

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

Large Scale Multiple Scattering Analysis Using a Parallelized Time-Domain Fast Multipole Boundary Element Method Based on the Convolution Quadrature Method

齋藤 隆泰¹⁾, 瀬川 尚揮²⁾, 石田 貴之³⁾, 廣瀬 壮一⁴⁾

Takahiro SAITOH, Naoki SEGAWA, Takayuki ISHIDA and Sohichi HIROSE

- 1) 東京工業大学大学院情報理工学研究科 (〒 152-8552 東京都目黒区大岡山 2-12-1, E-mail: tsaitoh@qnde.mei.titech.ac.jp)
- 2) 福井大学大学院工学研究科 (〒 910-8507 福井県福井市文京 3-9-1, E-mail: fa040367@u-fukui.ac.jp)(研究時)
- 2) 福井大学大学院工学研究科 (〒 910-8507 福井県福井市文京 3-9-1, E-mail: stone@taku.anc-d.fukui-u.ac.jp)(研究時)
- 3) 東京工業大学大学院情報理工学研究科 (〒 152-8552 東京都目黒区大岡山 2-12-1, E-mail: shirose@cv.titech.ac.jp)

In this research, a large scale multiple scattering problem with several hundred thousand unknowns per time step is solved by a time-domain fast multipole boundary element method based on the convolution quadrature method (FM-CQBEM). After the FM-CQBEM formulation is described, some numerical and MPI (Message Passing Interface) parallelization techniques for implementing a large scale wave analysis by the FM-CQBEM are discussed. As numerical examples, large scale multiple scattering fields around many cavities obtained by the FM-CQBEM are shown with the discussion of parallelization efficiency.

Key Words: Time-domain BEM, MPI parallelization, Convolution quadrature method (CQM), Fast multipole method (FMM)

1. はじめに

本論文では、波動伝搬問題のための演算子積分時間領域高速多重極境界要素法を、並列処理や数値計算上の注意点を踏まえた上で、特に大規模な多重散乱問題に適用する。

近年、Lubich により提案された演算子積分法 (CQM: Convolution Quadrature Method)⁽¹⁾ を時間領域境界積分方程式の畳込み積分の離散化に用いる演算子積分時間領域境界要素法に関する研究が行われてきた。現在までに、スカラー波動問題⁽²⁾ や弾性波動問題⁽³⁾ へ適用した例が報告されている。また、演算子積分時間領域境界要素法の計算時間や記憶容量を削減するために、高速多重極法を適用する方法についても検討され、弾性波動問題⁽⁴⁾ や、粘弾性波動問題⁽⁵⁾ への応用等が行われてきた。Lubich の演算子積分法を境界要素法に適用すれば、時間増分が小さい場合の解の安定性を保つことができる。また、時間領域基本解を直接に利用するのではなく、代わりにラプラス変換域における基本解を用いることができる。そのため、各ステップ毎の計算は、周波数領域の解法とほぼ同様の手順で扱えることとなる。また、粘弾性波動問題のような時間領域で閉じた基本解を求めることが困難な問題でさえも、容易に

時間領域の解を導くことができる⁽⁵⁾。

一方で、近年の計算機ハードウェアの発達は目覚ましく、比較的容易に並列化計算を実行できる環境が整ってきた。特に OpenMP や MPI (Message Passing Interface) は、科学技術計算に特化したプログラミング言語である Fortran を用いたとしても、十分に性能を発揮し、扱える状況にある。このような状況を考えれば、演算子積分時間領域境界要素法についても並列化を施し、いくつかの数値計算上の工夫を取り入れた上で、より大規模な問題を解析できるようにすることは自然な流れであると考えられる。

そこで、本研究では、面外波動の散乱問題を例に取り、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を、各時間ステップあたりの未知数が数十万以上の大規模多重散乱問題へと適用する。以下では、まず、支配方程式、境界積分方程式、演算子積分法について簡単に説明した後、面外波動問題における演算子積分時間領域境界要素法の定式化、および高速多重極法の適用方法について簡単に説明する。そして、実際に演算子積分時間領域高速多重極法を大規模多重散乱問題へ適用する場合の、並列化の具体的な方法、数値計算上の注意点について検討し、数値解析例を示す。最後に、結論、今後の課題等について述べることとする。

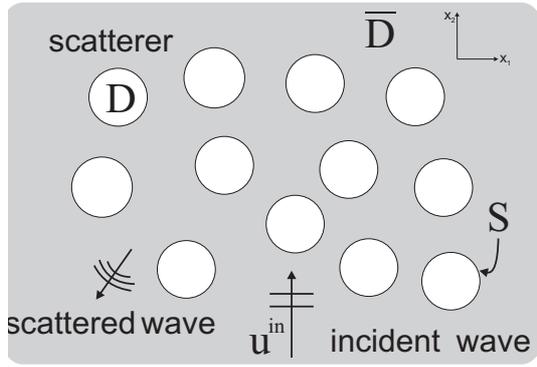


Fig. 1 SH wave scattering by cavities.

