パネルクラスタリング積分方程式法による 二次元拡散方程式の高速解法*

高橋 徹^{*1}, 西村 直志^{*2}, 小林 昭一^{*3}

Fast Solution Method of Diffusion Equation in 2D using Panel Clustering Boundary Integral Equation Method

Toru TAKAHASHI, Naoshi NISHIMURA^{*4} and Shoichi KOBAYASHI^{*4} Kyoto University, Dept. of Global Environment Engineering,
Yoshida-honmachi, Sakyo-ku, Kyoto, Kyoto, 606-8501 Japan

In this paper, a panel clustering boundary integral equation method for the diffusion equation in 2D in time domain is developed. The present method can reduce the computational costs and memory requirement drastically. In numerical examples, it is shown that the proposed method solves the large scale problems faster than the conventional one.

Key Words: Boundary Integral Equation Method, Panel Clustering Method, 2D Diffusion Equation, Time Domain, Iterative Solution, GMRES

1. 緒言

近年, 多重極法⁽¹⁾やパネルクラスタリング法⁽²⁾あるいは Wavelet⁽³⁾変換等のアルゴリズムと行列の反復解法とを組み合わせることによって, 境界積分方程式を高速に解く試みが盛んである。これらの高速解法が有する計算量は, 問題の自由度を N とすると, $O(N)$ 程度であり, 従来の積分方程式法が有するおよそ $O(N^2)$ の計算量と比べると, 自由度の大きな問題に対して非常に有利である。特に, 多重極積分方程式法による成果はめざましく, Laplace 方程式⁽¹⁾⁽⁴⁾, Helmholtz 方程式⁽⁵⁾⁽⁶⁾, 静弾性問題⁽⁷⁾⁽⁸⁾⁽⁹⁾等がこれまでに研究されており, 従来法に比べて飛躍的に大規模な問題の解析が実現されている。

他方, 波動方程式や拡散方程式に代表されるような時間変数を含む積分方程式の高速解法の研究は始まったばかりと言える。著者らの知るところでは, 波動場の高速アルゴリズムに関する研究⁽¹⁰⁾, 波動方程式と Maxwell 方程式の多重極展開に関する研究⁽¹¹⁾⁽¹²⁾⁽¹³⁾, 拡散方程式に関連する Gauss 変換の高速化に関する研究⁽¹⁴⁾を挙げることができるが, いずれも積分方程式の一般解法とはなっていないのが現状である。そこで本論文は, 時間領域問題における積分方程式の高速解法の開発の第一歩として, 二次元拡散方程式に対するパネルクラスタリング積分方程式法について検討する⁽¹⁵⁾。

一般に, 多重極法を含む広義のパネルクラスタリング法では, 時空内の二点 (x, t) と (y, s) に関する積分核 $K(x, y, t, s)$ と関数 u の畳み込みを計算するために

$$K(x, y, t, s) = \sum_i \int k_{1i}(x, t - \tau) k_{2i}(y, \tau - s) d\tau \quad (1)$$

と分解することから出発する。ここに, k_{pi} は適当な積分核である。このときモーメントは次式となる。

$$M_i(\tau) = \int_{y \in S_c} \int k_{2i}(y, \tau - s) u(y, s) ds dS_y \quad (2)$$

ここに, u は領域 D の境界 S 上で定義され, S_c は S 上の領域である。一般に, $M_i(\tau)$ は全ての $u(y, s)$ ($y \in S_c, s < \tau$) に依存するため, $M_i(\tau)$ を計算するためには u の全情報を記憶する必要がある。ところが, $k_{2i}(y, \tau - s) = \tilde{k}_{2i}(y) \delta(\tau - s)$ と書ける場合には, $M_i(\tau)$ は時刻 τ の u のみに依存するので, 全ての過去の u を記憶する必要はなくなり, 過去の $M_i(\tau)$ だけを保存するアルゴリズムが構成できる。以下で提案する狭義のパネルクラスタリング法(以下, 単にパネルクラスタリング法と呼ぶ)はまさにこの性質を有しており, 大規模な数値計算を実行する上で非常に有利であると考えられる。

本論文では, まず, 二次元拡散方程式に対するパネルクラスタリング積分方程式法を運用するために必要となる諸式を誘導する。次いで, それらの諸式と従来の多重極法に基づいて, 拡散方程式の積分方程式に含まれる積分を高速に計算するアルゴリズムを構成する。これと反復解法である GMRES(k) 法⁽¹⁶⁾を組み合わせることによって, 拡散方程式の高速解法が構成されることになる。最後に, 数値解析例を示して本手法の有効性について検討する。

