

3次元波動方程式の \mathcal{H} -matrix を用いた時間域 BIEM による解法

Time domain BIEM with \mathcal{H} -matrix for 3D wave equation

吉川 仁¹⁾

Hitoshi YOSHIKAWA

1) 京都大学大学院情報学研究科 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: yoshikawa.hitoshi.5u@kyoto-u.ac.jp)

A reduction of computational time of conventional time domain BIEM for 3D wave equation is considered. The complexity of conventional TD-BIEM for 3D wave equation is $\mathcal{O}(N^{5/2})$. This is because that the computational time for judgments of whether the influence coefficients of TD-BIEM are zero is $\mathcal{O}(N^{5/2})$. We can reduce the computational time for conventional TD-BIEM for 3D wave equation to $\mathcal{O}(N^2)$ using \mathcal{H} -matrix.

Key Words: TD-BIEM, wave equation, \mathcal{H} -matrix

1. 研究背景・目的

3次元の波動方程式の初期値・境界値問題を従来法の時間境界積分方程式法 (TD-BIEM) で解く場合、ソース要素からの波動が観測点に到達するまでと、波動が通過した後は、影響係数行列の対応する成分はゼロとなる⁽¹⁾。このため、影響係数行列は疎行列となり、非ゼロ成分のみを記憶する事で使用メモリ量を削減できる。しかし、影響係数のどの成分が非ゼロであるかの判定には、全ての時間ステップにおいて、全てのソース要素・観測点の組み合わせについて調べる必要がある。このため、3次元波動問題の TD-BIEM に必要な計算量は、影響係数行列の非ゼロ成分の判定にかかる時間が支配的となる。本論文では、影響係数行列の非ゼロ成分の判定に掛かる計算時間の短縮を試みることで、3次元波動問題の TD-BIEM に必要な計算量を軽減する。具体的には、Hackbusch⁽²⁾ らによる \mathcal{H} -matrix の考えを導入する。非ゼロ成分の判定を、各ソース要素・各観測点毎に行うのではなく、空間的に近い要素・観測点を一纏めにしたクラスタを作成し、クラスタに対応する影響係数行列の部分行列が零行列か否かを判定する。

第2節において従来法の時間域 BIEM の特徴について言及し、第3節で \mathcal{H} -matrix を用いた時間域 BIEM について説明する。第4節にて数値例を用いて提案手法の有効性を示す。

2. 時間域 BIEM による波動場解析とその特徴

3次元無限領域に存在する散乱体によるスカラー波動 u^{in} の散乱問題を考える。

$$\ddot{u}(\mathbf{x}, t) - c^2 u_{,ii}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \text{in } D, t > 0, \quad (1)$$

$$u(\mathbf{x}, 0) = \dot{u}(\mathbf{x}, 0) = 0 \quad \text{in } D, \quad (2)$$

$$\frac{\partial u}{\partial n}(\mathbf{x}, t) = \bar{q}(\mathbf{x}, t) \quad \text{on } \partial D, t > 0, \quad (3)$$

$$u(\mathbf{x}, t) \rightarrow u^{\text{in}}(\mathbf{x}, t), \quad |\mathbf{x}| \rightarrow \infty, \quad (4)$$

ここに、 $(\cdot)_{,i}$ は $\frac{\partial}{\partial x_i}$ を、 $(\dot{\cdot})$ は $\frac{\partial}{\partial t}$ を表す。また、 ∂D は領域 D の境界である。 $\frac{\partial}{\partial n}$ は法線微分で $n_i(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial x_i}$ 、 $\mathbf{n}(\mathbf{x})$ は境界上の点 \mathbf{x} における領域の外向き単位法線ベクトルである。また、 c は波速を表す。式 (1) に対応する境界積分方程式は次式で得られる。