2. 面外波動の散乱問題

2.1. 支配方程式

以下では、2次元直交直線座標系に関する点 \mathbf{x} の座標成分を $x_i (i = 1, 2)$ で表現する。さて、Fig.1 のような均質で等方な無限弾性体 \bar{D} 中における、散乱体 D による面外波動の散乱問題について考える。入射波 u^{in} が散乱体 D の表面 S に到達するまで、境界上の面外変位 $u(\mathbf{x}, t)$ 、表面力 $p(\mathbf{x}, t)$ (以下、単に変位や表面力と呼ぶ) は静止過去の条件を満足する。つまり、時刻 $t = 0$ において、初期条件

$$u(\mathbf{x}, 0) = 0, \quad p(\mathbf{x}, 0) = \mu \frac{\partial u(\mathbf{x}, 0)}{\partial n} = 0 \quad \text{in } \bar{D} \quad (1)$$

を満足すると仮定する。ここに、 $\partial/\partial n$ は法線方向微分を表し、 μ はせん断弾性定数である。また、変位 u に対する波動方程式は、時刻 t において以下のように書ける。

$$\nabla^2 u = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \quad \text{in } \bar{D} \quad (2)$$

$$u = \hat{u} \quad \text{on } S_1, \quad p = \hat{p} \quad \text{on } S_2, \quad S_2 = S \setminus S_1 \quad (3)$$

ここで c は波速を表し、 \hat{u}, \hat{p} はそれぞれ、変位および表面力に対する与えられた境界条件を表している。

2.2. 時間領域境界要素法

この散乱問題の解は、次の時間領域境界積分方程式を解くことで求まる。

$$\bar{C}(\mathbf{x})u(\mathbf{x}, t) = u^{\text{in}}(\mathbf{x}, t) + \int_S G(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) * p(\mathbf{y}, t) dS_{\mathbf{y}} - \int_S T(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) * u(\mathbf{y}, t) dS_{\mathbf{y}} \quad (4)$$

ここで、 $*$ は時間に関する畳込み積分を表す。また、 \bar{C} は境界形状に依存するいわゆる自由項⁽⁶⁾を表し、境界 S を一定要素で離散化する場合は $\bar{C} = 1/2$ となる。一方、 $G(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$ および $T(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$ は2次元面外波動問題における基本解⁽⁶⁾および対応する二重層核である。

通常の時間領域境界要素法では、式(4)に対して、時間・空間に適切な離散化を施し、逐次的に第一ステップから解を求めていくが、本論文では、式(4)の畳込み積分の離散化に、Lubichにより提案された演算子積分法を用いる。

3. 演算子積分時間領域境界要素法

3.1. 演算子積分法 (CQM)

演算子積分時間領域境界要素法の定式化を示す前に、Lubichの方法について簡単にまとめておく。詳しい条件や証明については文献⁽¹⁾等を参照されたい。

Lubichは、畳込み積分 $f(t) * g(t)$ を、関数 $f(t)$ のラプラス変換を用いて離散化近似する手法を提案した。一般的に、畳込み積分は次のように表される。

$$f(t) * g(t) = \int_0^t f(t-\tau)g(\tau)d\tau, \quad t \geq 0 \quad (5)$$

Lubichの方法を用いれば、式(5)は、時間 t を時間増分 Δt を用いて N ステップに分割することで、次のように近似することができる。

$$f(n\Delta t) * g(n\Delta t) \simeq \sum_{j=0}^n \omega_{n-j}(\Delta t)g(j\Delta t), \quad (n = 0, 1, \dots, N) \quad (6)$$

ただし、 $\omega_j(\Delta t)$ は重み関数であり、畳込み積分の積分核 $f(t)$ のラプラス変換

$$\hat{f}(s) = \int_0^{\infty} f(t)e^{-st} dt \quad (7)$$

により次のように表される。

$$\omega_n(\Delta t) \simeq \frac{\mathcal{R}^{-n}}{L} \sum_{l=0}^{L-1} \hat{f}\left(\frac{\delta(\zeta_l)}{\Delta t}\right) e^{-\frac{2\pi i n l}{L}} \quad (8)$$

