = 1024$ としたときのクラ

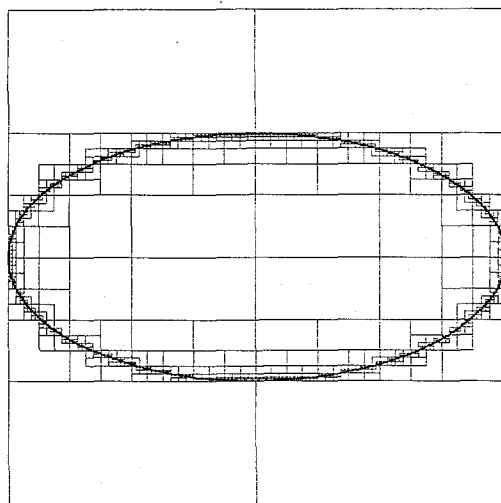


図-5 楕円境界のクラスター分割 ($N = 1024$)

スター分割の例を図-5に示す。 $M = 1$ のときの有効なセルの総数は 2045、最大レベルは 10 であった。形状の単純な境界上にだけ点が存在するので、2 分木に近い構造になっているようである。

図-6と図-7に、パラメータ $M = 1, 4, 16, 32, 64$ として、自乗共役勾配法 (CGS 法) を用いたときの、一回の繰り返しあたりの計算時間と使用した総記憶容量を要素数に対して両対数グラフとしてプロットしたものを示す。繰り返しあたりの計算時間(図-6)を見ると、 M の値にかかわらず、グラフの勾配は約 1 で、計算量はほぼ $O(N)$ になっていることが確認できた。実際の計算時間は M の値が 1 より大きくなるにつれて指数的に減少し、 $M = 16$ および $M = 32$ で最小になっている。しかし、 M をさらに大きくしてみると $M = 64$ では逆に計算時間が大きくなっている。別の計算で $M = 24$ としてみたところ、 $M = 16, 32$ の場合とほぼ同じ結果を得たので、計算時間から見た M の最適値はほぼ 16 ~ 32 のあたりにあると推定できる。総記憶容量(図-7)の方を見ると、必要記憶容量は明らかに M が大きいほど小さい。高速多重極アルゴリズムにおいては、主な記憶容量は各セル毎の多重極展開の係数 M_n と Taylor 展開の係数 L_n との記憶に費やされるので、 M が大きくなれば必要なセルの総数が減少し、したがって、必要な記憶容量も減少する結果になっている。参考までに、LU 分解法を用いた通常の方法では、 $N = 10^3$ のとき、計算時間 163 秒、記憶容量 8.6MB、 $N = 2 \times 10^3$ のとき、計算時間 1,400 秒、記憶容量 33.2MB であった。

表-1に、 $M = 32$ のときの $N = 10^4$ および $N = 10^5$ の計算について、主な処理段階に要した計算時間をあげた。クラスター分割の段階では、要素代表点のソートを行なっているが、この処理に要する時間はわずかである。右辺の計算では行列ベクトル積の計算が一回、方程