$$-u^{\text{in}}(\mathbf{x}, t) = \int_{\partial D} \left[\Gamma(\mathbf{x} - \mathbf{y}, \cdot) * \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial n_{\mathbf{y}}}(\mathbf{y}, \cdot) \right] (t) dS - \lim_{\boldsymbol{\xi} \rightarrow \mathbf{x}} \int_{\partial D} \left[\frac{\partial \Gamma}{\partial n_{\mathbf{y}}}(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{y}, \cdot) * \mathbf{u}(\mathbf{y}, \cdot) \right] (t) dS, \quad \mathbf{x} \text{ on } \partial D, \boldsymbol{\xi} \in D^e, \quad (5)$$

$$[f * g](t) = \int_0^\infty f(t-s)g(s)ds, \quad (6)$$

ここに、 D^e は領域 D の補領域であり、 Γ は3次元波動方程式の時間域の基本解で、

$$\Gamma(\mathbf{x}, t) = \frac{\delta(t - |\mathbf{x}|/c)}{4\pi|\mathbf{x}|}, \quad (7)$$

である。なお、 δ は Dirac のデルタ関数である。

境界積分方程式 (5) を数値的に解くために、境界 ∂D を境界要素 $S_j, j = 1, \dots, N$ に分割し、さらに境界量 $u(\mathbf{x}, t), \frac{\partial u}{\partial n}(\mathbf{x}, t)$ を空間内挿関数 $M_S^j(\mathbf{x})$ 、時間内挿関数 $M_T^m(t)$ を用いて離散化する。

$$u(\mathbf{x}, t) \simeq \sum_{m=1}^{N_T} \sum_{j=1}^N u(\mathbf{x}^j, m\Delta t) M_S^j(\mathbf{x}) M_T^m(t), \quad (8)$$

$$\bar{q}(\mathbf{x}, t) \simeq \sum_{m=1}^{N_T} \sum_{j=1}^N \bar{q}(\mathbf{x}^j, m\Delta t) M_S^j(\mathbf{x}) M_T^m(t), \quad (9)$$

ここに、点 \mathbf{x}^i は境界要素 S_j の代表点であり、 Δt は時間増分で、 N_T は時間ステップ数である。時刻 $t = n\Delta t$, $n = 1, \dots, N_T$ における離散化された境界積分方程式は次式で得られる。

$$-\mathbf{u}_n^{\text{in}} \simeq \sum_{m=1}^n \mathbf{U}_{n-m+1} \bar{\mathbf{q}}_m - \sum_{m=1}^n \mathbf{W}_{n-m+1} \mathbf{u}_m, \quad (10)$$

$$\{\mathbf{u}_n^{\text{in}}\}_i := u^{\text{in}}(\mathbf{x}^i, n\Delta t), \quad (11)$$

$$\{\mathbf{u}_m\}_i := u(\mathbf{x}^i, m\Delta t), \quad \{\bar{\mathbf{q}}_m\}_i := \bar{q}(\mathbf{x}^i, m\Delta t), \quad (12)$$

$$\{\mathbf{U}_{n-m+1}\}_{ij} := \int_{\partial D} \int_0^\infty \Gamma(\mathbf{x}^i - \mathbf{y}, n\Delta t - s) M_S^j(\mathbf{y}) M_T^m(s) ds dS, \quad (13)$$

$$\{\mathbf{W}_{n-m+1}\}_{ij} := \int_{\partial D} \int_0^\infty \frac{\partial \Gamma}{\partial n_y}(\mathbf{x}^i - \mathbf{y}, n\Delta t - s) M_S^j(\mathbf{y}) M_T^m(s) ds dS. \quad (14)$$

簡単のため、区分一定の空間内挿関数 $M_S^j(\mathbf{x})$ 、区分線形の時間内挿関数 $M_T^m(t)$ の場合を考える。

$$M_S^j(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{x} \in S_j, \\ 0, & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (15)$$

$$M_T^m(t) = \begin{cases} \frac{t}{\Delta t} - m + 1, & (m-1)\Delta t \leq t < m\Delta t, \\ \frac{\Delta t}{\Delta t} + m + 1, & m\Delta t \leq t < (m+1)\Delta t, \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (16)$$