ここで、 i は虚数単位である。また、 f のラプラス変換 \hat{f} の存在を保証するためには、引数の実部が正のときに正則でなければならない。一方、式(8)の $\delta(\zeta_l)$ は線形マルチステップ法(差分法)における生成多項式の商であり、引数 ζ_l は半径 $\mathcal{R} < 1$ の円周上の L 等分点を考え、 $\zeta_l = \mathcal{R}e^{2\pi i l/L}$ によって表される。そして、 \mathcal{R} は目標とする精度 ϵ によって決定されるパラメータであり、

$$\mathcal{R} = \sqrt{\epsilon}^{\frac{1}{L}} \quad (9)$$

により決定することができる。

3.2. 演算子積分時間領域境界要素法の定式化

式(6)を用いて、時間領域境界積分方程式(4)に現れる畳込み積分を離散化近似する。以下では、境界上の変位 u や表面力 p が、各境界要素上で一定の値を取る場合について説明する。境界 S を M 個の境界要素で離散化し、選点を各境界要素中央に取り、式(4)の畳込み積分を、式(6)を用いて離散化近似すれば、第 n ステップに関して、次の離散化された境界積分方程式を得ることができる。

$$\frac{1}{2}u(\mathbf{x}, n\Delta t) = u^{\text{in}}(\mathbf{x}, n\Delta t) + \sum_{\alpha=1}^M \sum_{k=1}^n \left[A^{n-k}(\mathbf{x}, \mathbf{y}^{\alpha}) p^{\alpha}(k\Delta t) - B^{n-k}(\mathbf{x}, \mathbf{y}^{\alpha}) u^{\alpha}(k\Delta t) \right] \quad (10)$$

ここで、右上添字 α は、点 \mathbf{y} に関しての指標を表す。また、 A^m および B^m は基本解および二重層核に関する影響関数であ

り、次のように表わされる。

$$A^m(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{\mathcal{R}^{-m}}{L} \sum_{l=0}^{L-1} \left[\int_S \hat{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, s_l) dS_y \right] e^{-\frac{2\pi i m l}{L}} \quad (11)$$

$$B^m(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{\mathcal{R}^{-m}}{L} \sum_{l=0}^{L-1} \left[\int_S \hat{T}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, s_l) dS_y \right] e^{-\frac{2\pi i m l}{L}} \quad (12)$$

式(11), (12)において, s_l は $s_l = \delta(\zeta_l)/\Delta t$ で定義される。また, $\delta(\zeta_l)$ の定義はいくつか考えられるが, 本研究では,

$$\delta(\zeta) = (1 - \zeta) + \frac{(1 - \zeta)^2}{2} \quad (13)$$

と定義する。一方, $\hat{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, s)$ および $\hat{T}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, s)$ はラプラス変換域における2次元面外波動問題における基本解および対応する二重層核であり

$$\hat{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, s) = \frac{1}{2\pi\mu} K_0(sr) \quad (14)$$

$$\hat{T}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, s) = \mu \frac{\partial}{\partial n_y} G(\mathbf{x}, \mathbf{y}, s) = -\frac{s}{2\pi} K_1(sr) \frac{\partial r}{\partial n_y} \quad (15)$$

で表される。ただし, K_n は n 次の第二種変形ベッセル関数, $\partial/\partial n_y$ は点 \mathbf{y} における法線方向微分であり, $r = |\mathbf{x} - \mathbf{y}|$ を示している。また, 式(14), (15)において, 以降の表記を簡単にするために $s = s/c$ としている。影響関数(11), (12)の積分核は, 式(6), (8)の演算子積分法を用いたことにより, もはや時間領域ではなく, ラプラス変換域の積分核であることに注意する。式(10)において, 第 n ステップにおける変位 $u^\alpha(n\Delta t)$ や表面力 $p^\alpha(n\Delta t)$ に関する項を左辺に移行すれば, 次の式を得る。

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} u(\mathbf{x}, n\Delta t) \\ & + \sum_{\alpha=1}^M [B^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}^\alpha) u^\alpha(n\Delta t) - A^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}^\alpha) p^\alpha(n\Delta t)] \\ & = u^{\text{in}}(\mathbf{x}, n\Delta t) \\ & + \sum_{\alpha=1}^M \sum_{k=1}^{n-1} [A^{n-k}(\mathbf{x}, \mathbf{y}^\alpha) p^\alpha(k\Delta t) - B^{n-k}(\mathbf{x}, \mathbf{y}^\alpha) u^\alpha(k\Delta t)] \end{aligned} \quad (16)$$

式(16)において, 右辺は境界既知量のみで構成されることから, 初期条件により, 第一ステップから順番に, 最終ステップまで逐次的に解を求めることが可能である。具体的に, 式(16)の右辺第二項の $\sum_{\alpha=1}^M \sum_{k=1}^{n-1} [A^{n-k}(\mathbf{x}, \mathbf{y}^\alpha) p^\alpha(k\Delta t)]$ を $u^{RA,n} = \sum_{\alpha=1}^M \sum_{k=1}^{n-1} [A^{n-k}(\mathbf{x}, \mathbf{y}^\alpha) p^\alpha(k\Delta t)]$ として行列表示すると, 次の式を得る。