2. 定式化

2.1 基礎関係式 二次元領域 $D \subset R^2$ 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下で, 拡散方程式

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) u(x, t) \quad (3)$$

を満足する関数 $u(x, t)$ ($x = (x_1, x_2) \in D, t \in [0, \infty)$) を求める問題である。ここに, x, t はそれぞれ無次元化された空間, 時間変数である。

* 原稿受付 1999 年 9 月 1 日。

^{*1} 正員, 京都大学大学院(〒606-8501 京都市左京区吉田本町)。^{*2} 正員, 京都大学工学研究科。^{*3} 正員, 福井工業大学工学部(〒910-8505 福井市学園 3-6-1)。

E-mail: ttaka@gsp.sun1.gee.kyoto-u.ac.jp

D の境界 S が滑らかであり、初期条件が全て零とすれば、式 (3) より次の境界積分方程式が得られる⁽¹⁷⁾。

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}u(x, t) + \int_0^t \int_S \frac{\partial K(x - y, t - \tau)}{\partial \mathbf{n}(y)} u(y, \tau) dS_y d\tau \\ = \int_0^t \int_S K(x - y, t - \tau) q(y, \tau) dS_y d\tau \quad (4) \end{aligned}$$

ただし、点 $x \in S$ における境界外向き単位法線ベクトルを $\mathbf{n}(x)$ と表すとき、 $q(x, t)$ は $\partial u(x, t)/\partial \mathbf{n}(x)$ と定義される流束である。また、関数 $K(x - y, t - \tau)$ は式 (3) に対する基本解であり、次式で与えられる。

$$K(x, t) = k(x_1, t)k(x_2, t) \quad (5)$$

ここに、関数 $k(x, t)$ ($x \in \mathbb{R}^1, t \in [0, \infty)$) は一次元拡散方程式に対する基本解であり、 $H(t)$ を Heviside 関数とすると次式で与えられる。

$$k(x, t) = \frac{e^{-x^2/(4t)}}{\sqrt{4\pi t}} H(t) \quad (6)$$

2.2 パネルクラスタリング法 境界積分方程式 (4) に含まれる積分をパネルクラスタリング法に基づいて評価する際に必要となる諸式の誘導を行う。

パネルクラスタリング法は、二変数 x と y に関する式 (4) に含まれる積分を、Taylor 展開を用いて個々の変数の関数に分離することに基礎をおく。そのために、積分核 $K(x - y, t - \tau)$ を変数 y に関して点 c を原点として Taylor 展開する⁽¹⁸⁾。すなわち、 $t > \tau$ ならば任意の $x, y, c \in \mathbb{R}^2$ に対して次のように書ける。

$$\begin{aligned} K(x - y, t - \tau) \\ = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^m O_{m-n}(x_1 - c_1, t - \tau) O_n(x_2 - c_2, t - \tau) \\ I_{m-n}(y_1 - c_1) I_n(y_2 - c_2) \quad (7) \end{aligned}$$

ただし、 H_m を m 次の Hermite 多項式⁽¹⁹⁾として、関数 I_m と O_m は次のように定義した。

$$I_m(x) = \frac{x^m}{2^{m/2} m!} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} O_m(x, t) &= (-\sqrt{2})^m \frac{\partial^m k(x, t)}{\partial x^m} \\ &= \frac{k(x, t) H_m\left(\frac{x}{\sqrt{2t}}\right)}{t^{m/2}} \quad (9) \end{aligned}$$

式 (7) を用いると S の部分 S_c に対して、式 (4) に含まれる積分を次のように評価することができる。

$$\begin{aligned} \int_0^t \int_{S_c} \left(\frac{\partial K(x - y, t - \tau)}{\partial \mathbf{n}(y)} u(y, \tau) \right. \\ \left. - K(x - y, t - \tau) q(y, \tau) \right) dS_y d\tau \\ = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^m \int_0^t O_{m-n}(x_1 - c_1, t - \tau) \\ O_n(x_2 - c_2, t - \tau) M_{m,n}(c, \tau) d\tau \quad (10) \end{aligned}$$