このとき、影響係数は次式となる。

$$\{\mathbf{U}_m\}_{ij} = \int_{S_j} \int_{(m-2)\Delta t}^{m\Delta t} \frac{\delta(\tau - r/c)}{4\pi r} M_T^{m-1}(\tau) d\tau dS, \quad (17)$$

$$\{\mathbf{W}_m\}_{ij} = \int_{S_j} \int_{(m-2)\Delta t}^{m\Delta t} \frac{\partial}{\partial n_y} \frac{\delta(\tau - r/c)}{4\pi r} M_T^{m-1}(\tau) d\tau dS, \quad (18)$$

ここに、 $r = |\mathbf{x}^i - \mathbf{y}|$ である (Fig.1)。これらの式の形から明らかのように、

$$\{\mathbf{U}_m\}_{ij} \neq 0, \quad \{\mathbf{W}_m\}_{ij} \neq 0$$

$$\text{for } \left\{ i, j \mid \inf_{\mathbf{y} \in S_j} r < c m \Delta t \text{ and } \sup_{\mathbf{y} \in S_j} r > c(m-2)\Delta t \right\} \quad (19)$$

となり、影響係数 $\mathbf{U}_m, \mathbf{W}_m$ は疎行列となる。

通常、3次元波動方程式を時間域 BIEM で解く場合、式 (17),(18) の非ゼロ成分のみを計算する。それゆえ、非ゼロの係数の積分計算に必要な計算コストは $O(N^2)$ である。しかし、係数行列式 (17),(18) のどの成分が非ゼロであるかを判別するための計算コストは $O(N^2 N_T)$ である。よって、3次元波動方程式の時間域 BIEM に必要な計算コストは、非ゼロの判定に掛かる計算時間が支配的になり $O(N^2 N_T)$ となる。一方、メモリ使用量については、式 (3) のような Neumann 境界条件

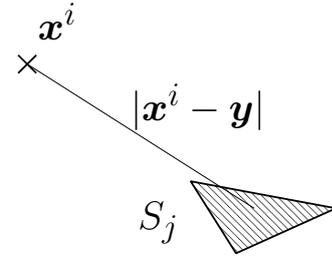


Fig.1 観測点 \mathbf{x}^i とソース要素 S_j

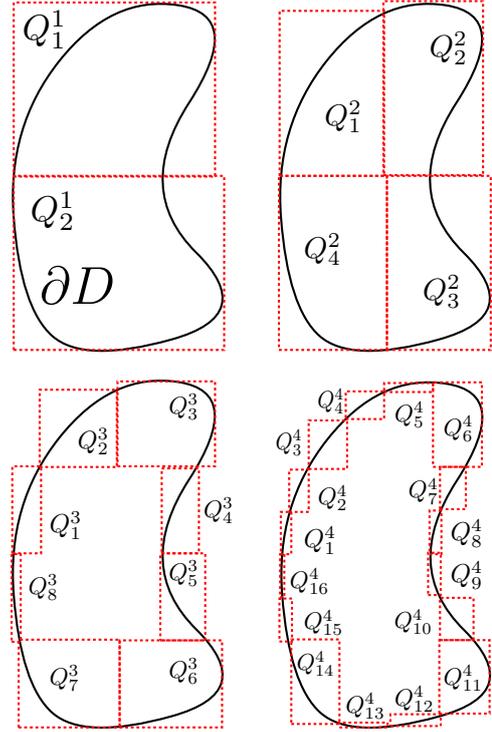


Fig.2 クラスタリング

の場合、記憶すべき係数行列は $\mathbf{W}_m, m = 1, \dots, N_T$ のみである。また、逐次的に解かれる代数方程式 (10) において、実効可能な行列ベクトル積演算を、予め計算しておく cast forward のアイデア^(3,4) を用いれば、 $\mathbf{W}_m, m = 1, \dots, \lfloor \frac{N_T+1}{2} \rfloor$ を記憶するだけでよい。ここに、 $\lfloor \cdot \rfloor$ はガウス記号である。非ゼロの $\mathbf{W}_m, m = 1, \dots, \lfloor \frac{N_T+1}{2} \rfloor$ の記憶に必要なメモリ容量は $O(N^2)$ である。3次元の問題では、 $N_T = O(N^{1/2})$ となることから、計算コストは $O(N^{5/2})$ 、メモリ使用量は $O(N^2)$ となる。