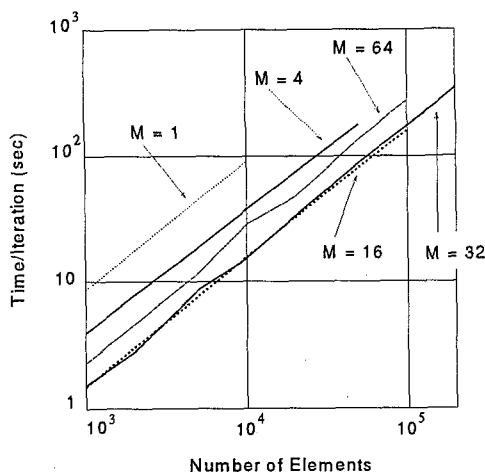


図-6 繰り返しあたりの計算時間

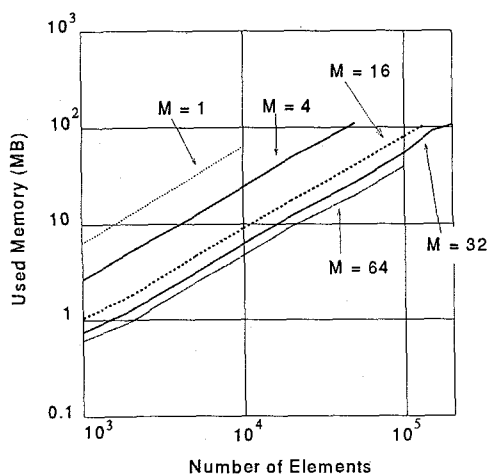


図-7 総記憶容量

式を解く際の一回の繰り返し計算では行列ベクトル積の計算が二回行なわれる。行列ベクトル積の計算時間が異なるのは、右辺では一重層の積分核が、左辺では二重層の積分核が使われるせいである。積分核の違いは近傍要素の計算時間の違いに現れる。さらに、右辺の計算では、計算の対象となる階層構造に対する最初の行列ベクトル積計算となるので、この段階で各セルに対する遠方-近傍の表を作成している。したがって、後の繰り返し計算段階よりも余分の処理をしていることになる。なお、この問題では方程式の解が収束するまでの繰り返し回数は2~3回であった。

以上の数値実験結果より、次のことが分かった。

- 計算量・記憶容量はともに $O(N)$ の程度である。
- 最小セルに含まれる要素の最大数が16~32のときに最も計算効率が良くなる。
- クラスター分割の計算時間は他に比べて小さい。

表-1 処理段階における計算時間: $M = 32$, 単位 秒

処理段階	$N = 10^4$	$N = 10^5$
クラスター分割	0.48	6.82
右辺の計算	14.32	169.22
一回の繰り返し	15.26	174.27

最小セルの最大要素数の最適値は、遠方要素の計算量と近傍要素の計算量との比率によって決定されるので、問題の種類や境界の形状などによって左右されることが考えられる。実際の解析においては、要素の大きさの分布がある幅を持っているので、最小要素の大きさに対して最大要素の大きさが15~50倍程度になるように要素分割を選んで、最小セルの大きさを最大要素の大きさにより決めるのが良いであろう。

5. 応用例

5.1 複雑な境界を持つ領域の解析

大規模数値解析の一例として、複雑な境界を持つ領域の解析を行ってみた。ここで取り上げた問題は、フラクタルな境界の容量を決定する問題であり、ポテンシャル論における基本的な問題の一つである。¹⁴⁾ 容量は外部 Dirichlet 問題

$$\begin{aligned} \nabla^2 u &= 0 & \text{in } B \\ u &= 1 & \text{on } \partial B \end{aligned}$$

を解き、境界上の $\partial u / \partial n$ を積分して

$$W = \frac{1}{2\pi} \int_{\partial B} \frac{\partial u}{\partial n} dS$$

から計算できる。2次元領域において対数容量は $C = \exp(-1/W)$ で与えられる。一般に、容量の値は、ポテンシャルの密度が分布する領域の幾何学的性質およびポテンシャルの特性によって決定される。またとくに、対数容量はΓ-境界(第1種積分方程式の解が不定となるようにスケーリングされた境界)を決定するパラメータともなっている。

ここで扱った境界形状は Koch 曲線による単一閉曲線¹⁵⁾である。Koch 曲線は、イニシエータと呼ばれる等辺図形の各辺をジェネレータと呼ばれる等長の辺からなる折れ線でおきかえ、さらに得られた図形の各辺を相似なジェネレータでおきかえるという操作を繰り返して得られる。極限として得られる曲線の次元は1~2の間にある。解析の対象としたのは、上の Koch 曲線の生成過程の各段階の曲線であり、通常が多辺形である。すなわち、図形の解像度を段階的に上げて極限を予測する計算を行なった。図-8に境界形状の例を示す。形状 A は、イニシエータを半径 0.1 の円に内接する正三角形、ジェネレータを4辺の折れ線としたもので、フラ