$$\begin{pmatrix} \mathbf{u}^{RA,1} \\ \mathbf{u}^{RA,2} \\ \mathbf{u}^{RA,3} \\ \mathbf{u}^{RA,4} \\ \vdots \\ \mathbf{u}^{RA,n} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{A}^1 \mathbf{p}^1 \\ \mathbf{A}^2 \mathbf{p}^1 + \mathbf{A}^1 \mathbf{p}^2 \\ \mathbf{A}^3 \mathbf{p}^1 + \mathbf{A}^2 \mathbf{p}^2 + \mathbf{A}^1 \mathbf{p}^3 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \mathbf{A}^{n-1} \mathbf{p}^1 + \mathbf{A}^{n-2} \mathbf{p}^2 & \dots & \dots & + \mathbf{A}^1 \mathbf{p}^{n-1} \end{bmatrix} \quad (17)$$

ここで, $\mathbf{p}^m, \mathbf{u}^{RA,m}$ は, それぞれ $p^\alpha(m\Delta t), u^{RA,m}$ に関するベクトル表示を表わし, \mathbf{A}^m は, 対応する影響関数から成る小行

列を表している。当然, $\sum_{\alpha=1}^M \sum_{k=1}^{n-1} [B^{n-k}(\mathbf{x}, \mathbf{y}^\alpha) u^\alpha(k\Delta t)]$ についても同様に計算することができる。

4. 演算子積分時間領域高速多重極境界要素法

演算子積分法に高速多重極法を適用する場合, 式(17)の行列ベクトル積の計算に高速多重極法を用いて計算を高速化する。ここでは, 紙面の都合上, 高速多重極法の構成に必要な, いくつかの式について列挙する。定式化の詳細は, 例えば文献(2)を参照されたい。

2次元面外波動問題における基本解(14)の多重極展開は, 点 \mathbf{y} 近傍に多重極点 \mathbf{y}_0 を設け, 点 \mathbf{y}_0 から見た \mathbf{x}, \mathbf{y} の極座標成分をそれぞれ $(r, \theta), (\rho, \phi)$ とすれば, 次の式で表される。

$$\begin{aligned} \hat{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, s) &= \frac{1}{2\pi\mu} \sum_{n=-\infty}^{\infty} K_n(sr) I_n(s\rho) e^{in(\theta-\phi)} \\ &= \frac{1}{2\pi\mu} \sum_{n=-\infty}^{\infty} M_n^G K_n(sr) e^{in\theta} \end{aligned} \quad (18)$$

ここで M_n^G は, 基本解に対する多重極モーメントであり,

$$M_n^G = I_n(s\rho) e^{-in\phi} \quad (19)$$

で表される。また, I_n は n 次の第一種変形ベッセル関数である。一方, 二重層核に対する多重極モーメント M_n^H は $M_n^H = \partial M_n^G / \partial n_y$ で求められる。

高速多重極法を構成する上で必要な M2M, M2L, L2L 等の移動公式は, それぞれ次の通りである。

$$M_n' = \sum_{m=-\infty}^{\infty} M_m I_{n-m}(s\rho) e^{-i(n-m)\phi} : (\text{M2M}) \quad (20)$$

$$L_n = \frac{1}{2\pi\mu} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m M_m K_{m+n}(s\rho) e^{i(m+n)\phi} : (\text{M2L}) \quad (21)$$

$$L_n' = \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^{n-m} L_m I_{n-m}(s\rho) e^{i(n-m)\phi} : (\text{L2L}) \quad (22)$$

ただし L_n は局所展開係数, M_n', L_n' はそれぞれ M2M, L2L によって得られる新しい多重極点, 局所展開点における多重極係数, 局所展開係数であり, この場合の ρ, ϕ は新しい展開点から見た元の展開点の極座標成分を示している。

なお, 多重極係数や式(20), (21), (22)等の各種展開公式は, 次節で述べるような数値計算上の要因で引数の値に応じてスケールリングすることができるが(2), 本論文ではその詳細は割愛する。

5. 大規模波動問題に対する数値計算上の注意点

以下では, これまで述べた定式化の下, 1ステップ当たりの未知数が数十万となるような大規模波動問題に対して, 演算子積分時間領域高速多重極境界要素法を実行する際の数値計算上の注意点をいくつか示しておく。

5.1. M2Lの切り捨ての検討

前論文(2)(4)において, 変形ベッセル関数 I_n や K_n の引数の値に応じて, 多重極係数や局所展開係数をスケールリングす

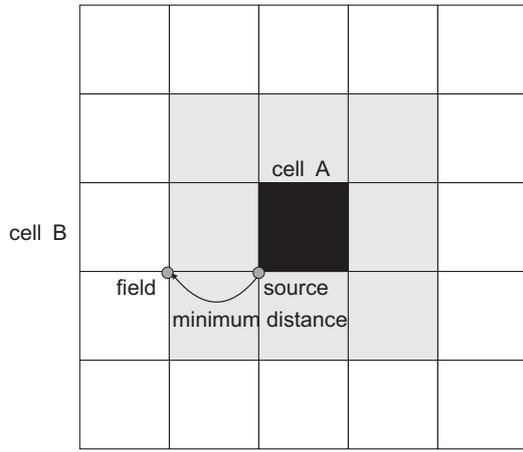


Fig.2 M2L translation.