3. \mathcal{H} -matrix を用いた 3次元波動方程式のための時間域 BIEM

3次元波動方程式を時間域 BIEM での影響係数行列の非ゼロ成分の判定にかかる計算コストを減らすために、 \mathcal{H} -matrix を導入する。ある程度の要素の纏まり毎に影響係数行列成分の非ゼロ判定 (式 (19)) を行い、判定に要する計算コストの軽減を試みる。具体的な導入手法は次のとおりである。

3.1. クラスタリングと \mathcal{H} -matrix

境界を取り囲む直方体を作成し、レベル 0 のクラスタ Q_1^0

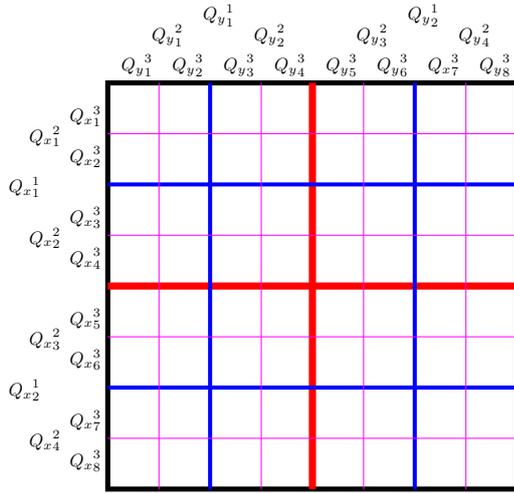


Fig. 3 階層化された影響係数行列 W_m^H

とする。クラスタ Q_1^0 の最も長い辺を 2 等分した線分で境界を分割し、分割された境界を取り囲むレベル 1 のクラスタ Q_1^1, Q_2^1 を作成する。以下同様に、2 分木で再帰的に境界を分割し複数のクラスタ $Q_i^{lev} (i = 1, \dots, 2^{lev})$ を作成する。ここに、lev はクラスタの階層レベルを表す。なお、クラスタのレベルが予め設定した値 maxlev に至るか、クラスタに含まれる境界要素数が一定値 leafmax 以下になれば、その時点で分割を中止する。これ以上分割しないクラスタを leaf と呼ぶことにする。参考のため、2 次元領域の境界のクラスタリングの様子を Fig.2 に示す。

また、クラスタ毎に境界要素が纏まるように境界要素番号を付け直す。行列 U_m, W_m は、分割したクラスタに対応した部分行列で構成される階層行列 U_m^H, W_m^H で表現される (Fig.3)。

3.2. \mathcal{H} -matrix を用いた 3 次元波動方程式のための時間域 BIEM

影響係数行列成分の非ゼロ判定を、階層化された影響係数行列 U_m^H, W_m^H に対して、クラスタ毎に纏めて行う。まず、2 つのクラスタ $Q_{x_p}^{lev}, Q_{y_q}^{lev}$ の、最も離れた頂点同士の距離を $\text{dist}_{\max}(Q_{x_p}^{lev}, Q_{y_q}^{lev})$ 、最も接近した頂点同士の距離を $\text{dist}_{\min}(Q_{x_p}^{lev}, Q_{y_q}^{lev})$ とする (Fig.4)。次に、時間域 BIEM における逐次計算の各時間ステップ $m = 1, \dots, N_T$ において、クラスタリングされた境界の各レベルのクラスタに対し、 $\text{dist}_{\max}(Q_{x_p}^{lev}, Q_{y_q}^{lev}), \text{dist}_{\min}(Q_{x_p}^{lev}, Q_{y_q}^{lev})$ を求める。

- クラスタ間距離が条件

$$\begin{aligned} \text{dist}_{\min}(Q_{x_p}^{lev}, Q_{y_q}^{lev}) &> cm\Delta t \quad \text{or} \\ \text{dist}_{\max}(Q_{x_p}^{lev}, Q_{y_q}^{lev}) &< c(m-2)\Delta t, \end{aligned} \quad (20)$$