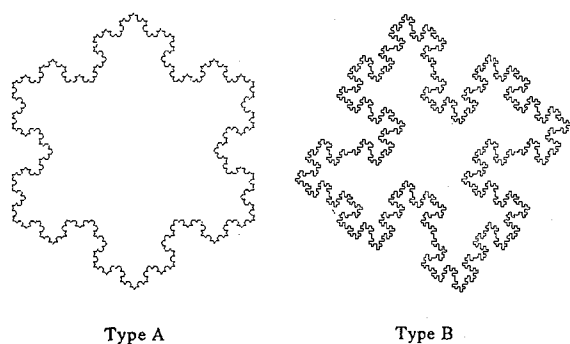


図-8 Koch 曲線境界

クタル次元は 1.2618 である。形状 B は、イニシエータを辺長 0.2 の正方形、ジェネレータを 8 辺の折れ線としたもので、フラクタル次元は 1.5 である。図はいずれも曲線生成過程の第 4 段階を示している。

表-2 に曲線生成の各段階における計算で得られた対数容量を示す。値の後ろのカッコ内は境界の総延長である。境界の長さは極めて早く増大するが、容量は生成過程の比較的早い段階から一定の値に近付いている。これらの値から予想される Γ -境界は、形状 A の場合は解析図形を約 11 倍、形状 B は約 7 倍したものである。

表-2 曲線生成過程の各段階における対数容量

生成段階	形状 A	形状 B
1	0.08427 (0.693)	0.1179 (0.8)
2	0.08823 (0.924)	0.1380 (1.6)
3	0.08964 (1.232)	0.1435 (3.2)
4	0.09022 (1.642)	0.1450 (6.4)
5	0.09038 (2.190)	—

計算によって得られた境界上の $\partial u / \partial n$ の例を図-9 に示す。それぞれ、図-8 で示した形状に対する解である。縦軸は $\partial u / \partial n$ を、横軸は境界の全長を正規化して表している。横軸の両端は図-8 における真上の頂点を示す。この問題の解は膜のアナロジーを考えれば想像がつく。外向きに尖った境界点が特異点となり、 $\partial u / \partial n$ の値が無限大となる。図では特異点に隣接する要素上の値が極端に大きくなっている。この値は境界の形状を反映した階段的な値をとっている。この解の変動の様子は、曲線生成過程の先の段階においても、見た目にはほとんど変わらない。全体的な解の分布は容量と同様に比較的低い生成段階で判別が可能である。極限の Koch 曲線に対する解を想像することは大変興味深い。そこでは、境界のいたる所に特異点が存在し $\partial u / \partial n$ はもはや意味を持たなくなる。しかし、その場合においても、図に示される解の全体的な分布には何らかの意

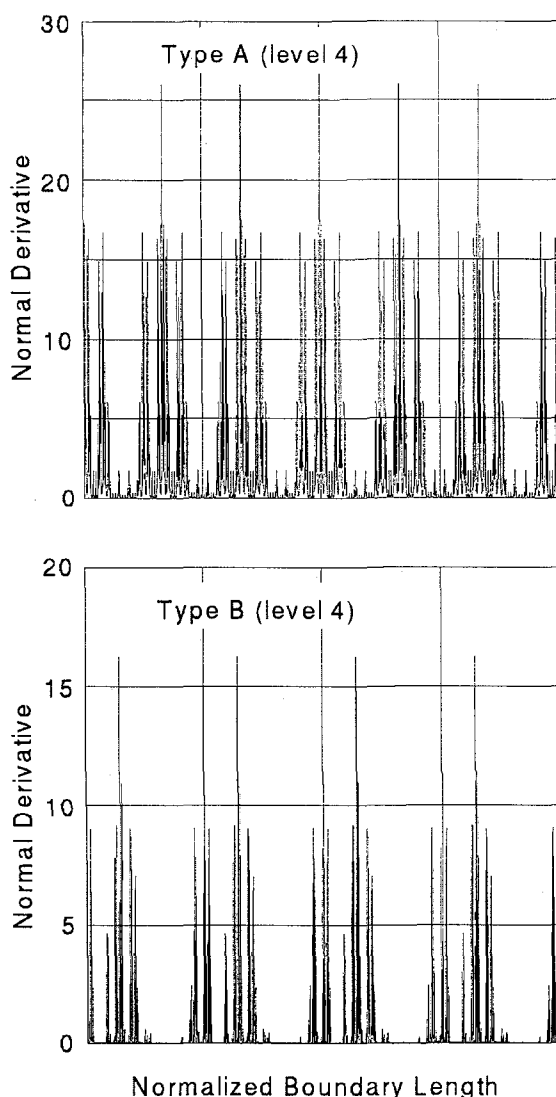


図-9 境界上の法線導関数の分布

味があると思われる。このような問題においては等価な物理現象としての解釈が有効であろうと考えられる(たとえば、この問題を一定温度の物体からの熱流出の問題だと解釈すれば、 $\partial u / \partial n$ は熱流束である)。