る方法について述べた。スケーリングを施した理由は、変形ベッセル関数 I_n や K_n の値が、それらの引数の値によって、非常に大きく、または小さくなるために、数値計算で扱える範囲を超えてしまうことが要因であった。実際、例えば基本解 (14) は、 K_n の引数の実部 $\Re[sr]$ が大きい場合、

$$\hat{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, s) = \frac{1}{2\pi\mu} K_0(sr) \simeq \frac{1}{2\pi\mu} e^{-sr} \quad (23)$$

となるため、特に大規模な問題を解析する場合は r の値が大きくなることにより、 K_n がアンダーフローを起こす。前論文では、高速多重極法を構成する上での近傍セル内に存在する点 \mathbf{y} からの直接計算について、数値計算に必要な 10 進桁数を β とした

$$\Re[sr] > \beta \log 10 \quad (24)$$

を直接計算の切り捨て条件として採用し、引数が多い場合に切り捨てを行った。本論文では、これに基づき、より大規模問題を解析するために、高速多重極法における M2L の計算についても切り捨てを検討する。以下では、高速多重極法において、第 1 近傍を遠方セルとして考慮した場合について説明する。

第 1 近傍を利用した場合の M2L における各セルの位置関係は Fig.2 のようになる。Fig.2 中の中央の黒セル (cell A) を注目セルとする。cell A に対して近傍がグレーのセルであり、無色のセルが遠方セルにあたる。このとき、例えば cell A と Fig.2 における無色の cell B との M2L 関係について考えると、それら cell A, cell B 内に存在するソース点 (source) と観測点 (field) のうち、起こり得る両点の最小距離 (cell 間最少距離) の例は、Fig.2 のような状況の場合であり、この時が、同一の s に対して基本解 (23) が最大値を取る。よって、この場合のソース点と観測点との距離、すなわち cell 間最少距離を閾値として、cell A, cell B 内における他のソース点と観測点との影響関数の計算を切り捨てることを考えれば、M2L における切り捨てアルゴリズムは次のように定められる。

1. M2L の対象となるセル同士の cell 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 とし、予め設定した β, s に対し、式 (24) を計算する
3. 式 (24) 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 を実行する。

実際の計算では、引数 sr は $sr = \delta(\zeta)r/(c\Delta t)$ である。Fig.3 に式 (13) で表わされた引数 $\delta(\zeta)$ を $\mathcal{R} = 0.9$ の場合について、複素平面上にプロットしたものを示す。Fig.3 より、 $\delta(\zeta)$ はおよそ $0 < \Re[\delta(\zeta)] \leq 4$ 程度の値で推移する。仮に $c\Delta t$ を要素長程度の値になるように設定したとしても、解析対象領域がその数 10 倍以上におよぶ場合、引数 sr の値は相当に大きくなり切り捨ての対象となる。

5.2. MPI による並列化

論文冒頭でも述べたように、近年では、大規模問題においては、なんらかの並列化手法を併用することが必須であると思われる。ここでは、演算子積分時間領域高速多重極境界要素法に MPI 並列化を施す場合の方法について述べる。

PWTD アルゴリズムを用いた場合の時間領域境界要素法についての並列化では、大谷⁽⁷⁾ は例えば、解くべき問題の領域をいくつかに分割し、MPI で計算する方法を取っている。演算子積分時間領域高速多重極境界要素法では、空間に対しては高速多重極法を適用するが、各時間ステップにおいて、それらは L 回実行する必要がある。演算子積分法の利用は解の安定性を増す利点を備えるので、時間ステップを通常的时间領域境界要素法よりも多く取ることができる。そのため、式 (11),(12) の計算に FFT を利用した場合、通常 $L = N$ とするため、総時間ステップ数 N が大きければ、1 ステップ当たりの高速多重極法の実行回数も必然的に増加する。そこで、本研究では、解くべき領域を分割し MPI で並列化するのではなく、各ステップにおいて L 回実行する高速多重極法の計算を MPI で並列化する。

