3次元スカラー波動問題に対する陰的 Runge-Kutta 法を用いた 演算子積分時間領域高速多重極境界要素法

Implicit Runge-Kutta Based Convolution Quadrature Time-domain Fast Multipole
Boundary Element Method for 3-D Scalar Wave Problems

丸山泰蔵*・斎藤隆泰**・廣瀬壮一***

Taizo MARUYAMA, Takahiro SAITOH and Sohichi HIROSE

*学生会員 東京工業大学大学院博士課程 情報環境学専攻 (〒 152-8552 東京都目黒区大岡山 2-12-1-W8-22)

**正会員 博士 (工学) 群馬大学大学院准教授 環境創生部門 (〒 376-8515 群馬県桐生市天神町 1-5-1)

***正会員 工学博士 東京工業大学大学院教授 情報環境学専攻 (〒 152-8552 東京都目黒区大岡山 2-12-1-W8-22)

This paper presents an implicit Runge-Kutta (IRK) based convolution quadrature time-domain fast multipole boundary element method (CQ-FMBEM). Application of a convolution quadrature method (CQM) to a time-domain boundary element method (BEM), which is called CQ-BEM, can improve numerical stability of time-stepping procedure. In recent researches, the IRK based CQ-BEM showed better performance than the conventional linear multistep based one regarding accuracy. However, the IRK based CQ-BEM requires more computational time and memory. Therefore, in this paper, the fast multipole method (FMM) is applied to the IRK based CQ-BEM for 3-D scalar wave propagation problems. The formulation of the IRK based CQ-BEM and the application of the FMM are described. The accuracy and computational efficiency of the proposal method are compared with the linear multistep based CQ-FMBEM by solving some numerical examples.

Key Words : Time-Domain BEM, Convolution Quadrature Method, Implicit Runge-Kutta Method, Wave Propagation, Fast Multipole Method

1. はじめに

本論文では、3次元スカラー波動問題に対する陰的 Runge-Kutta 法 (IRK: Implicit Runge-Kutta) を用いた演算子積分時間領域境界要素法 (CQ-BEM) に高速多重極法 (FMM: Fast Multipole Method) を適用し、その有効性について検討する。

非定常な波動解析を行う場合、開領域をそのまま取り扱える時間領域境界要素法 (TD-BEM: Time-Domain Boundary Element Method) が有効である。しかしながら、従来の TD-BEM を用いて安定に解析を進めるためには、要素長を l_e 、時間増分を Δt 、波速を c とした場合、 $l_e/(c\Delta t) \simeq 1$ 程度となるように各パラメータを決定する必要がある¹⁾。その一方で、近年、この時間ステップ解析の安定性を改善するために CQ-BEM が提案され、注目を集めている²⁾³⁾。

CQ-BEM とは、Lubich によって提案された畳込み積分を安定に計算する手法である演算子積分法 (CQM: Convolution Quadrature Method)⁴⁾を TD-BEM に適用した数値解析手法であり、従来の TD-BEM と比較して、時間増分が小さい場合でも安定であることや、Laplace 変換領域基本解を用いるため、粘弾性波動問題のような時間領域基本解を閉じた形で求めることが困難な問題に対しても、比較的容易に解を構成できると

いった利点を持つ。そのため、非定常な波動問題に対して有効な手法であり、これまでに様々な問題への適用が行われてきた⁵⁾⁶⁾。

これまで線形多段法を用いた CQM が多く用いられてきたが、その一方で、IRK 法を用いた CQM⁷⁾も Lubich らによって提案されている。近年、Calvo ら⁸⁾、Banjai ら⁹⁾¹⁰⁾によって、安定性、及び誤差の数学的な検証が行われている。また、Monegato ら¹¹⁾によって、様々な偏微分方程式の基本解を積分核とした畳込み積分の精度の検証が行われている。これらの研究から、線形多段法を用いた CQM よりも畳込み積分を精度良く計算できることが明らかになってきている。さらに、様々な工学的問題への応用のために IRK 法を用いた CQ-BEM も開発され¹²⁾¹³⁾、時間方向に関する精度の優位性が示れつつある。

しかしながら、IRK 法を用いた CQ-BEM は後に示すように、IRK 法の係数パラメータの段数 m に依存して計算量、必要記憶容量がそれぞれ m^2 倍程度増大するといった問題がある。さらに、3次元波動問題の場合には、要素数の増加に伴う計算量や必要記憶容量の増加が懸念されるばかりか、波動問題に対してどのような CQM を用いれば、実用上どの程度の解析精度が保たれるか等の検証などは不十分であると思われる。

そこで、本研究では、これらの問題点を踏まえ、計算

図-1 3次元スカラー波動問題に対する解析モデル

効率を向上させるために、境界要素法の代表的な高速化手法の一つである高速多重極法を適用し、IRK法を用いた演算子積分時間領域高速多重極境界要素法 (CQ-FMBEM) の開発を行う。

以下では、まず、解析モデルの説明を行い、IRK法を用いたCQM、及びCQ-BEMの定式化を示す。次に、高速多重極法の適用方法、及びCQ-BEMへの適用時に必要となる定式化について説明する。最後に、数値解析例を示し、本手法の妥当性・有効性を検討する。

2. 解析モデル

以下では、3次元直交座標系を用い、 $(\cdot)$ は時間微分を表すこととする。

図-1のような無限領域Ω内に閉じた境界面Sを有する散乱体が存在する場合の外部散乱問題を考える。このとき、3次元スカラー波動問題に対する波動方程式は圧力 $p(\mathbf{x}, t)$ に関して次のように与えられる。

$$c^2 \nabla^2 p(\mathbf{x}, t) - \ddot{p}(\mathbf{x}, t) = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega \quad (1)$$

ここで、 t は時間、 c は領域Ω内を伝搬する波動の速度を表している。式(1)に対する積分方程式を導き、界面Sに対して極限操作を行い、時間領域境界積分方程式を導出すると次のようになる。

$$C(\mathbf{x})p(\mathbf{x}, t) = p^{\text{in}}(\mathbf{x}, t) + \int_S G(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) * q(\mathbf{y}, t) dS_y - \int_S S(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) * p(\mathbf{y}, t) dS_y \quad (2)$$

ここで、 $G(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$ 、 $S(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$ は3次元スカラー波動問題に対する時間領域基本解、及び対応する二重層核であり、 $C(\mathbf{x})$ は境界形状に依存する自由項¹⁴⁾を表している。また、 $p^{\text{in}}(\mathbf{x}, t)$ は入射波の圧力、 $q(\mathbf{x}, t)$ は圧力の法線方向勾配であり、 $q(\mathbf{x}, t) = \partial p(\mathbf{x}, t) / \partial n(\mathbf{x})$ 、 $*$ は時間 t に関する畳込み積分、式(2)の右辺第3項の f はCauchyの主値の意味で積分を評価することを表している。以下では、IRK法を用いたCQMにより、式(2)の離散化を行う。

3. IRK法を用いたCQM

式(2)の離散化を行う前に、Lubichによって提案されたIRK法を用いたCQMについて説明しておく。CQMは畳込み積分をLaplace変換領域の積分核を用いた離散化畳込み積分によって近似する手法である(詳しい条件については文献⁷⁾¹³⁾等を参照)。Lubichに倣い、A安定なIRK法の一つである m 段のRadau IIA法を用いたCQMで畳込み積分を離散化することを考える。Radau IIA法では、Butcherの係数パラメータ

$$\begin{cases} \mathbf{A} = (a_{ij}), & (1 \leq i, j \leq m) \\ \mathbf{b} = (b_1, \dots, b_m)^T \\ \mathbf{c} = (c_1, \dots, c_m)^T \end{cases} \quad (3)$$

が次の条件

$$0 < c_1 < \dots < c_m = 1, \quad b_i = a_{mi}, (i = 1, \dots, m) \quad (4)$$

を満足する。Radau IIA法における係数パラメータの計算手法、詳しい説明に関しては例えば、文献¹⁵⁾を参照されたい。

今、畳込み積分を含む次の方程式

$$u(t) = k(t) * g(t) \left(\equiv \int_0^t k(t-\tau)g(\tau)d\tau \right), \quad (t > 0) \quad (5)$$