ここに、 $M_{m,n}(c, t)$ は次式のように計算されるもので、点 c を原点とするモーメントと呼ぶ。

$$\begin{aligned} M_{m,n}(c, t) \\ = \int_{S_c} \left(\frac{\partial I_{m-n}(y_1 - c_1) I_n(y_2 - c_2)}{\partial \mathbf{n}(y)} u(y, t) \right. \\ \left. - I_{m-n}(y_1 - c_1) I_n(y_2 - c_2) q(y, t) \right) dS_y \quad (11) \end{aligned}$$

モーメントの原点を点 c から点 c' に移動する場合、対応するモーメントは式 (11) より

$$\begin{aligned} M_{k,l}(c', t) = \sum_{m=0}^l \sum_{n=m}^{k-l+m} \\ I_{n-m}(c_1 - c'_1) I_m(c_2 - c'_2) M_{k-n,l-m}(c, t) \quad (12) \end{aligned}$$

と計算される。これを M2M 変換公式と呼ぶ。なお、式 (11) から式 (12) を誘導する際に次式を用いた。

$$\begin{aligned} I_m(y_i - c'_i) &= \frac{(y_i - c_i + c_i - c'_i)^m}{2^{m/2} m!} \\ &= \sum_{k=0}^m \binom{m}{k} \frac{(y_i - c_i)^k (c_i - c'_i)^{m-k}}{2^{m/2} m!} \\ &= \sum_{k=0}^m I_k(y_i - c_i) I_{m-k}(c_i - c'_i) \quad (13) \end{aligned}$$

式 (10) の評価に当たっては、同式を点 x に関して点 a を原点とする Taylor 級数に展開したもの

$$\begin{aligned} \int_0^t \int_{S_c} \left(\frac{\partial K(x - y, t - \tau)}{\partial \mathbf{n}(y)} u(y, \tau) \right. \\ \left. - K(x - y, t - \tau) q(y, \tau) \right) dS_y d\tau \\ = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^k I_{k-l}(a_1 - x_1) I_l(a_2 - x_2) L_{k,l}(a, t) \quad (14) \end{aligned}$$

を用いる。この展開を点 a を原点とする局所展開と呼ぶ。ここに、 $L_{k,l}(a, t)$ は

$$\begin{aligned} L_{k,l}(a, t) &= \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^m \int_0^t O_{m+k-n-l}(a_1 - c_1, t - \tau) \\ &\quad O_{n+l}(a_2 - c_2, t - \tau) M_{m,n}(c, \tau) d\tau \quad (15) \end{aligned}$$

と計算されるもので、点 a を原点とする局所展開係数と呼ぶ。式 (15) を M2L 変換公式と呼ぶ。なお、式 (10) から式 (14) を誘導する際に次式を用いた。

$$\begin{aligned} O_p(x_i - c_i, t - \tau) \\ = \sum_{q=0}^{\infty} \frac{\partial^q O_p(x_i - c_i, t - \tau)}{\partial x_i^q} \bigg|_{x_i=a_i} \frac{(x_i - a_i)^q}{q!} \\ = \sum_{q=0}^{\infty} (-1)^q 2^{p/2} \frac{\partial^{p+q} k(a_i - c_i, t - \tau)}{\partial c_i^{p+q}} \frac{(x_i - a_i)^q}{q!} \\ = \sum_{q=0}^{\infty} O_{p+q}(a_i - c_i, t - \tau) I_q(a_i - x_i) \quad (16) \end{aligned}$$

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、対応する局所展開係数は式 (13) と式 (14) により

$$L_{k,l}(\mathbf{a}', t) = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^m I_{m-n}(a_1 - a'_1) I_n(a_2 - a'_2) L_{m+k,n+l}(\mathbf{a}, t) \quad (17)$$

と計算される。これを L2L 変換公式と呼ぶ。

2.3 境界積分方程式 (4) の離散化 数値解析に際しては境界積分方程式 (4) を次のように離散化する。

解析時刻の終端を t_M として時間 $[0, t_M]$ を M 個の区間 $T_\alpha = [t_{\alpha-1}, t_\alpha]$ ($\alpha = 1, \dots, M, t_0 = 0$) に分割し、境界 S を N 個の直線区間 S_i ($i = 1, \dots, N$) に分割する。境界量 u, q は時間方向には区分線形に、空間方向には区分一定に近似する。このとき、 $\mathbf{x} \in S_i, t = t_\alpha$ における u, q を u_i^α, q_i^α と書けば、 $(\mathbf{x}, t) \in S_i \times T_\alpha$ に対して

$$u(\mathbf{x}, t) = \phi_\alpha^{(-)}(t) u_i^{\alpha-1} + \phi_\alpha^{(+)}(t) u_i^\alpha \quad (18)$$

$$q(\mathbf{x}, t) = \phi_\alpha^{(-)}(t) q_i^{\alpha-1} + \phi_\alpha^{(+)}(t) q_i^\alpha \quad (19)$$