演算子積分時間領域高速多重極境界要素法で MPI 並列化をする部分を明確にするために、式 (16) の右辺第二項を具体的に書き直すと、

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha=1}^M \sum_{k=1}^{n-1} \left[A^{n-k}(\mathbf{x}, \mathbf{y}^\alpha) p^\alpha(k\Delta t) - B^{n-k}(\mathbf{x}, \mathbf{y}^\alpha) u^\alpha(k\Delta t) \right] \\ = & \sum_{k=1}^{n-1} \left[\frac{\mathcal{R}^{n-k}}{L} \sum_{l=0}^{L-1} \sum_{\alpha=1}^M \left(\int_S \hat{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}^\alpha, s_l) p^\alpha(k\Delta t) dS_y \right. \right. \\ & \left. \left. - \int_S \hat{T}(\mathbf{x}, \mathbf{y}^\alpha, s_l) u^\alpha(k\Delta t) dS_y \right) e^{-\frac{2\pi i(n-k)l}{L}} \right] \end{aligned} \quad (25)$$

となる。式 (25) の実線部分が MPI で並列化される部分である。つまり、各 l についての実線部分の計算を MPI で並列化する。MPI 並列化を施した場合、各プロセスにおける式 (25) の実線部分の計算結果は、一度プロセスゼロへとギャザされ、 l についての総和を計算することとなる。しかしながら、ここで式 (25) の点線部分は高速フーリエ変換の形で表されていることに注意する。そのため、もし $L = N$ とした場合は、ギャザされ

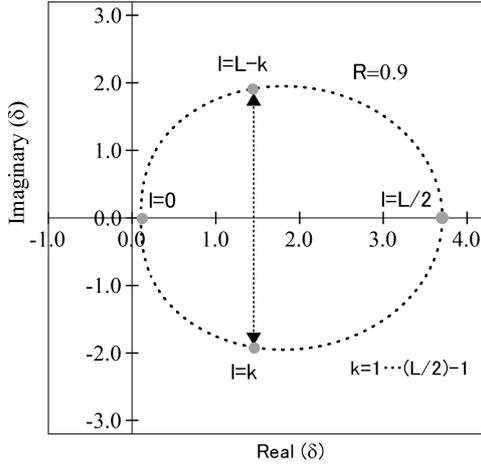


Fig. 3 $\delta(\zeta)$ on the complex plane when $\mathcal{R} = 0.9$.

た L 個の高速多重極法による計算結果の組をプロセスゼロにおいて FFT することで、式 (25) の点線部分についての計算を高速に実行することができる。こうして FFT を施すことで得られる L 個の計算結果の組は、それぞれ第 k ステップにおいて、第 $k-1$ ステップでの境界未知量 \mathbf{p}^{k-1} と小行列 \mathbf{A}^{n-k} との行列ベクトル積等に他ならない。つまり、例えば、式 (17) の $n=2$ ステップ目の計算にて、これら MPI 並列化を施し、さらにプロセスゼロでギャザした後に FFT より得られる L 個の計算結果は、それぞれ式 (17) における右辺の 2 つの点線で囲まれたうちの、左側の L 個の小行列とベクトル積の結果を表していることに他ならない。実際の数値計算上では、式 (17) の左辺に対応する配列を予め用意しておき、第 1 ステップから最終ステップまで順番に、境界値が求まり次第、求まった境界値を用いて高速多重極法を MPI で計算し、その結果をプロセスゼロで FFT することによって各小行列との積の結果を順次用意した配列に加算していくこととなる。

5.3. 対称性を考慮した影響関数の計算

影響関数の計算 (11), (12) では、パラメータ $s_l (l=0, \dots, L-1)$ についての計算をそれぞれ実行しなければならない。しかしながら、式 (11), (12) を、全ての l に対して直接計算することは、計算効率の点で好ましくない。そこで、引数 $\delta(\zeta)$ の対称性を考慮することで、影響関数の計算を削減する。Fig.3 より、引数 $\delta(\zeta)$ は、 $\Re[\delta(\zeta)] > 0$ の範囲内で、 $l=0$ において原点付近から、反時計周りに $l=L/2$ で実軸を横切り $l=L-1$ まで歪んだ円形の軌跡を描く。このとき、複素平面上の虚部 $\Im[\delta(\zeta)] > 0$ に対応する $l > L/2$ の部分は実軸に関して対称であり、 $\Im[\delta(\zeta)] < 0$ に対応する $l < L/2$ の部分と複素共役の関係にある。したがって、影響関数を計算する際、まず、 $l=0 \dots L/2$ について、式 (11), (12) の [] 内の値を計算しておき、残りの $L/2+1$ から、 $L-1$ についての計算は、引数の対称性を考慮し、 $l=1 \dots L/2-1$ の結果の複素共役を取れば、自動的に求まることとなる。

6. 数値解析例

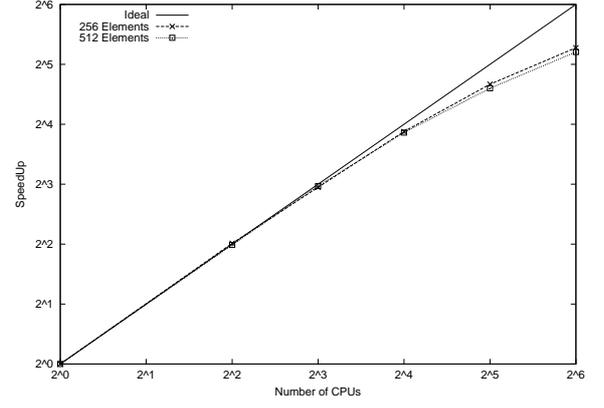


Fig. 4 Speedup.