数値解析においては各辺を 5~20 要素に分割した。総要素数は、図-9 の場合において、形状 A が 7,680、形状 B が 10,240 であった。方程式の解法は前処理つき双共役勾配安定法 (Bi-CGSTAB 法) を用いた。この問題は極めて収束が遅く安定性の低い問題である。実際、7 桁の精度で収束させるために 40~90 回の繰り返し計算を必要とした。しかしながら、計算精度が低ければこのような問題では解が発散してしまうことが多いことを考慮すれば、むしろ収束解が得られていることに注目すべきであろう。なお、同じ形状の Neumann 問題を解いた場合には、はるかに少ない繰り返し回数で解が収束していることを付け加えておく。

5.2 渦法による流れの解析

高速多重極法が広く応用されはじめている分野の一つとして、渦法による流れの解析がある。著者らは渦法の一つの試みとして、離散渦の代わりに連続渦を利用する渦膜法¹⁶⁾を提唱してきた。これまでの渦膜法の問題点の一つは、解析時間の経過とともに渦要素の数が増大し、長時間の解析を続けることが困難なことであった。この問題は高速多重極法を利用することで解決することが可能となる。¹²⁾ 以下では、渦膜法における高速多重極アルゴリズムの応用例について述べる。これはまた、境界要素法で非線形解析をする場合に領域内要素を用いる一つの例でもある。

(1) 渦膜法

渦膜法についてごく簡単に説明する。2次元無限領域中に物体が存在し、その物体から渦膜が発生しているときの流れの場について考える (図-10)。流体の非

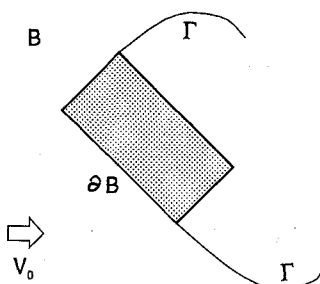


図-10 物体まわりの渦膜を伴う流れ

圧縮性を仮定すると、流れは (x_1, x_2) 面上の流れ関数 $\bar{\psi} = \psi_0 + \psi$ を用いて $v = \nabla \times \bar{\psi} k$ で与えられる。ここに、 ψ_0 は外部で与えられた流れであり、 ψ は物体が存在することによる流れの補正分と物体から発生する渦膜の存在による流れの補正分との和である。また、 k は x_3 軸方向の単位ベクトルである。渦度は物体から発生する渦膜上にだけ分布すると仮定し、その渦密度を γ とする。このとき、流れの支配方程式および境界条件は

$$\begin{aligned} \nabla^2 \psi &= -\gamma & \text{in } B \\ \psi &= -\psi_0 + c & \text{on } \partial B \end{aligned} \quad (22)$$

となる。ここで、境界条件に含まれる未定定数 c は Kelvin の循環定理

$$\int_{\partial B} \frac{\partial \psi}{\partial n} ds = - \int_{\Gamma} \gamma ds \quad (23)$$

を用いて決定することができる。結局、渦膜を伴う流れの問題は Poisson 方程式の外部 Dirichlet 境界値問題 (22) に付加条件 (23) が加わった問題となる。

いま、渦膜 Γ およびその上の渦密度 γ が与えられているとすると、 $\partial \psi / \partial n$ に関する境界積分方程式

$$\frac{1}{2}c - \int_{\partial B} G(x; y) \frac{\partial \psi}{\partial n}(y) ds_y = \int_{\Gamma} G(x; y) \gamma(y) ds_y$$

$$+ \frac{1}{2} \psi_0(x) + v \cdot p \cdot \int_{\partial B} \frac{\partial G(x; y)}{\partial n(y)} \psi_0(y) ds_y \quad (24)$$

が得られる。未知定数 c が方程式の中に入っていることに注意されたい。 c は (23) を付加条件とすることで決定できる。境界積分方程式は通常の方法で離散化される。このときに、渦膜も境界要素と同様に離散化する。