と書ける。ここに、 $\phi_\alpha^{(-)}(t)$ および $\phi_\alpha^{(+)}(t)$ は

$$\phi_\alpha^{(-)}(t) = \frac{t_\alpha - t}{t_\alpha - t_{\alpha-1}}, \quad \phi_\alpha^{(+)}(t) = \frac{t - t_{\alpha-1}}{t_\alpha - t_{\alpha-1}} \quad (20)$$

と定義した時間線形内挿関数である。なお、時間選点は時間要素 T_α の終端 t_α に、境界選点は境界要素 S_i の中点 $\mathbf{x}_i$ に設ける。

以上のように、時間に関しては区分線形要素を、空間に関しては区分一定要素を用いて式 (4) を離散化した場合、2.2 で誘導した諸式は具体的に以下ようになる。

● 積分の評価式 (順に式 (10) と式 (14) に対応)

$$\begin{aligned} & \int_0^{t_\alpha} \int_{S_c} \left(\frac{\partial K(\mathbf{x} - \mathbf{y}, t_\alpha - \tau)}{\partial \mathbf{n}(\mathbf{y})} u(\mathbf{y}, \tau) \right. \\ & \quad \left. - K(\mathbf{x} - \mathbf{y}, t_\alpha - \tau) q(\mathbf{y}, \tau) \right) dS_y d\tau \\ &= \sum_{\beta=1}^{\alpha} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^m \left(O_{m,n}^{\alpha,\beta(-)}(\mathbf{x} - \mathbf{c}) M_{m,n}^{\beta-1}(\mathbf{c}) \right. \\ & \quad \left. + O_{m,n}^{\alpha,\beta(+)}(\mathbf{x} - \mathbf{c}) M_{m,n}^{\beta}(\mathbf{c}) \right) \quad (21) \end{aligned}$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^k I_{k,l}(\mathbf{a} - \mathbf{x}) L_{k,l}^{\alpha}(\mathbf{a}) \quad (22)$$

なお、数値計算においては式 (21) と式 (22) に含まれる無限和を有限項 p で打ち切る。

● M2M 変換公式 (式 (12) に対応)

$$M_{k,l}^{\beta}(\mathbf{c}') = \sum_{m=0}^l \sum_{n=m}^{k-l+m} I_{n,m}(\mathbf{c} - \mathbf{c}') M_{k-n,l-m}^{\beta}(\mathbf{c}) \quad (23)$$

● M2L 変換公式 (式 (15) に対応)

$$\begin{aligned} L_{k,l}^{\alpha}(\mathbf{a}) &= \sum_{\beta=1}^{\alpha} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^m \left(O_{m+k,n+l}^{\alpha,\beta(-)}(\mathbf{a} - \mathbf{c}) M_{m,n}^{\beta-1}(\mathbf{c}) \right. \\ & \quad \left. + O_{m+k,n+l}^{\alpha,\beta(+)}(\mathbf{a} - \mathbf{c}) M_{m,n}^{\beta}(\mathbf{c}) \right) \quad (24) \end{aligned}$$

● L2L 変換公式 (式 (17) に対応)

$$L_{k,l}^{\alpha}(\mathbf{a}') = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^m I_{m,n}(\mathbf{a} - \mathbf{a}') L_{m+k,n+l}^{\alpha}(\mathbf{a}) \quad (25)$$

ただし、記号 $I_{m,n}$, $O_{m,n}^{\alpha,\beta(-)}$ および $O_{m,n}^{\alpha,\beta(+)}$ を

$$I_{m,n}(\mathbf{x}) = I_{m-n}(x_1) I_n(x_2) \quad (26)$$

$$\begin{aligned} O_{m,n}^{\alpha,\beta(\pm)}(\mathbf{x}) &= \int_{T_\beta} O_{m-n}(x_1, t_\alpha - \tau) \\ & \quad O_n(x_2, t_\alpha - \tau) \phi_\beta^{(\pm)}(\tau) d\tau \quad (27) \end{aligned}$$