に対してIRK法を用いたCQMを適用し、時間 t を時間増分 Δt を用いて N ステップに分割すると次のように近似することができる。

$$U_n \simeq \Delta t \sum_{k=0}^n W_{n-k} G_k, \quad (n = 0, \dots, N-1) \quad (6)$$

ここで、 U_n 、 G_n はIRK法の標本点により構成される m 個の成分を持つベクトルであり、次のように表される。

$$U_n = (u((n+c_j)\Delta t))_{j=1}^m \quad (7)$$

$$G_n = (g((n+c_j)\Delta t))_{j=1}^m \quad (8)$$

一方、式(6)の W_n は $m \times m$ の成分を持つ第 n ステップ目の重み関数行列であり、生成多項式の表現を用いて次のように表される。

$$\Delta t \sum_{n=0}^{\infty} W_n \zeta^n = \sum_{\beta=1}^m K(\lambda_\beta) \mathbf{E}_\beta(\zeta) \quad (9)$$

$$\mathbf{E}_\beta(\zeta) = \lim_{s \rightarrow \lambda_\beta} (\lambda_\beta - s) \left(\frac{\Upsilon(\zeta)}{\Delta t} - sI \right)^{-1} \quad (10)$$

$$\Upsilon(\zeta) = \left(\mathbf{1} \mathbf{b}^T \frac{\zeta}{1-\zeta} + \mathbf{A} \right)^{-1} \quad (11)$$

ここで、 $\mathbf{1}$ は $\mathbf{1} = (1, \dots, 1)^T$ 、 I は単位行列、 λ_β は $m \times m$ 行列 $\Upsilon(\zeta)/\Delta t$ の固有値であり、 $K(s)$ は $k(t)$ のLaplace変換である。式(9)をCauchyの積分公式、及び台形則

を用いて離散化近似すると以下の表現を得る.

$$\begin{aligned} \Delta t W_n &= \frac{1}{2\pi i} \int_{|\zeta|=\mathcal{R}} \left[\sum_{\beta=1}^m K(\lambda_\beta) \mathbf{E}_\beta(\zeta) \right] \zeta^{-n-1} d\zeta \\ &\simeq \mathcal{F}_l^n \left[\sum_{\beta=1}^m K(\lambda_\beta^l) \mathbf{E}_\beta(\zeta_l) \right] \end{aligned} \quad (12)$$

このとき, ζ_l は半径 $\mathcal{R} < 1$ の円周上の等分点 $l = 0, \dots, L-1$ を考えることによって, $\zeta_l = \mathcal{R} \exp(2\pi i l / L)$ と表される. また, i は虚数単位, $\mathcal{F}_l^n$ は次式で定義される離散 Fourier 変換を表している.

$$\mathcal{F}_l^n[\phi_l] = \frac{\mathcal{R}^{-n}}{L} \sum_{l=0}^{L-1} [\phi_l] e^{-\frac{2\pi i n l}{L}} \quad (13)$$

ここで, $\mathcal{R}$ は目標とする精度によって表される CQM のパラメータであり, 式 (13) で表される離散 Fourier 変換は $L = N$ とすることで, FFT を用いて $O(L \log L)$ のオーダーで計算することができる. そこで, 本研究では, Lubich によって提案されている, 誤差パラメータ ϵ を用いて $\mathcal{R}^L = \sqrt{\epsilon}$, $L = N$ とするパラメータの選択方法を用いる. このパラメータの選択方法を用いたとき, 式 (12) の近似による相対誤差は $O(\sqrt{\epsilon})$ となる⁴⁾.

4. IRK 法を用いた CQ-BEM

境界積分方程式 (2) に IRK 法を用いた CQM を適用することを考える. 以下では, 境界 S を M 個の一定要素で離散化近似するものとし, 時間に関する畳込み積分を IRK 法を用いた CQM で離散化すれば, 次の式を得る.

$$\begin{aligned} C(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}, (n + c_i) \Delta t) &= p^{\text{in}}(\mathbf{x}, (n + c_i) \Delta t) \\ &+ \sum_{k=0}^n \sum_{\alpha=1}^M \sum_{j=1}^m \left[A_\alpha^{ij;n-k}(\mathbf{x}) q_\alpha((k + c_j) \Delta t) \right. \\ &\quad \left. - B_\alpha^{ij;n-k}(\mathbf{x}) p_\alpha((k + c_j) \Delta t) \right], \\ (i &= 1, \dots, m), \quad (n = 0, \dots, N-1) \end{aligned} \quad (14)$$

ここで, α はソース点の要素番号である. 式 (4) より, IRK 法を用いた CQM によって離散化された境界積分方程式 (14) は時刻 $c_1 \Delta t$ から $(n+1) \Delta t$ に対する式となっていることがわかる. 一方, $A_\alpha^{ij;\kappa}(\mathbf{x})$, 及び $B_\alpha^{ij;\kappa}(\mathbf{x})$ は IRK 法を用いた CQM を適用することにより得られる 3 次元スカラー波動問題の基本解, 及び二重層核に対する影響関数, $\mathbf{A}_\alpha^\kappa(\mathbf{x})$, 及び $\mathbf{B}_\alpha^\kappa(\mathbf{x})$ はそれらに対する $m \times m$ の影響関数行列であり, 重み関数行列の表現

(12) によって次のように表される.

$$A_\alpha^{ij;\kappa}(\mathbf{x}) = (\mathbf{A}_\alpha^\kappa(\mathbf{x}))_{ij}, \quad B_\alpha^{ij;\kappa}(\mathbf{x}) = (\mathbf{B}_\alpha^\kappa(\mathbf{x}))_{ij} \quad (15)$$

$$\mathbf{A}_\alpha^\kappa(\mathbf{x}) = \mathcal{F}_l^\kappa \left[\sum_{\beta=1}^m \int_{S_\alpha} \hat{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \lambda_\beta^l) dS_y \mathbf{E}_\beta(\zeta_l) \right] \quad (16)$$

$$\mathbf{B}_\alpha^\kappa(\mathbf{x}) = \mathcal{F}_l^\kappa \left[\sum_{\beta=1}^m \int_{S_\alpha} \hat{S}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \lambda_\beta^l) dS_y \mathbf{E}_\beta(\zeta_l) \right] \quad (17)$$

ここで, $\hat{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, s)$, 及び $\hat{S}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, s)$ は 3 次元スカラー波動問題に対する Laplace 変換領域基本解, 及び対応する二重層核であり, 次のように表される.

$$\hat{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, s) = \frac{1}{4\pi r} e^{-s_c r} \quad (18)$$

$$\hat{S}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, s) = \frac{\partial \hat{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, s)}{\partial n(\mathbf{y})} \quad (19)$$

ここで, $s_c = s/c$ であり, s は Laplace パラメータである. 式 (14) において, 第 n ステップにおける境界物理量を左辺, その他を右辺に移項し, 整理すると次のような表現を得ることができる.

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=1}^M \sum_{j=1}^m \left[\left\{ C(\mathbf{x}) \delta_{ij} \tilde{\delta}_{x_\alpha} + B_\alpha^{ij;0}(\mathbf{x}) \right\} p_\alpha((n + c_j) \Delta t) \right. \\ \left. - A_\alpha^{ij;0}(\mathbf{x}) q_\alpha((n + c_j) \Delta t) \right] &= p^{\text{in}}(\mathbf{x}, (n + c_i) \Delta t) \\ &+ \sum_{k=0}^{n-1} \sum_{\alpha=1}^M \sum_{j=1}^m \left[A_\alpha^{ij;n-k}(\mathbf{x}) q_\alpha((k + c_j) \Delta t) \right. \\ &\quad \left. - B_\alpha^{ij;n-k}(\mathbf{x}) p_\alpha((k + c_j) \Delta t) \right] \end{aligned} \quad (20)$$

ここで, δ_{ij} は Kronecker のデルタであり, $\tilde{\delta}_{x_\alpha}$ は $\mathbf{x}$ が α 番目の要素と一致するときに $\tilde{\delta}_{x_\alpha} = 1$, その他の場合はゼロとなる指標である. 式 (20) より, IRK 法の段数を m , 要素数 M , 及び総時間ステップ数 N とすれば, 合計 mMN 個の未知数, 及び方程式が存在することがわかる. よって適当な直接法や反復法を用いることにより, mMN 個の境界未知量を求めることができる.