渦膜は剥離点で生成し、流体の流れに乗って移動する。渦膜法では、ある時刻において与えられた渦膜および渦密度に対して近似境界積分方程式を解き、流れの場を決定して、微小時間後の渦膜の位置と渦密度とを求め、という手順を繰り返して渦膜を追跡する。渦膜の追跡に用いる速度場は、渦膜要素の中心 x において、

$$v(x) = \nabla \times \psi_0(x) k + \sum_k \nabla \times A_k(x) \gamma_k k + \sum_i \nabla \times A_i(x) q_i k + \sum_i \nabla \times B_i(x) \psi_{0i} k \quad (25)$$

で与える。ここに、 $A_i(x)$ 、 $B_i(x)$ は (15) で定義した影響関数である。また、上式の右辺第二項においては自分自身の要素による影響は考慮しない。渦膜の移動には3次スプライン関数を用いて、渦膜が滑らかに移動するように配慮した。さらに、渦膜の伸び縮みに応じて渦膜要素の大きさがほぼ一定となるように要素数の増減を行なっている。

渦膜を追跡するためには、(25) により渦要素の位置における流速を計算する必要がある。解析が進むにつれて渦要素の数は増加していくので、解析が進んだ時点では、渦の要素数を N とすると、この計算に要する計算量はほぼ $O(N^2)$ となる。この計算を効率良く処理するために、最も計算量の多くなる (25) の右辺第二項

$$v(x) = \sum_k \nabla \times A_k(x) \gamma_k k$$

に高速多重極法を適用して解析を行なった。この場合には、ポテンシャルの値ではなくその勾配の値を求める計算になっている。

(2) 数値解析例

円柱まわりの流れを解析した結果を示す。解析は急出発流中に円柱がおかれたものとして行ない、基準時間 T_0 に対して時刻 $t = 90T_0$ まで計算を行なった。基準速度 V_0 は、円柱の半径 a と基準時間に対して、 $V_0 = 1.5a/T_0$ としている。解析では渦の強度を拡散させることにより粘性の効果を考慮している。相当する Reynolds 数は約 200 である。解析の時間増分は $T_0/4$ とした。

図-11は渦膜のクラスター分割の例である。渦膜法の場合には渦要素が移動するので、各解析ステップ毎に領域の分割が必要となる。また、要素長も各ステップ毎に変化しそのばらつきも大きいので、最小セルの大きさは最大の要素長を基準として各ステップ毎に決めている。図にも示されているように、渦膜は幾重にも重なりあって発達するので、解析が進んだ時点では数

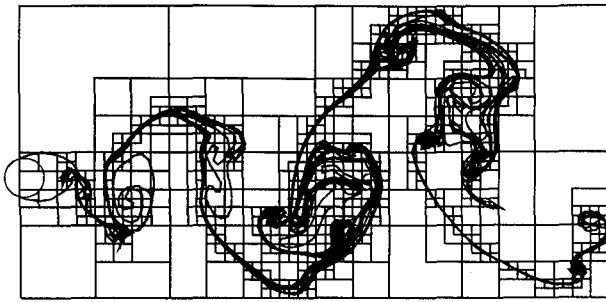


図-11 渦膜のクラスター分割

$t = 90T_0$

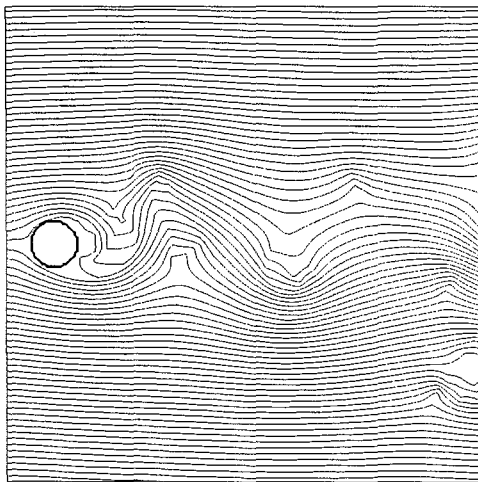
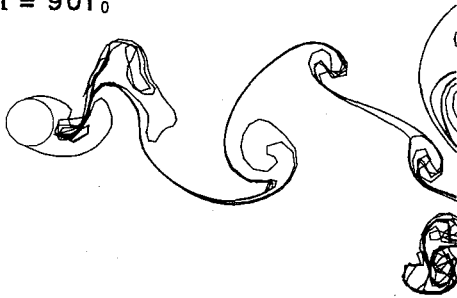