と定義し、記号 $M_{m,n}^{\beta}$ と $L_{k,l}^{\alpha}$ はそれぞれ式 (11) と式 (15) に対応して次の様に定義した。

$$\begin{aligned} M_{m,n}^{\beta}(\mathbf{c}) &= \sum_{\{j|\mathbf{x}_j \in S_c\}} \left(u_j^\beta \int_{S_j} \frac{\partial I_{m,n}(\mathbf{y} - \mathbf{c})}{\partial \mathbf{n}(\mathbf{y})} dS_y \right. \\ & \quad \left. - q_j^\beta \int_{S_j} I_{m,n}(\mathbf{y} - \mathbf{c}) dS_y \right) \quad (28) \end{aligned}$$

$$L_{k,l}^{\alpha}(\mathbf{a}) = L_{k,l}(\mathbf{a}, t_\alpha) \quad (29)$$

3. アルゴリズム

拡散方程式に対するパネルクラスタリング積分方程式法のアルゴリズムには、時間軸を加味した上で、既存の多重極法のアルゴリズム⁽⁴⁾を利用する。2.3 のように離散化した場合に即して、その概要を示す。

3.1 要素分割 時間と空間ともに従来の境界積分方程式法と同じ要領で要素分割を行う。

3.2 4分木構造の決定 領域 D を囲む正方形を作り、これを level 0 の cell と呼ぶ。ある level l ($l \geq 0$) の cell C について、 C が所定の数よりも少ない境界要素しか含まない場合、 C を leaf と呼ぶ。それ以外の場合は、 C (親 cell) を 4 つの部分正方形に分割し、それらのうち境界要素を含む正方形だけを level $l+1$ の cell とする (C の子 cell と呼ぶ)。これらの cell についても同様な分割を繰り返し、境界要素の 4 分木構造を作成する。

3.3 式 (4) の積分の評価 現時刻を $t = t_\alpha$ ($\alpha = 0, 1, \dots, M$) とすると、過去の時刻 t_β ($\beta = 0, 1, \dots, \alpha-1$) における境界量 u_i^β, q_i^β およびモーメント $M_{m,n}^\beta$ は既に求められているものである。このとき、与えられた現時刻の境界量 u_i^α, q_i^α に対する式 (4) の積分は、以下の手順に従って評価される。

3.3.1 上向きの計算 最下層の level の cell から level 2 まで順に上に向かって、各 cell の中心を原点とするモーメント $M_{m,n}^\alpha$ ($m = 0, 1, \dots, p$) を計算する。leaf である cell に対しては式 (28) に従い、そうでない cell に対しては子 cell の $M_{m,n}^\alpha$ を用いて式 (23) に従って計算する。

3.3.2 下向きの計算 level 2 の cell から順に下に向かって各 cell の中心を原点とする局所展開係数 $L_{k,l}^\alpha$ ($k = 0, \dots, p$) を計算する。この際、ある level l の cell C の $L_{k,l}^\alpha$ に寄与する S_c は、全ての level l の cell のうち、 C

自身と C に隣接する cell を除いた cell C' に含まれる境界要素の合併集合であるとする。このような C' は、 C の親 cell と C' の親 cell とは隣接しているが C と C' は隣接していないような cell か、 C の親 cell と C' の親 cell とが隣接していないような cell かである。前者の C' から C の $L_{k,l}^\alpha$ への寄与は、式 (24) によって計算されるものであり、後者の C' からの寄与は、 C の親 cell の $L_{k,l}^\alpha$ を式 (25) に従って C の中心に原点移動したものにほかならない。さらに、 C が leaf である場合には、上のように計算された C の $L_{k,l}^\alpha$ を用いて式 (22) に従えば、現時刻における C 内の選点 $(\mathbf{x}, t_\alpha)$ に対する $S_c \times [0, t_\alpha]$ からの寄与が計算されたことになる。

3.3.3 直接計算 ある level l の cell C 内の現時刻における選点 $(\mathbf{x}, t_\alpha)$ への寄与に関して、3.3.2 で考慮されなかった $S \setminus S_c$ を含む cell とは、 C の親 cell と隣接する level $l-1$ の leaf C'' 、さらに C が leaf である場合には C 自身と C に隣接する level l の leaf C' である。これら C, C', C'' に含まれる $(S \setminus S_c) \times [0, t_\alpha]$ からの寄与は従来法で直接積分することによって求める。これを直接計算と呼ぶ。なお、説明上 3.3.2 と 3.3.3 を分けたが、実際には level に関する同じループ内で処理する。