本研究では, 高速多重極法を適用し, 代数方程式 (20) の求解を反復解法によって行うのだが, 反復計算毎に, ゼロステップ目の影響関数から構成される係数行列を計算する必要がある. しかしながら, 式 (16), (17) の表現を用い, 全てのステップにおける影響関数を同時に計算すると, 反復計算一回あたりの計算量が大きくなる. そこで, ゼロステップ目の影響関数のみ高速に計算することによる, 代数方程式求解の高速化を行う. 計算方法の詳細は後の 5.4 節で説明する.

5. 高速多重極法の適用

式 (20) で表される代数方程式を高速多重極法を用いて解くことを考える. 高速多重極法の詳細については文献¹⁴⁾¹⁶⁾等を参照されたい. 以下では, 高速多重極法

を CQ-BEM に適用した方法 (CQ-FMBEM) の計算手順, 必要となる多重極展開, 局所展開, 及び移動公式を示す. 一般に, CQ-FMBEM ではアンダーフロー, オーバーフローを防ぐために, セルの対角長を用いたスケールリング, 及び M2L の切り捨てを行う必要がある. 本研究では, 文献²⁾³⁾¹⁷⁾に基づいた処理を行う. 最後に, ゼロステップ目の影響関数の計算方法を示す.

5.1 時間ステップ解析

高速多重極法を適用し, 式 (20) 右辺の行列ベクトル積を計算する時間ステップ解析について説明する. 例として, 基本解に対応する影響関数 $A_{\alpha}^{ij;\kappa}(\mathbf{x})$ を含む項 (式 (20) の右辺第二項) の計算手順を示す. 今, 対象とする式 (20) の右辺第二項は, ベクトル表記を用いて表すと次のようになる.

$$\mathbf{u}_A^n(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{n-1} \sum_{\alpha=1}^M \mathbf{A}_{\alpha}^{n-k}(\mathbf{x}) \mathbf{q}_{\alpha}^k \quad (21)$$

ここで, $\mathbf{q}_{\alpha}^k$ は $(\mathbf{q}_{\alpha}^k)_j = q_{\alpha}((k+c_j)\Delta t)$ である. 式 (16) に含まれている離散 Fourier 変換, 及び β についての総和に関する部分を境界積分の外側に移動させれば, 式 (21) における $\sum_{\alpha=1}^M \mathbf{A}_{\alpha}^{\kappa}(\mathbf{x}) \mathbf{q}_{\alpha}^k$ は次のように表すことができる.

$$\sum_{\alpha=1}^M \mathbf{A}_{\alpha}^{\kappa}(\mathbf{x}) \mathbf{q}_{\alpha}^k = \mathcal{F}_l^{\kappa} \left[\sum_{\beta=1}^m \left\{ \sum_{\alpha=1}^M \mathbf{E}_{\beta}(\zeta_l) \mathbf{q}_{\alpha}^k \times \int_{S_{\alpha}} \hat{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \lambda_{\beta}^l) dS_{\mathbf{y}} \right\} \right] \quad (22)$$

式 (22) 左辺を評価するために, まず, 式 (22) の $\{ \}$ 内を高速多重極法により計算する. 次に, β に関する総和, 離散 Fourier 変換の順に計算を行う. この計算手順の場合, 離散 Fourier 変換により, 第 k ステップ目の境界値 $\mathbf{q}_{\alpha}^k$ と影響関数行列 $\mathbf{A}_{\alpha}^{\kappa}(\mathbf{x})$, ($\kappa = 0, \dots, N-1$) による行列ベクトル積が同時に求まる.

これより, 遅延ポテンシャルの計算は, 引数 $\mathbf{x}$ を省略し, $\sum_{\alpha=1}^M \mathbf{A}_{\alpha}^{\kappa} \mathbf{q}_{\alpha}^k = \mathbf{A}^{\kappa} \mathbf{q}^k$ として, 遅延ポテンシャル $\mathbf{u}_A^n$ を行列表現すれば, 次のようになる.

$$\begin{bmatrix} \mathbf{u}_A^0 \\ \mathbf{u}_A^1 \\ \mathbf{u}_A^2 \\ \mathbf{u}_A^3 \\ \vdots \\ \mathbf{u}_A^n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{A}^1 \mathbf{q}^0 \\ \mathbf{A}^2 \mathbf{q}^0 + \mathbf{A}^1 \mathbf{q}^1 \\ \mathbf{A}^3 \mathbf{q}^0 + \mathbf{A}^2 \mathbf{q}^1 + \mathbf{A}^1 \mathbf{q}^2 \\ \vdots \\ \mathbf{A}^n \mathbf{q}^0 + \dots + \mathbf{A}^1 \mathbf{q}^{n-1} \end{bmatrix} \quad (23)$$

つまり, 第 k ステップ目の $\mathbf{q}^k$ が求めれば, 式 (22) の計算によって上式の $\mathbf{q}^k$ に関する項が全て計算されることになる. 同様に, 式 (20) 右辺の二重層核に対応する影響関数を含む項も計算することができる. したがって, 初期条件を考慮することにより, ゼロステップ目から順に時間ステップ解析を行うことが可能となる.

5.2 多重極展開, 局所展開, 移動公式

3 次元スカラー波動問題に対する Laplace 変換領域基本解の多重極展開, 局所展開, 移動公式は周波数領域基本解に対する表現¹⁸⁾と同様の手順で導くことができる. 本研究では Wigner-3j symbol¹⁹⁾を用いた定式化を行う.

今, 3 次元スカラー波動問題に対する Laplace 変換領域基本解を含む多重極展開を次のように定義する.

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{\beta}(\zeta_l) \mathbf{q}_{\alpha}^k & \int_{S_{\alpha}} \hat{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, s) dS_{\mathbf{y}} \\ & = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \mathcal{A}_n M_{n,m}^G(\mathbf{y}_0) O_{n,m}(\mathbf{x} - \mathbf{y}_0), \\ & \quad (|\mathbf{y} - \mathbf{y}_0| < |\mathbf{x} - \mathbf{y}_0|) \quad (24) \end{aligned}$$

ここで, $\mathcal{A}_n = s_c(2n+1)/4\pi$ であり, $M_{n,m}^G(\mathbf{y}_0)$ は基本解に対する多重極モーメントである. このとき, 式 (24) 左辺に含まれる指標 β, l, k, α は, 煩雑になるため省略している. 基本解, 及び二重層核に対する多重極モーメント $M_{n,m}^G(\mathbf{y}_0)$, $M_{n,m}^S(\mathbf{y}_0)$ はそれぞれ次のように表される.

$$M_{n,m}^G(\mathbf{y}_0) = \mathbf{E}_{\beta}(\zeta_l) \mathbf{q}_{\alpha}^k \int_{S_{\alpha}} \bar{F}_{n,m}(\mathbf{y} - \mathbf{y}_0) dS_{\mathbf{y}} \quad (25)$$

$$M_{n,m}^S(\mathbf{y}_0) = \mathbf{E}_{\beta}(\zeta_l) \mathbf{p}_{\alpha}^k \int_{S_{\alpha}} \frac{\partial \bar{F}_{n,m}(\mathbf{y} - \mathbf{y}_0)}{\partial n(\mathbf{y})} dS_{\mathbf{y}} \quad (26)$$