以下、数値解析例を示す。以下では、離散化された各境界上の変位 u や表面力 p は一定として計算を行い、空洞の半径を a 、総時間ステップ数とパラメータ L との関係 $N=L$ 、時間増分を $c\Delta t/a=0.05$ とする。また、式 (9) において、 $\epsilon=1.0e^{-10}$ として計算された \mathcal{R} を用いる。M2L の切り捨てについては、式 (24) で $\beta=18$ とした。計算は倍精度で行っているが、切り捨ての影響ができる限り計算結果に影響を与えないよう、 $\beta=18$ と設定している。また、多重極展開や局所展開の無限和の打ち切り項数は $p=10$ とした。

6.1. MPI 計算効率の確認

はじめに、簡単に MPI を適用した場合の並列化効率を確認しておく。Fig.4 は 1 つの空洞を 256 要素、512 要素で分割し、MPI 並列化における CPU 数 (プロセス数) を変化させた場合の並列化効率 (Speedup) を示している。ただし、総時間ステップ数を $N=256$ とし、CPU 数が n 倍になれば計算速度は n 倍となる理想的な状態を Fig.4 の実線で示している。使用する CPU 数の増加に伴い、プロセス間の通信コスト等が増大するため、理想的な状態に一致することはないが、概ね、並列化による高速化が実現できていることがわかる。

6.2. 大規模多重散乱解析

次に、Fig.5 に示すような 1000 個の円形空洞による面外波動の大規模多重散乱解析を行った結果を示す。ただし、空洞は $150.0a \times 60.0a$ の長方形領域にランダムに配置した。各空洞は 128 個の境界要素に分割した。したがって、全境界要素数は 128,000、総時間ステップ数を $N=1024$ としたため、トータルでは、 $128,000 \times 1024 = 131,072,000$ の未知数を求める問題となる。また、入射波は x_2 軸に沿って伝搬する平面波とし、次のように与えた。

$$u^{\text{in}}(\mathbf{x}, t) = u_0(1 - \cos 2\pi\alpha)$$

$$\alpha = \begin{cases} \frac{c}{\lambda} \left(t - \frac{x_2 + 30.0a}{c} \right) & \text{for } (0 \leq \alpha \leq 1) \\ 0 & \text{for otherwise} \end{cases} \quad (26)$$

ここで u_0 は入射波の変位振幅、 λ は波長を表している。ただし $\lambda/a=2.0$ とした。また、並列化については、Fig.6 で示されるように、1 プロセスあたり 1 ノードを占有するよう MPI で 8 並列を施し、さらに各 MPI プロセス中において、OpenMP に

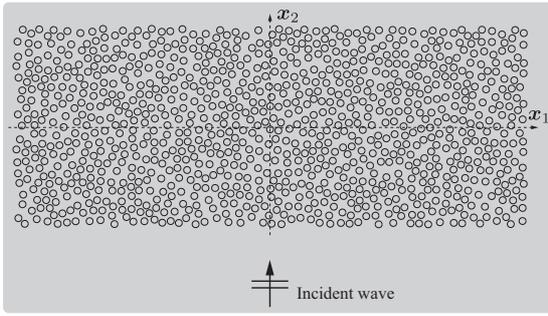


Fig. 5 Multiple scattering analysis model with 1000 cavities.

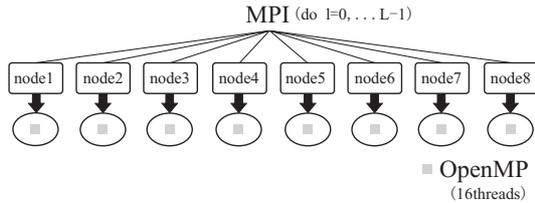


Fig. 6 MPI parallelization with OpenMP.

よる計 16 スレッドの並列化を行い, 合計 $8 \times 16 = 128$ 並列で計算を行っている. OpenMP は式 (25) における MPI で処理する l の内側に存在する近傍セル内の要素に対する直接計算等で存在する, いくつかのループについて行っている.

Fig.7-(a),(b),(c) は, それぞれ時刻 $ct/a = 6.0$, $ct/a = 23.0$, $ct/a = 40.0$ のときの空洞群周辺の面外波動場を示している. Fig.7-(a) より, 入射波に向かって前面側に存在する空洞による散乱波を確認することができる. Fig.7-(a),(b),(c) と入射波が, 空洞により散乱されながら, 伝搬していく様子が再現されている. 本解析では京都大学学術情報メディアセンターの大型計算機 Thin SMP クラスタを用い, 境界値問題を解くのに要した計算時間はおよそ 24 時間であった.