3.3.3' 直接計算しない場合 直接計算を実行するためには、 $S \setminus S_c$ の過去の境界量 u_i^β, q_i^β を全て記憶しておくなくてはならない。しかし、現時刻 t_α を含まない時間区間上では、式 (4) の空間積分は特異積分とはならない。したがって、 $S \setminus S_c$ を含む cell C, C' あるいは C'' で計算された過去の $M_{m,n}^\beta$ と式 (21) を用いれば、過去の境界量を用いること無く直接計算と同等な計算が実行できる。ところが、式 (21) に含まれる級数は、現時刻 t_α と着目している時間区間 T_β が時間的に近接している場合 ($\beta \simeq \alpha$ の場合) には収束が悪いために、直接計算と比べて式 (21) を用いた計算の精度は低下し得る。したがって、実際の解析では時間区間 $T_{\alpha-\gamma+1}, \dots, T_\alpha$ ($\gamma \geq 1$) 上の境界量だけは記憶するものとして直接計算を行う。さらに、式 (21) に含まれる級数は、 C, C' あるいは C'' の中心と各々に含まれる境界要素とが空間的に離れている場合 (式 (21) で $|\mathbf{y} - \mathbf{c}|$ の値が大きい場合) にも収束が悪い。そこで、3.2 の 4 分木構造を作成する際に、ある cell を子 cell に分割する条件として、その cell が含む境界要素数が予め定めた数よりも少ないとしても、その cell の level が所定の level よりも小さい場合には子 cell に分割するとしておく。このように leaf の最小の level を設定することによって $|\mathbf{y} - \mathbf{c}|$ の値が大きい場合を排除し、級数の収束を改善する。

さて、式 (21) を用いた計算と直接計算とによる評価を比較することによって、 γ と leaf の最小の level (即ち、そのサイズ) とを決定するための指針を与える。今、あ

る γ と最小の level の leaf C (一辺の長さを L 、中心を点 $\mathbf{c}$ とする) が与えられたとき、式 (21) で考慮される $S \setminus S_c \times [0, t_{\alpha-\gamma}]$ から現時刻における C 内の選点 $(\mathbf{x}, t_\alpha)$ に及ぼす寄与のうち、通常最も大きい部分は時間的・空間的に近接した部分である。すなわち、各時間区間の長さを一定の Δt とすれば、現時刻 t_α から $\gamma \Delta t$ だけ離れた時間区間 $T_{\alpha-\gamma}$ と、選点 $\mathbf{x}$ を含む C とからなる部分である。このような部分からの寄与を式 (21) を用いて評価する際に問題となるのは、基本解を空間に関して Taylor 展開する事に伴う誤差である。したがって、

$$\frac{e^{-R^2/(4t)}}{t} \sim \frac{1}{t} \sum_n \frac{-(R^2/(4t))^n}{n!}$$

と展開してみれば、この誤差を支配するパラメータは $L/\sqrt{\gamma \Delta t}$ であることがわかる。そこで、モデルケースとして、 S を C の一辺とし、一様な密度を有する一、二重層ポテンシャルについて

$$\int_0^{\Delta t} \int_S K(\mathbf{c} - \mathbf{y}, (\gamma+1)\Delta t - \tau) dS_y d\tau \\ \int_0^{\Delta t} \int_S \frac{\partial K(\mathbf{c} - \mathbf{y}, (\gamma+1)\Delta t - \tau)}{\partial n_y} dS_y d\tau$$

を式 (21) によって評価したときの相対誤差を図 1 に示した。ここで、打ち切り項数 p は 10 と固定し、 γ は 5, 10, 15 とした。同図より、式 (21) による評価が適当であるためには、必要な精度に対応する $L/\sqrt{\gamma \Delta t}$ を選ばなければならない。例えば、 10^{-5} の精度が必要ならば、 L と γ が概ね $L/\sqrt{\gamma \Delta t} < 1$ を満足すればよい。

Fig.1 Relative errors

時刻毎に積分方程式 (4) を離散化した方程式を未知境界量について解くとき、多くの反復解法は式 (4) に対する離散行列に、ある反復ステップでの解を掛けたものを計算する方法を提供すれば実行可能となる。したがって、上記のアルゴリズムと連立方程式の反復解法の組合せによって積分方程式の高速解法が得られる。特に方程式の解法の一反復当たりの計算量は $O(N)$ であり、大きい問題では従来法の $O(N^2)$ より有利である。