ここで, $\mathbf{p}_{\alpha}^k$ は $(\mathbf{p}_{\alpha}^k)_j = p_{\alpha}((k+c_j)\Delta t)$ である. また, 関数 $O_{n,m}(\mathbf{x})$, $F_{n,m}(\mathbf{x})$, $\bar{F}_{n,m}(\mathbf{x})$ を次のように定義した.

$$O_{n,m}(\mathbf{x}) = k_n(s_c|\mathbf{x}|) Y_n^m(\hat{\mathbf{x}}) \quad (27)$$

$$F_{n,m}(\mathbf{x}) = i_n(s_c|\mathbf{x}|) Y_n^m(\hat{\mathbf{x}}) \quad (28)$$

$$\bar{F}_{n,m}(\mathbf{x}) = i_n(s_c|\mathbf{x}|) \bar{Y}_n^m(\hat{\mathbf{x}}) \quad (29)$$

ただし, $i_n(x)$, $k_n(x)$ はそれぞれ第一種, 第二種変形球 Bessel 関数であり, 第一種, 第二種変形 Bessel 関数 $I_n(x)$, $K_n(x)$ を用いて次のように表される²⁰⁾.

$$i_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} I_{n+\frac{1}{2}}(x), \quad k_n(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} K_{n+\frac{1}{2}}(x) \quad (30)$$

一方, $Y_n^m(\hat{\mathbf{x}})$ は球面調和関数であり, 次のように定義している.

$$Y_n^m(\hat{\mathbf{x}}) = \sqrt{\frac{(n-m)!}{(n+m)!}} P_n^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (31)$$

このとき, $P_n^m(x)$ は Legendre 陪関数であり, θ, ϕ はそれぞれ位置ベクトル $\mathbf{x}$ の天頂角, 方位角を表している. また, $\bar{Y}_n^m(\hat{\mathbf{x}})$ は $Y_n^m(\hat{\mathbf{x}})$ の複素共役であり, $\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x}/|\mathbf{x}|$ である.

次に, 多重極展開 (24) に対して, 局所展開を

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{\beta}(\zeta_l) \mathbf{q}_{\alpha}^k & \int_{S_{\alpha}} \hat{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, s) dS_{\mathbf{y}} \\ & = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \mathcal{A}_n L_{n,m}^G(\mathbf{x}_0) F_{n,m}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0), \\ & \quad (|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0| < |\mathbf{y} - \mathbf{x}_0|) \quad (32) \end{aligned}$$

図-2 展開移動公式の概念図

で定義する. ここで, $L_{n,m}^G(\mathbf{x}_0)$ は局所展開係数である. 多重極点の移動による多重極モーメントの変換 (M2M), 多重極展開から局所展開への変換 (M2L), 局所展開点の移動による局所展開係数の変換 (L2L) は次のように表される.

$$M_{n,m}(\mathbf{y}_1) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{j=-l}^l \sum_{h=|n-l|}^{n+l} (-1)^j \mathcal{B}_{l,h} W_{-m,j,m-j}^{n,l,h} \times F_{h,j-m}(\mathbf{y}_0 - \mathbf{y}_1) M_{l,j}(\mathbf{y}_0) \quad : \text{M2M} \quad (33)$$

$$L_{n,m}(\mathbf{x}_1) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{j=-l}^l \sum_{h=|n-l|}^{n+l} (-1)^{n+j} \mathcal{B}_{l,h} W_{-m,j,m-j}^{n,l,h} \times O_{h,j-m}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{y}_1) M_{l,j}(\mathbf{y}_1) \quad : \text{M2L} \quad (34)$$

$$L_{n,m}(\mathbf{x}_0) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{j=-l}^l \sum_{h=|n-l|}^{n+l} (-1)^j \mathcal{B}_{l,h} W_{-m,j,m-j}^{n,l,h} \times F_{h,j-m}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0) L_{l,j}(\mathbf{x}_1) \quad : \text{L2L} \quad (35)$$

ここで, $W_{m,k,j}^{n,l,i}$ は Wigner-3j symbol $\begin{pmatrix} n & l & i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n & l & i \\ m & k & j \end{pmatrix}$ により, 次のように与えられる.

$$W_{m,k,j}^{n,l,i} = \begin{pmatrix} n & l & i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n & l & i \\ m & k & j \end{pmatrix} \quad (36)$$

また, $\mathcal{B}_{n,m} = (2n+1)(2m+1)$ であり, 各展開点は図-2 のような位置関係にある.

さて, 式 (33)-(35) の移動公式の計算量は無限和を展開項数 N_t で打ち切る場合, それぞれ $O(N_t^5)$ である. そのため, N_t が大きい場合は計算量を軽減する工夫が必要となる. 例えば, 式 (31) で定義される球面調和関数は $(\theta, \phi) = (0, 0)$ のとき,

$$Y_n^m(\hat{\mathbf{x}}) = \begin{cases} 1 & (m=0) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (37)$$

となる. そこで, 球面調和関数に対する座標軸回転作用素 $D_{mk}^n(\mathbf{R})$ (計算方法は Appendix I を参照) を用いれば, 移動公式 (33)-(35) に含まれる総和を一つキャンセルし, 計算を高速化できる. 球面調和関数に対する座標軸回転の移動公式への適用方法は, 例えば文献²¹⁾を参照されたい. 球面調和関数に対する座標軸回転を用いた場合, 式 (33)-(35) における M2M, M2L, L2L はそれ

ぞれ次のように書き直される.

$$\begin{cases} \tilde{M}_{n,k}(\mathbf{y}_0) = \sum_{m=-n}^n M_{n,m}(\mathbf{y}_0) D_{km}^n(\mathbf{R}^T) \\ \tilde{M}_{l,k}(\mathbf{y}_1) = \sum_{n=|k|}^{\infty} \sum_{h=|n-l|}^{n+l} (-1)^k \mathcal{B}_{n,h} W_{k,-k,0}^{n,l,h} \times i_h(s_c |\mathbf{y}_0 - \mathbf{y}_1|) \tilde{M}_{n,k}(\mathbf{y}_0) \\ M_{l,m}(\mathbf{y}_1) = \sum_{k=-l}^l \tilde{M}_{l,k}(\mathbf{y}_1) D_{mk}^l(\mathbf{R}) \quad : \text{M2M} \end{cases} \quad (38)$$

$$\begin{cases} \tilde{M}_{n,k}(\mathbf{y}_1) = \sum_{m=-n}^n M_{n,m}(\mathbf{y}_1) D_{km}^n(\mathbf{R}^T) \\ \tilde{L}_{l,k}(\mathbf{x}_1) = \sum_{n=|k|}^{\infty} \sum_{h=|n-l|}^{n+l} (-1)^{l+k} \mathcal{B}_{n,h} W_{k,-k,0}^{n,l,h} \times k_h(s_c |\mathbf{y}_1 - \mathbf{x}_1|) \tilde{M}_{n,k}(\mathbf{y}_1) \\ L_{l,m}(\mathbf{x}_1) = \sum_{k=-l}^l \tilde{L}_{l,k}(\mathbf{x}_1) D_{mk}^l(\mathbf{R}) \quad : \text{M2L} \end{cases} \quad (39)$$

$$\begin{cases} \tilde{L}_{n,k}(\mathbf{x}_1) = \sum_{m=-n}^n L_{n,m}(\mathbf{x}_1) D_{km}^n(\mathbf{R}^T) \\ \tilde{L}_{l,k}(\mathbf{x}_0) = \sum_{n=|k|}^{\infty} \sum_{h=|n-l|}^{n+l} (-1)^k \mathcal{B}_{n,h} W_{k,-k,0}^{n,l,h} \times i_h(s_c |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0|) \tilde{L}_{n,k}(\mathbf{x}_1) \\ L_{l,m}(\mathbf{x}_0) = \sum_{k=-l}^l \tilde{L}_{l,k}(\mathbf{x}_0) D_{mk}^l(\mathbf{R}) \quad : \text{L2L} \end{cases} \quad (40)$$

式 (38)-(40) はそれぞれ 3 つの式から成る. それらの第一式は, 式 (37) の関係を使うための座標軸回転を示している. 一方, 第二式は新たな座標系における移動公式を, 第三式は元の座標系に戻すための座標軸回転を示している. このとき, 展開点の移動に伴う位置ベクトルの座標軸回転行列 $\mathbf{R}$ はそれぞれの移動公式に対して次のように定義した.

$$\begin{cases} (\mathbf{y}_0 - \mathbf{y}_1)\mathbf{R} = |\mathbf{y}_0 - \mathbf{y}_1|\mathbf{e}_3 \quad : \text{M2M} \\ (\mathbf{x}_1 - \mathbf{y}_1)\mathbf{R} = |\mathbf{x}_1 - \mathbf{y}_1|\mathbf{e}_3 \quad : \text{M2L} \\ (\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_1)\mathbf{R} = |\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_1|\mathbf{e}_3 \quad : \text{L2L} \end{cases} \quad (41)$$

ここで, $\mathbf{e}_i$ は直交座標系の基底ベクトルである.