7. 結論および今後の展望

本論文では, 演算子積分時間領域高速多重境界要素法を用いて, 1 ステップあたりの未知数が数十万規模となる大規模多重散乱解析を行った. 定式化を示し, 実際の数値計算を行う上でのいくつかの工夫点について紹介した. 今後は, 並列化による計算効率についてより詳細に検討すると共に, GPU を用いた並列化について検討する予定である.

謝辞

本研究を行うにあたり, 故福井卓雄先生(福井大学大学院工学研究科 原子力・エネルギー安全工学専攻教授)に多くの助言をいただきました. ここに, 福井先生の境界要素法に関する数多くのご功績を偲び, 心から追悼の意を表します. また, 本研究は, 第一著者に対する, みずほ学術振興財団第 53 回工学関係研究助成のご支援の下, 行われたものです. この場を借りて感謝申し上げます.

参考文献

(1) Lubich, C. : Convolution quadrature and discretized operational calculus I *Numer. Math.*, **52**, (1988), pp. 129-145.

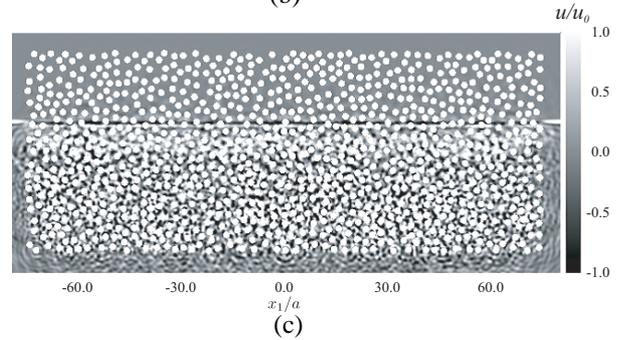
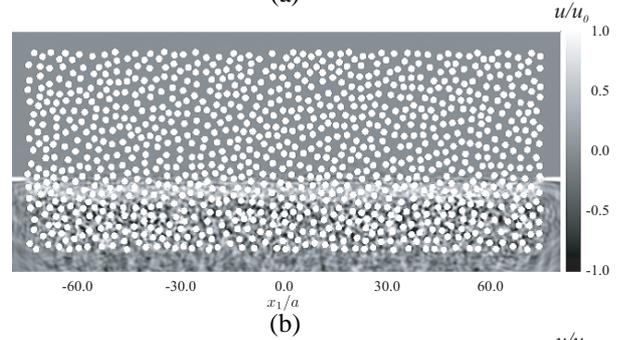
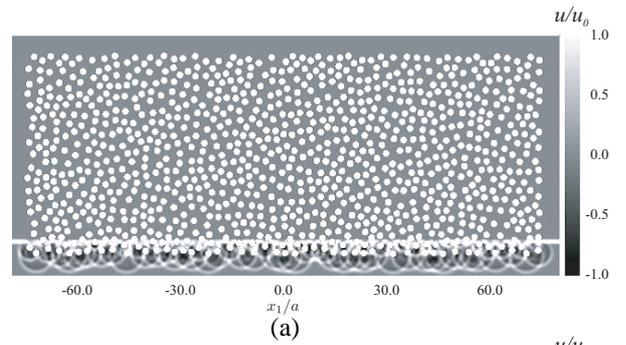


Fig. 7 SH wave fields around 1000 cavities at (a) $ct/a = 6.0$, $ct/a = 23.0$, $ct/a = 40.0$.

(2) 福井卓雄・岡山美央・石田貴之: 2次元波動伝播問題における演算子積分時間領域境界要素法および高速多重極法の適用, 計算数理工学論文集, **6-2** (2006), pp.153-158.

(3) 斎藤隆泰・廣瀬壯一・福井卓雄・石田貴之: 三次元スカラー波動および弾性波動問題における演算子積分時間領域境界要素法, 応用力学論文集, 土木学会, Vol.10, (2007), pp.217-224.

(4) 斎藤隆泰・石田貴之・福井卓雄・廣瀬壯一: 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動弾性境界要素法について, 応用力学論文集, 土木学会, Vol.11, (2008), pp.193-200.

(5) Saitoh, T., Hirose, S. and Fukui, T. : Convolution quadrature boundary element method and acceleration by fast multipole method in 2-D viscoelastic wave propagation, *Theoretical and Applied Mechanics Japan*, **57**, (2009), pp. 385-393.

(6) 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).

(7) 大谷佳広・西村直志: 共有メモリー計算機における3次元時間領域動弾性高速境界積分方程式法の並列化について, 応用力学論文集, 土木学会, Vol.7, (2004), pp.295-304.