4. 数値解析

4.1 数値解析における諸設定 本論文では、反復解法としてリスタート版の GMRES(k) 法⁽¹⁶⁾を用いた。ここで、リスタート回数 k は 10 とした。その前処理方法としては leaf に関するブロック対角スケーリング法⁽²⁰⁾を用い、この計算の過程に要する小行列の解法には Gauss の消去法を用いた。また、各時刻における解の初期推定値は、初期時刻においては 0 を与え、それ以降の時刻においては一つ前の時刻の解を与えた。

各種の積分の計算方法について説明する。モーメントを計算する際の式 (28) に含まれる境界積分は解析的に行えるが、桁落ちが起きやすい形となるので Gauss 積分公式によって数値的に積分した。また、M2L 変換の際の式 (27) の時間積分は、比較的収束の悪い $T_{\alpha-\gamma+1}, \dots, T_{\alpha}$ 上では解析的に積分し、それ以外は数値的に積分した。これと同種の式 (21) の時間積分も数値的に行った。また、3.3.3 で述べた直接計算は、時間積分を解析的に行った後に空間積分は数値的に積分した⁽¹⁷⁾。

以下に 3 つの例題を取り上げて、本手法の有効性について検討する。なお、使用した計算機は Alpha 21164 (533MHz) を CPU とし、主記憶容量 512 MB の DEC 互換機である。

4.2 数値解析例 (1) 円形領域における Neumann 問題を考える。境界条件として $q = H(t)$ を与えた。時間要素数 M は 100、時間選点は等間隔に $t = 0.001, 0.002, \dots, 0.100$ とし、境界要素数 N を 1000, 2000, 4000, 8000, 16000 とし計算を行った。ここで、解の精度は (空間要素長)/(時間要素長) に依存するから境界要素長も一定となるようにした。すなわち、各 N に対して円の半径 r を順に 1, 2, 4, 8, 16 とした。また、3.3.3' で述べたように、式 (21) による評価が実行可能であるためには、 r に応じて leaf の最小の level を大きくとらねばならない。ここでは、順に 3, 4, 5, 6, 7 とした。このように最小の leaf の level を設定した上で、一つの cell に含まれる最大の要素数を 100 とし 4 分木構造を作成した。また、無限級数の打ち切り項数 p を 10、記憶する過去の時刻の解は 10 時刻分 ($\gamma = 10$) であるとした。

図 2 は、境界要素数 N に対する総計算時間 (CPU 時間 [s]) を本手法と従来法について log-log でプロットしたものである。ここで扱った M と N については本手法が従来法よりも高速に計算を実行できていることがわかる。また、従来法がおおよそ $O(N^2)$ の計算量を要するのに対して、本手法は $O(N)$ であることが確認された。解析精度に関しては、各時刻で得られた境界データと厳密解⁽²¹⁾との相対誤差のうち最大のものについて、解析の初期段階においては本手法と従来法とはほとんど一致した。また、 $t = 0.003$ 以降では誤差が 0.1[%] を越え

ることはなかった。時刻の増加に伴って本手法の精度は従来法よりも低下する傾向にあったが、最終的な時刻の誤差は 0.01 [%] 程度であり、これは $L/\sqrt{\gamma\Delta t} \simeq 2.8$ に対して図 1 から推定される誤差とほぼ同程度である。

4.3 数値解析例 (2) 円形領域における Dirichlet 問題を考える。境界条件として $u = tH(t)$ を与える。その他の設定は 4.2 と同じである。図 3 には、 N に対する総計算時間 (CPU 時間 [s]) を本手法と従来法について示した。前例と同様に、本手法によって高速化が達成されていることがわかる。解析精度に関しては、従来法も含めて前例より精度が約 1 桁落ちたが、傾向は同様だった。

Fig.2 Computational time for numerical example 1

Fig.3 Computational time for numerical example 2

4.4 数値解析例 (3) 最後に、電子部品のヒートシンクを模擬した例題を挙げる。その形状は図 4 の通りであり (縦 0.11, 横 0.45)、外周を 3097 個の境界要素によって分割した。本例題では内点における u も求める。ここで考慮した内点は 4293 点であり、図 4 における領域内部の三角形の頂点に設けた (この三角形は内点を設置する便宜上のものに過ぎない)。内点における u を求めるには、時刻毎に境界量を求めた後に、3.2 と同様にして予め作成した内点に関する 4 分木構造に関して 3.3.2 の下向きの計算を一度実行すればよい。