5.3 スケーリング, 及び M2L の切り捨て

CQ-FMBEM を用いて高速多重極法の計算を安定に解析するために必要な方法の説明を行う. 式 (30) で表される変形球 Bessel 関数 $i_n(z)$, $k_n(z)$ は引数 $|z|$ が大きいとき,

$$i_n(z) \sim \frac{e^z}{2z}, \quad k_n(z) \sim \frac{e^{-z}}{z} \quad (42)$$

である²⁰⁾. M2M, L2L の展開点移動公式に $i_n(z)$ が使われるため, セルのサイズが大きい場合には, 変換によ

図-3 M2M の場合のスケーリング

て展開係数の値が発散したり、あるいは $i_n(z)$ そのものが発散する可能性がある。したがって、多重極展開、及び局所展開に適切なスケーリングを施すことが安定なアルゴリズムのために必須となる²⁾³⁾。

スケーリングされた変形球 Bessel 関数を

$$\check{i}_n(z) = e^{-z} i_n(z), \quad \check{k}_n(z) = e^z k_n(z) \quad (43)$$

とする。図-3 のように、セル C_ρ (ρ はセルの対角長の半分の長さを表す) におけるスケーリングされた多重極モーメント $\rho \mathcal{M}_{n,m}$ 、局所展開係数 $\rho \mathcal{L}_{n,m}$ 、及び関数 $\rho \mathcal{F}_{n,m}$ 、 $\rho \mathcal{O}_{n,m}$ を、それぞれ

$$\rho \mathcal{M}_{n,m} = e^{-s_c \rho} M_{n,m}, \quad \rho \mathcal{L}_{n,m} = e^{s_c \rho} L_{n,m} \quad (44)$$

$$\rho \mathcal{F}_{n,m} = e^{-s_c \rho} F_{n,m}, \quad \rho \mathcal{O}_{n,m} = e^{s_c \rho} O_{n,m} \quad (45)$$

と定義すると、スケーリングされた基本解の多重極展開、及び局所展開は式 (24)、(32) より、

$$\begin{aligned} E_\beta(\zeta_l) \mathbf{q}_\alpha^k \int_{S_\alpha} \hat{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, s) dS_y &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \mathcal{A}_n e^{s_c(\rho-\varrho)} \\ &\times \rho \mathcal{M}_{n,m}^G(\mathbf{y}_0)_\varrho \mathcal{O}_{n,m}(\mathbf{x} - \mathbf{y}_0) \end{aligned} \quad (46)$$

$$\begin{aligned} E_\beta(\zeta_l) \mathbf{q}_\alpha^k \int_{S_\alpha} \hat{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, s) dS_y &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \mathcal{A}_n e^{s_c(\varrho-\rho)} \\ &\times \rho \mathcal{L}_{n,m}^G(\mathbf{x}_0)_\varrho \mathcal{F}_{n,m}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \end{aligned} \quad (47)$$

となる。また、スケーリングされた移動公式は定義 (44)、(45)、及び多重極展開 (46)、局所展開 (47) を移動公式 (38)-(40) に用いれば導くことができる。例えば、セル C_ρ からセル $C_{2\rho}$ への M2M の場合には、図-3 のように考えて、

$$\left\{ \begin{aligned} \rho \tilde{\mathcal{M}}_{n,k}(\mathbf{y}_0) &= \sum_{m=-n}^n \rho \mathcal{M}_{n,m}(\mathbf{y}_0) D_{km}^n(\mathbf{R}^T) \\ 2\rho \tilde{\mathcal{M}}_{l,k}(\mathbf{y}_1) &= \sum_{n=|k|}^{\infty} \sum_{h=|n-l|}^{n+l} (-1)^k \mathcal{B}_{n,h} W_{k,-k,0}^{n,l,h} \\ &\quad \times \check{i}_h(s_c |\mathbf{y}_0 - \mathbf{y}_1|) \rho \mathcal{M}_{n,k}(\mathbf{y}_0) \\ 2\rho \mathcal{M}_{l,m}(\mathbf{y}_1) &= \sum_{k=-l}^l 2\rho \tilde{\mathcal{M}}_{l,k}(\mathbf{y}_1) D_{mk}^l(\mathbf{R}) \end{aligned} \right. : \text{M2M} \quad (48)$$

となる。M2L の場合は同一レベル (大きさが等しい) のセル同士の変換である。よって、セル C_ρ から遠方のセル C_ρ への M2L は、

$$\left\{ \begin{aligned} \rho \tilde{\mathcal{M}}_{n,k}(\mathbf{y}_1) &= \sum_{m=-n}^n \rho \mathcal{M}_{n,m}(\mathbf{y}_1) D_{km}^n(\mathbf{R}^T) \\ \rho \tilde{\mathcal{L}}_{l,k}(\mathbf{x}_1) &= e^{s_c(2\rho-d)} \sum_{n=|k|}^{\infty} \sum_{h=|n-l|}^{n+l} (-1)^{l+k} \mathcal{B}_{n,h} \\ &\quad \times W_{k,-k,0}^{n,l,h} \check{k}_h(s_c |\mathbf{y}_1 - \mathbf{x}_1|) \rho \tilde{\mathcal{M}}_{n,k}(\mathbf{y}_1) \\ \rho \mathcal{L}_{l,m}(\mathbf{x}_1) &= \sum_{k=-l}^l \rho \tilde{\mathcal{L}}_{l,k}(\mathbf{x}_1) D_{mk}^l(\mathbf{R}) \end{aligned} \right. : \text{M2L} \quad (49)$$

となり、セル $C_{2\rho}$ からセル C_ρ への L2L は

$$\left\{ \begin{aligned} 2\rho \tilde{\mathcal{L}}_{n,k}(\mathbf{x}_1) &= \sum_{m=-n}^n 2\rho \mathcal{L}_{n,m}(\mathbf{x}_1) D_{km}^n(\mathbf{R}^T) \\ \rho \tilde{\mathcal{L}}_{l,k}(\mathbf{x}_0) &= \sum_{n=|k|}^{\infty} \sum_{h=|n-l|}^{n+l} (-1)^k \mathcal{B}_{n,h} W_{k,-k,0}^{n,l,h} \\ &\quad \times \check{i}_h(s_c |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0|) 2\rho \tilde{\mathcal{L}}_{n,k}(\mathbf{x}_1) \\ \rho \tilde{\mathcal{L}}_{l,m}(\mathbf{x}_0) &= \sum_{k=-l}^l \rho \tilde{\mathcal{L}}_{l,k}(\mathbf{x}_0) D_{mk}^l(\mathbf{R}) \end{aligned} \right. : \text{L2L} \quad (50)$$

で表される。式 (49) 中の d は M2L を行う二つのセル同士の中心間距離である。式 (48)-(50) を式 (38)-(40) と比較すると、M2M と L2L は同形式となっているが、M2L のみ式 (46) を反映して指数関数が含まれていることがわかる。そのため、 d が大きい場合 M2L の計算はアンダーフローを起こす可能性がある。そこで、本研究では、文献¹⁷⁾に倣い、M2L の計算に対して切り捨てを行う。