図-12 円柱の後流の渦膜と流線

100 の要素を含む葉のセルも現れる。図-12には最終ステップにおける渦膜(上図)と円柱まわりの流線(下図)の様子を示す。円柱の付近では渦が交互に発生しており、流れは定常的に Karman 渦を放出している状態にある。円柱の付近、とくに円柱のすぐ後ろ側では渦膜が交差して乱れているが、渦の発達とともにきれいに渦巻くようになる。渦膜がさらに円柱から遠ざかると、渦度の拡散によって渦を巻く力が弱まり、渦は大きく広がっていく。流線図では渦の形成と渦膜の分布の対応がよく見られる。この解析の最終ステップにおける渦要素数は、上側が 32,929、下側が 22,243 であった。

6. おわりに

高速多重極法を境界要素法に適用して、大規模計算における計算量および記憶容量を大幅に縮小させることを試みた。2次元ポテンシャル問題に適用した例で、計算量および記憶容量ともに $O(N)$ となること、最適なパラメータを選べば、これらはさらに $1/10$ 以下にすることができることを確認した。また、応用例においては、複雑で安定性の低い問題にも十分に適用できること、流体解析のような非線形性の強い問題にも適用可能ことが確認された。

この方法は多くの問題に適用できるものであり、境界要素法の適用可能性を大きく広げることを期待できる。

参考文献

- 1) Rokhlin, V. : Rapid solution of integral equations of classical potential theory, *J. Comp. Phys.*, **60**, pp. 187-207, 1985.
- 2) Barnes, J. and P. Hut : A hierarchical $O(N \log N)$ force-calculation algorithm, *Nature*, **324**(4), pp. 446-449, 1986.
- 3) Greengard, L. and V. Rokhlin : A fast algorithm for particle simulations, *J. Comp. Phys.*, **73**, pp. 325-348, 1987.
- 4) Warren M.S. and J.K. Salmon : Astrophysical N-body simulations using hierarchical tree data structures, *Supercomputing '92*, pp. 570-576, 1992.
- 5) Leathrum, J.F. : *Parallelization of the Fast Multipole Algorithm: Algorithm and Architecture Design*, PhD thesis, Duke University, 1992.
- 6) Warren, M.S. and J.K. Salmon : A portable parallel particle program, *Comp. Phys. Comm.*, **87**, pp. 266-290, 1995.
- 7) 渡辺修, 速水謙 : 多重極展開法を用いた境界要素法の高速度化, BEM・テクノロジー・コンファレンス論文集, 4 pp. 39-44, 1994.
- 8) 山田賢志, 速水謙 : 多重極展開法による二次元静弾性解析の高速度化, BEM・テクノロジー・コンファレンス論文集, 5, pp. 59-64, 1995.
- 9) 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 pp. 315-318, 1996.
- 10) 福井卓雄, 服部純一 : 多重極展開法による境界要素解析の効率化, 計算工学講演会論文集, 1 pp. 319-322, 1996.
- 11) 福井卓雄, 服部純一 : 高速多重極境界要素法における要素積分の評価法, BEM・テクノロジー・コンファレンス論文集, 6 pp. 51-56, 1996.
- 12) 福井卓雄・土居野優 : 渦膜法における高速多重極法の応用, BEM・テクノロジー・コンファレンス論文集, 6 pp. 45-50 1996.
- 13) 小国 力(編著) : 行列計算ソフトウェア —WS, スーパーコン, 並列計算機—, 丸善, 1991.
- 14) Landkof, N.S. : *Foundations of Modern Potential Theory*, (translated by A.P. Doohovskoy) Springer-Verlag, 1972.
- 15) マンデルブロ, B.B. (広中平祐 監訳) : フラクタル幾何学, 日経サイエンス社, 1985.
- 16) 登坂 宣好, 矢川 元基 : 計算力学 [III] —計算力学と境界要素法—, 渦膜法による角柱群のまわりの流れの解析, 養賢堂, pp. 201-216, 1992.

(1996 年 9 月 6 日 受付)