境界条件は、底辺上においてはその両端で 0，その中央で 1 となるような二次関数状に u を与え、底辺以外の境界上では Robin 型の境界条件 $u = -q$ を与えた。時間要素数 M は 100 として、時間選点は $t = 0.0001, 0.0002, \dots, 0.0100$ とした。また、 $p = 10$ ， $\gamma = 10$ として、一つの cell に含まれる最大の境界要素数は 100 とした。このときの leaf の最小の level は 4 である。

Fig.4 Heatsink model

図 5 にはいくつかの時刻で得られた u の分布を示す。解の挙動は自然であり、比較的複雑な境界を有する問題に対しても本手法は十分適用できることがわかる。

Fig.5 Distribution of u

5. 結言

本論文では、時間域における境界積分方程式の高速解法の開発の第一歩として、二次元拡散方程式に対するパ

ネルクラスタリング積分方程式法の定式化を示し、例題によって本手法の有効性を検証した。

文 献

- (1) Greengard, L., The Rapid Evaluation of Potential Fields in Particle Systems, (1988), MIT press.
- (2) Hackbusch, W. and Nowak, Z.P., On the Fast Matrix Multiplication in the Boundary Element Method by Panel Clustering, *Numer. Math.*, **54** (1989), 463-491.
- (3) Petersdorff, T., Schwab, C. and Schneider, R., Multi-wavelets for Second-kind Integral Equations, *SIAM J. Num. Anal.*, **34** (1997), 2212-2227.
- (4) 西村直志・吉田研一・小林昭一，多重極積分方程式法による 3 次元クラック問題の解析について，境界要素法論文集，**14** (1998)，37-42.
- (5) Coifman, R., Rokhlin, V. and Wandzura, S., The Fast Multipole Method for the Wave Equations: A Pedestrian Prescription, *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, **35** (1993), 7-12.
- (6) Epton, M.A. and Dembart, B., Multipole Translation Theory for the Three-dimensional Laplace and Helmholtz Equations, *SIAM J. Sci. Comput.*, **16** (1995), 865-897.
- (7) 福井卓雄・持田哲朗，平面弾性問題における高速多重極境界要素解析，計算工学講演論文集，**2** (1997)，321-324.
- (8) 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，**1** (1998)，365-372.
- (9) 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** (1998)，105-110.
- (10) Ergin, A.A., Shanker, B. and Michielssen, E., Fast Evaluation of Three-dimensional Transient Wave Fields using Diagonal Translation Operators, *J. Comput. Phys.*, **146** (1998), 157-180.
- (11) Heyman, E., Time-dependent Plane-wave Spectrum Representations for Radiation from Volume Source Distributions, *J. Math. Phys.*, **37** (1996), 658-681.
- (12) Heyman, E. and Devaney, A.J., Time-dependent Multipoles and their Application for Radiation from Volume Source Distributions, *J. Math. Phys.*, **37** (1996), 682-692.
- (13) Marengo, E.A. and Devaney, A.J., Time-dependent Plane-wave and Multipole Expansions of the Electromagnetic Field, *J. Math. Phys.*, **39** (1998), 3643-3660.
- (14) Greengard, L. and Strain, J., The Fast Gauss Transform, *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, **12** (1991), 79-94.
- (15) 高橋徹・西村直志・小林昭一，時間域における境界積分方程式の高速解法について，計算工学講演会論文集，**4** (1999)，959-962.
- (16) Saad, Y. and Schultz, M.H., GMRES; A Generalized Minimum Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **7** (1986), 856-869.
- (17) 例えば，田中正隆・松本敏郎・中村正行，境界要素法，(1991)，140-144，培風館。
- (18) Widder, D.V., The Heat Equation, (1975), Academic press.
- (19) 森口繁一・宇田川銑久・一松信，数学公式 III (特殊関数)，(1987)，91-95，岩波書店。
- (20) 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化，計算工学講演会論文集，**1** (1996)，315-318.
- (21) Carslaw, H.S. and Jaeger, J.C., Conduction of Heat in Solids, (1947)，273-275，Clarendon press.