切り捨ての判定には次の条件

$$\Re[s_c r_{\min}] > b \log 10 \quad (51)$$

を用いて、以下のアルゴリズムで行う。

1. M2L の対象となるセル同士のセル間最少距離を計算する
2. 1. で求めたセル間最少距離を $r_{\min}$ とし、予め設定した b, s_c に対し、式 (51) を計算する。
3. 式 (51) が成り立てば、M2L を切り捨てる。成り立たない場合は通常通り M2L を計算する。

ここで、式 (51) 中の $\Re[z]$ は z の実部を表しており、 b は数値計算に必要な 10 進桁数である。このとき、セル間の最小距離 $r_{\min}$ を用いた理由は、3 次元スカラー波動問題の Laplace 変換領域基本解はソース点と観測点の距離が最も小さいときに最大値をとるためである。

5.4 ゼロステップ目の影響関数の計算方法

式 (16)、(17) の表現を用いずにゼロステップ目の影響関数のみを計算する方法について説明する。Cauchy の積分公式を用いる前の重み関数行列は式 (9) のよう

に表される．このとき，生成多項式の変数 ζ に対して， $\zeta = 0$ を代入すると，次の表現を得る．

$$\Delta t W_0 = \sum_{\beta=1}^m K(\lambda_\beta) \mathbf{E}_\beta(0) \quad (52)$$

ここで， λ_β は $\Upsilon(0)/\Delta t$ の固有値である．この表現を影響関数行列に適用すると，

$$\mathbf{A}_\alpha^0(\mathbf{x}) = \sum_{\beta=1}^m \int_{S_\alpha} \hat{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \lambda_\beta) dS_y \mathbf{E}_\beta(0) \quad (53)$$

$$\mathbf{B}_\alpha^0(\mathbf{x}) = \sum_{\beta=1}^m \int_{S_\alpha} \hat{S}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \lambda_\beta) dS_y \mathbf{E}_\beta(0) \quad (54)$$

となり，離散 Fourier 変換を行う必要がなくなる．

IRK 法を用いた CQ-FMBEM は線形多段法を用いた CQ-FMBEM よりも時間に関する精度が高い．そのため，時間増分 Δt を比較的大きくすることができる．一般的に， Δt が小さい場合，代数方程式 (20) の係数行列は対角行列に近づく．しかしながら，IRK 法を用いた CQ-FMBEM では， Δt を比較的大きくすること，及びゼロステップ目の影響関数が IRK 法の標本点の影響により実質，第 1 ステップ目までの成分を持つことから，遠方セルに含まれる要素に対する計算を行う必要がある場合が少なくない．そこで，代数方程式 (20) 左辺の行列ベクトル積に対しても，式 (53)，(54) を多重極展開し，高速多重極法を用いて計算を行う．

5.5 高速多重極法適用時の留意点

高速多重極法を IRK 法を用いた CQ-BEM に適用したときに，留意すべき計算手順を説明する．多重極モーメント (25)，(26) を計算し，各 β に対して展開点移動を行うのだが，球面調和関数や座標軸回転作用素は IRK 法を用いた CQM のパラメータに依存しない．そこで，先に m 個全ての β に対して多重極モーメントの計算を行い，それら全てに対して同時に移動公式を適用することで計算時間の節約を行う．すなわち，空間のみに依存する関数の計算量は IRK 法の段数によって増大せず，変形球 Bessel 関数のように IRK 法を用いた CQM のパラメータに依存する関数は約 m 倍の増大となる．この計算手順を用いることによって，計算時間の増大を m 倍程度にすることが可能となる．

6. 数値解析例

IRK 法を用いた CQ-FMBEM による数値解析例を示す．以下では，まず，本手法の計算精度の確認，線形多段法を用いた CQ-FMBEM²²⁾ との精度，計算コストの比較を行う．その後，大規模問題の数値解析例，及び高速多重極法を用いていない CQ-BEM との計算コストの比較を行う．なお，以下の説明では，IRK 法を用いた CQ-FMBEM を IRK 法の段数 m を用いて，RK m と表

図-4 球形の散乱体への平面波入射モデル

記し，解析には全て 24 スレッドの OpenMP による並列化を施している．また， $b = 20$ ， $\epsilon = 10^{-12}$ ， $N_t = 10$ とし，式 (16)，(17) の離散 Fourier 変換は全て FFT を用いて計算する．解析には，東京工業大学学術国際情報センターのスーパーコンピュータ TSUBAME2.0 を用いた．

6.1 計算精度の確認，及び線形多段法を用いた CQ-FMBEM との比較

計算精度の検証のための解析モデルは図-4 に示すような半径 a の球形の散乱体による平面波の散乱問題とし，点 X における散乱波形を IRK 法，線形多段法それぞれを用いた CQ-FMBEM によって計算する．散乱体の境界条件は圧力勾配ゼロ ($q(\mathbf{x}, t) = 0$ ， $\mathbf{x} \in S$) とした．また，線形多段法を用いた CQ-FMBEM には，2 次の後退差分法 (BDF2) を用いるものとする．入射波は次式で表される x_1 方向に伝搬する平面波を用いた．

$$p^{\text{in}}(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} p_0 (1 - \cos \theta^{\text{in}}) & (0 \leq \theta^{\text{in}} \leq 2\pi) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (55)$$

$$\theta^{\text{in}} = \frac{2\pi c}{\lambda^{\text{in}}} \left(t - \frac{x_1 + a}{c} \right) \quad (56)$$

ここで， p_0 は入射波の振幅， λ^{in} は入射波の波長である．

このような球形の散乱体による入射平面波の散乱問題は Pao と Mow により周波数領域での解析解が与えられている²³⁾．そこで，Pao と Mow による周波数領域での解析解を逆 Fourier 変換することにより，時間領域での数値解を導出し，CQ-FMBEM による数値解析結果と比較することで，計算精度の検証を行う．また，計算パラメータは，散乱体の半径による無次元化を行ったものを用いた．波長を $\lambda^{\text{in}}/a = 1$ とし，時間増分 $c\Delta t/a$ を変化させて計算を行った．また，境界 S は三角形要素を用いた一定要素で離散化した．要素サイズは 1 辺の長さが入射波の波長 λ^{in}/a の 1/10 以下になるよう設定した．全要素数 M は， $M = 3,176$ である．

まず，線形多段法，IRK 法 (RK2) を用いた場合のそれぞれの CQ-FMBEM による解析結果を図-5，6 に示す．BDF2 を用いた場合は比較的，時間増分が小さいときの計算結果を示している．図-5 より，BDF2 を用いた

図-5 線形多段法 (2 次の BDF 法) を用いた CQ-FMBEM による解析結果

図-6 IRK 法 (2 段 3 次の Radau IIA 法) を用いた CQ-FMBEM による解析結果

図-7 IRK 法 (3 段 5 次の Radau IIA 法) を用いた CQ-FMBEM による解析結果

図-8 高次の IRK 法 (4 段 7 次, 5 段 9 次の Radau IIA 法) を用いた CQ-FMBEM による解析結果

表-1 計算時間の比較 (単位は sec)

	BDF2	RK2	RK3	RK4	RK5
$N = 32$	114	188	268	355	443
$N = 64$	362	577	884	1,205	1,531

表-2 必要記憶容量の比較 (単位は MB)

	BDF2	RK2	RK3	RK4	RK5
$N = 32$	21.0	31.8	39.1	47.1	55.1
$N = 64$	30.7	49.2	63.1	78.3	93.5

場合, 時刻 $ct/a = 5$ 以降に数値解が振動している様子がわかる. 畳込み積分の計算精度が低い場合, 遅延ポテンシャルの計算時に数値誤差が累積し, 散乱体を回り込む波動を精度良く計算できていないためであると考えられる. しかしながら, 時間増分が小さくなるにつれて参照解に近付いている様子が見て取れる. 一方, RK2 を用いた場合も, $c\Delta t/a = 0.277, 0.139$ のときは $ct/a = 5$ 以降に数値誤差が見られるが, 比較的良好な精度で計算できている様子がわかる.

次に, 高次の IRK 法を用いた CQ-FMBEM による解析結果を図-7, 8 に示す. IRK 法には 3 段 5 次, 4 段 7 次, 及び 5 段 9 次の Radau IIA 法を用いており, 時間増分を比較的大きくしたときの結果を示している. 図-7, 8 より, RK3-5 を用いた場合は良い精度で計算できていることがわかる.

これらの結果より, IRK 法を用いた CQ-BEM は精度が大きく向上していることがわかる. また, Monegato らによる研究¹¹⁾では, 2 次元, 及び 3 次元における拡散方程式, 及び波動方程式の時間領域基本解に対する影響関数を, 線形多段法を用いた CQM, IRK 法を用いた CQM, それぞれによって構成した場合の挙動が示されている. その結果によると, 拡散方程式の時間領域基本解のように滑らかな変化をする関数の場合, 線形多段法を用いた CQM, IRK 法を用いた CQM, それぞれを用いて構成した影響関数は共に時間領域基本解と良く一致している. 一方, 波動方程式の時間領域基本解のような急激に変化する関数の場合は, 線形多段法を用いた CQM と IRK 法を用いた CQM では挙動が大きく異なり, 畳込み積分の計算精度の比較では, IRK 法を用いた CQM の方が相対誤差は小さい. また, Banjai らによる研究¹²⁾では数値解析例として, 有限領域に対する圧力勾配が急激に変化する問題を解析している. その結果, IRK 法を用いた CQ-BEM は, 線形多段法を用いた CQ-BEM と比較して精度が大きく向上したことが報告されている. そのため, 急激に変動する入射波を入射したときも同様の傾向を示すと考えられる. これらの報告, 及び本解析結果から, 波動問題には線形多段法を用いた CQM よりも IRK 法 (一段法) を用いた CQM の

図-9 IRK 法 (3 段 5 次の Radau IIA 法) を用いた CQ-FMBEM による大規模波動解析結果, (a) 解析モデル, (b) $ct/a = 2.77$, (c) $ct/a = 8.31$, (d) $ct/a = 13.9$.

方が適していると考えられる。

IRK 法の段数による計算時間, 必要記憶容量の比較のため, 総時間ステップ数 $N = 32, 64$ としたときの解析に要した計算時間, 必要記憶容量をそれぞれ表-1, 2 に示す。高速多重極法を用いていない前論文¹³⁾によれば, IRK 法を用いた CQ-BEM は線形多段法を用いた CQ-BEM と比較して, 計算時間, 必要記憶容量共に m^2 倍程度増大していた。しかしながら, 表-1, 2 より, 高速多重極法を適用した場合は, 共に m 倍程度の増大となっていることがわかる。この理由として, 高速多重極法による高速化に加えて次のような点が挙げられる。計算時間に関しては, 式 (16), (17) で表される影響関数行列は $m \times m$ の行列となるが, 基本解, 及び二重層核の引数 λ_β^l は一つの l に対して m 通りしかないため, 5.5 節の手順で計算したことが影響していると考えられる。必要記憶容量に関しては, 高速多重極法を用いると, 行列ベクトル積計算により構成されるベクトルのみ保存することが影響している。すなわち, 高速多重極法を適用することで, 空間方向の高速化のみならず, IRK 法の段数による計算量増大の低減にも効果がある。

6.2 大規模波動問題の数値解析例

次に, 大規模波動問題の数値解析例と, その場合の計算時間, 必要記憶容量の結果を示す。大規模波動問題の例として用いる解析モデルは図-9(a) に示すような $5 \times 5 \times 5$ に間隔 a で正方配置された半径 a の球形の散乱体 125 個による多重散乱問題である。入射波は式 (55), (56) で表される平面波と同様のものを用い, 時刻

図-10 IRK 法を用いた CQ-BEM と CQ-FMBEM の計算時間の比較

図-11 IRK 法を用いた CQ-BEM と CQ-FMBEM の必要記憶容量の比較

$t = 0$ に入射側の散乱体に到達するように設定している。また, 散乱体の境界条件は圧力勾配ゼロとし, 計算パラメータは精度確認と同様に散乱体の半径による無次元化を行ったものを用いた。波長を $\lambda^{\text{in}}/a = 2$ とし, 時間増分 $c\Delta t/a = 0.139$ とした。総時間ステップ数 $N = 128$, 全要素数 $M = 104,500$ である。

図-9(b)-(d) に散乱波動場を示す。図-9(b)-(d) より, 入射平面波が散乱されながら, x_1 方向へ伝搬していく様子が見て取れる。

最後に, IRK 法を用いた CQ-FMBEM と CQ-BEM の要素数を変化させた場合の計算時間, 及び必要記憶容量をそれぞれ図-10, 11 に示す。このとき, 3 段 5 次の Radau IIA 法を用いており, 総時間ステップ数 N を $N = 128$ としている。図-10 より, 要素数が数千程度 のときから, CQ-FMBEM の方が高速に計算できている様子がわかる。また, 図-11 より, 必要記憶容量は大幅に低減できている様子がわかる。CQ-FMBEM の計算時間の増加傾向が多少変化しているのは, 要素数増大に伴うセル構造の変化によって M2L の切り捨てを行う量が変化するためであると考えられる。また, 必要記憶容量が 3,000 要素程度までほとんど増大していないのは, E_β , λ_β^l , $W_{m,k,j}^{n,l,i}$ 等の要素数に依存しない関数を

最初に一度計算し、ストアしているためである。なお、CQ-BEM の場合は、必要記憶容量が膨大となり、要素数 3,000 程度を越えると計算を実行することができなかった。これらの結果から、本手法は大規模問題に対して有効であるといえる。

7. おわりに

3 次元スカラー波動問題に対する IRK 法を用いた CQ-FMBEM の開発を行った。本手法の計算精度に関する有利性、及び大規模問題への効果を示した。また、高速多重極法を適用することで IRK 法の段数による計算量の増大を低減できることを示した。そのため、本手法は時間増分を大きくし、高い段数の IRK 法を用いることで、線形多段法を用いた CQ-FMBEM と比較して効率よく計算を行うことができる。また、本手法は時間領域での直接解法であるため、条件によって境界形状や境界条件等が変化するような非線形問題への応用が可能である。

今後は、弾性波動問題への拡張や MPI, GPGPU 等を用いた並列化を行う予定である。

Appendix I 球面調和関数に対する座標軸回転作用素

球面調和関数に対する座標軸回転作用素の計算方法について説明する。球面調和関数は次数を持つため、それぞれの次数に対応する座標軸回転行列が必要となる。そこで、次のような関係を持つ作用素 $D_{mk}^n(\mathbf{R})$, $(-n \leq m, k \leq n)$ を計算することを考える。

$$Y_n^k(\hat{\mathbf{x}}') = \sum_{m=-n}^n Y_n^m(\hat{\mathbf{x}}) D_{mk}^n(\mathbf{R}) \quad (\text{I.1})$$

ここで、引数 $\mathbf{R}$ は $\hat{\mathbf{x}}' = \hat{\mathbf{x}}\mathbf{R}$ となる位置ベクトルに対する座標軸回転行列である。球面調和関数に対する座標軸回転作用素の計算には Choi らが提案した再帰的な計算手法²⁴⁾を用いるのだが、球面調和関数の定義 (31) が Choi らの定義と異なるため、実際に計算に用いた漸化式を以下に示す。

式 (I.1) における $\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{x}}'$ の天頂角、方位角をそれぞれ $(\theta, \phi), (\theta', \phi')$ とすると、1 次の球面調和関数 Y_1^m , $(m = -1, 0, 1)$ に対する座標軸回転行列は次のように表される。

$$\begin{pmatrix} D_{-1,-1}^1 & D_{-1,0}^1 & D_{-1,1}^1 \\ D_{0,-1}^1 & D_{0,0}^1 & D_{0,1}^1 \\ D_{1,-1}^1 & D_{1,0}^1 & D_{1,1}^1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1+\cos\beta}{2}e^{-i(\alpha+\gamma)} & -\frac{\sin\beta}{\sqrt{2}}e^{-i\gamma} & \frac{1-\cos\beta}{2}e^{-i(\alpha-\gamma)} \\ \frac{\sin\beta}{\sqrt{2}}e^{-i\alpha} & \cos\beta & -\frac{\sin\beta}{\sqrt{2}}e^{i\alpha} \\ \frac{1-\cos\beta}{2}e^{i(\gamma-\alpha)} & \frac{\sin\beta}{\sqrt{2}}e^{i\gamma} & \frac{1+\cos\beta}{2}e^{i(\alpha+\gamma)} \end{pmatrix} \quad (\text{I.2})$$

このとき、 $\alpha = \phi', \beta = \theta' - \theta, \gamma = -\phi$ としている。一方、高次の球面調和関数に対する座標軸回転作用素は以下の漸化式を用いて計算する。

$$D_{mk}^n = a_{mk}^n D_{00}^1 D_{mk}^{n-1} + b_{mk}^n D_{1,0}^1 D_{m-1,k}^{n-1} + b_{-m,k}^n D_{-1,0}^1 D_{m+1,k}^{n-1}, \quad (-n+1 \leq k \leq n-1) \quad (\text{I.3})$$

$$D_{mk}^n = c_{m,-k}^n D_{0,-1}^1 D_{m,k+1}^{n-1} + d_{m,-k}^n D_{1,-1}^1 D_{m-1,k+1}^{n-1} + d_{-m,-k}^n D_{-1,-1}^1 D_{m+1,k+1}^{n-1}, \quad (-n \leq k \leq n-2) \quad (\text{I.4})$$

$$D_{mk}^n = c_{m,k}^n D_{0,1}^1 D_{m,k-1}^{n-1} + d_{m,k}^n D_{1,1}^1 D_{m+1,k-1}^{n-1} + d_{-m,k}^n D_{-1,1}^1 D_{m+1,k-1}^{n-1}, \quad (-n+2 \leq k \leq n) \quad (\text{I.5})$$

上記の漸化式は Legendre 陪関数の漸化式、及び球面調和関数の直交性を用いることにより、導出することができる。また、 $a_{mk}^n, b_{mk}^n, c_{mk}^n, d_{mk}^n$ は以下のように表される係数である。

$$a_{mk}^n = \left[\frac{(n+m)(n-m)}{(n+k)(n-k)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{I.6})$$

$$b_{mk}^n = \left[\frac{(n+m)(n+m-1)}{2(n+k)(n-k)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{I.7})$$

$$c_{mk}^n = \left[\frac{2(n+m)(n-m)}{(n+k)(n+k-1)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{I.8})$$

$$d_{mk}^n = \left[\frac{(n+m)(n+m-1)}{(n+k)(n+k-1)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{I.9})$$

また、 $D_{00}^0 = 1$ である。以上によって、球面調和関数の座標軸回転作用素の計算方法を示した。この再帰的な計算方法を用い、移動公式への適用に必要な N_t 次までの球面調和関数に対する座標軸回転作用素を計算した場合、計算量は $O(N_t^3)$ となる。

参考文献

- 1) 福井卓雄: 境界要素法の研究-高速・高精度計算法の開発と応用-, 京都大学学位論文, 1998.
- 2) 斎藤隆泰・石田貴之・福井卓雄・廣瀬壮一: 演算子積分法および高速多重極法を用いた新しい二次元時間領域弾性境界要素法について, 応用力学論文集, 土木学会, vol.11, pp.193-200, 2008.
- 3) 福井卓雄・斎藤隆泰: Lubich の演算子積分法における高速多重極法, 日本シミュレーション学会論文誌, 小特集: 境界要素法の新展開, vol.28, No.3, pp.17-22, 2009.
- 4) C. Lubich: Convolution quadrature and discretized operational calculus I,II, *Numer. Math.*, vol.52, pp. 129-145, 413-425. 1988.
- 5) T. Saitoh, S. Hirose and T. Fukui: Convolution quadrature time-domain boundary element method and acceleration by the fast multipole method in 2-D viscoelastic wave propagation, *Theoretical and Applied Mechanics Japan*, vol.57, pp.385-393, 2009.
- 6) 斎藤隆泰・近澤文香・廣瀬壮一: 演算子積分時間領域境界要素法を用いた飽和多孔質弾性体における大規模波動散乱解析, 応用力学論文集, vol.15, 2012, (CD-ROM 収録).
- 7) C. Lubich and A. Ostermann: Runge-Kutta methods

- for parabolic equations and convolution quadrature, *Math. Comp.*, vol.60, pp.105-131, 1993.
- 8) M. P. Calvo, E. Cuesta, C. Palencia: Runge-Kutta convolution quadrature methods for well-posed equations with memory, *Numer. Math.*, vol.107, pp.589-614, 2007.
 - 9) L. Banjai and C. Lubich: An error analysis of Runge-Kutta convolution quadrature, *BIT Numer. Math.*, vol.51, pp.483-496, 2011.
 - 10) L. Banjai, C. Lubich, and J.M. Melenk: Runge-Kutta convolution quadrature for nonsectorial operators arising in wave propagation, *Numer. Math.*, vol.119, pp.1-20, 2011.
 - 11) G. Monegato, L. Scuderi and M. P. Stanić: Lubich convolution quadratures and their application to problems described by space-time BIEs, *Numer. Algor.*, vol.56, pp.405-436, 2011.
 - 12) L. Banjai, M. Messner, and M. Schantz: Runge-Kutta convolution quadrature for the boundary element method, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, vol.245-246, pp.90-101, 2012.
 - 13) 丸山泰蔵・斎藤隆泰・廣瀬壮一: 陰的 Runge-Kutta 法を用いた演算子積分時間領域境界要素法及び 3 次元スカラー波動問題への応用, 計算数理工学論文集, JASCOME, vol.12, pp.91-96, 2012.
 - 14) 小林昭一編著: 波動解析と境界要素法, 京都大学学術出版会, 2000.
 - 15) E. Hairer and G. Wanner 著, 三井斌友監訳: 常微分方程式の数値解法 II, Springer, Berlin, 2002.
 - 16) L. Greengard and V. Rokhlin: A fast algorithm for particle simulations, *J. Comput. Phys.*, vol.73, pp.325-348, 1987.
 - 17) 斎藤隆泰・瀬川尚揮・石田貴之・廣瀬壮一: 並列化された演算子積分時間領域高速多重極境界要素法による大規模多重散乱解析, 計算数理工学論文集, JASCOME, vol.11, 論文 No.19-111216, 2011.
 - 18) M. A. Epton and B. Dembart: Multipole translation theory for the three dimensional Laplace and Helmholtz equations, *SIAM J. Sci. Comput.*, vol.16, pp.865-897, 1995.
 - 19) A. Messiah: Quantum Mechanics, John Wiley & Sons (North Holland), New York, 1967.
 - 20) G. B. Arfken 著, 権平健一郎訳: 特殊関数と積分方程式, 講談社, 東京, 1976.
 - 21) M. Gutting: Fast multipole Methods for oblique derivative problems, Shaker Verlag, 2008.
 - 22) T. Saitoh and S. Hirose: Parallelized fast multipole BEM based on the convolution quadrature method for 3-D wave propagation problems in time-domain, IOP Conf. Series: *Materials Science and Engineering*, vol.10, 012242, 2010.
 - 23) Y.-H. Pao and C.-C. Mow: Diffraction of elastic waves and dynamic stress concentrations, Crane and Russak, New York, 1973.
 - 24) C. H. Choi, J. Ivanic, M. S. Gordon, K. Ruedenberg: Rapid and stable determination of rotation matrices between spherical harmonics by direct recursion, *Journal of Chemical Physics*, vol.111, No.19, pp.8825-8831, 1999.

(2013 年 3 月 18 日 受付)