を満たす場合、対応する部分行列は零行列と判定できる。

$$U_m(Q_{x_p}^{lev}, Q_{y_q}^{lev}) = W_m(Q_{x_p}^{lev}, Q_{y_q}^{lev}) = \mathbf{0}. \quad (21)$$

- クラスタ $Q_{x_p}^{lev}, Q_{y_q}^{lev}$ が条件式 (20) を満たさず、且つ、leaf でもないならば、それぞれのクラスタを 2 つに分

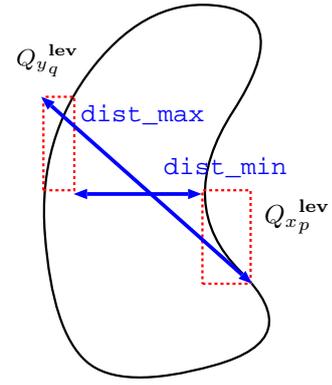


Fig. 4 クラスタ間距離

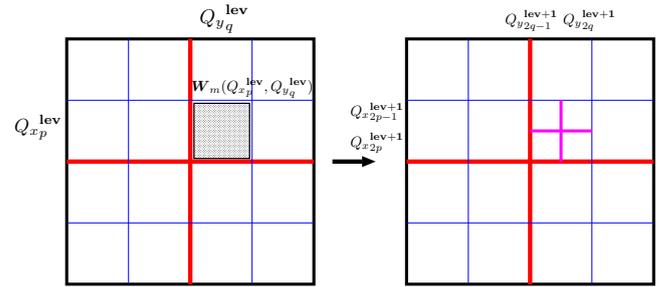


Fig. 5 W_m^H の非零部分行列の分割

割する (Fig.5)。

$$Q_{x_p}^{lev} \rightarrow Q_{x_{2p-1}}^{lev+1}, Q_{x_{2p}}^{lev+1}, \quad (22)$$

$$Q_{y_q}^{lev} \rightarrow Q_{y_{2q-1}}^{lev+1}, Q_{y_{2q}}^{lev+1}. \quad (23)$$

- クラスタ $Q_{x_p}^{lev}, Q_{y_q}^{lev}$ が leaf ならば、対応する部分行列 $U_m(Q_{x_p}^{lev}, Q_{y_q}^{lev}), W_m(Q_{x_p}^{lev}, Q_{y_q}^{lev})$ の非ゼロ成分を式 (19) により判定し、式 (17),(18) より積分を計算する。

\mathcal{H} -matrix を用いることで、影響係数行列の非ゼロ成分の判定に掛かる計算コストが $\mathcal{O}((N \log N)N_T) = \mathcal{O}(N^{3/2} \log N)$ となる。非ゼロ成分の積分計算に掛かる計算コストは変わらずに $\mathcal{O}(N^2)$ であるため、積分計算に掛かる計算コストが支配的となる。つまり、 \mathcal{H} -matrix を用いた 3 次元波動方程式のための時間域 BIEM の計算コストは $\mathcal{O}(N^2)$ となる。

4. 数値解析例

3 次元無限領域に半径 1 の球体の散乱体が複数存在する領域 D における式 (1)–(4) の初期値境界値問題を考える。Fig.6 のように、散乱体は中心間距離を 2.5 とし x_2 方向に一列に並んでいる。また、入射波や境界条件は以下のとおりとする。

$$u^{\text{in}}(\mathbf{x}, t) = \left\{ 1 - \cos 2\pi \left(t - \frac{\mathbf{x} \cdot \mathbf{d}}{c} \right) \right\} H \left(t - \frac{\mathbf{x} \cdot \mathbf{d}}{c} \right), \quad (24)$$

$$\bar{q}(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial u^{\text{in}}}{\partial n}(\mathbf{x}, t), \quad (25)$$

ここに、 $c = 1, \mathbf{d} = (0, 0, 1)^T$ とする。散乱体が 2 つ、3 つ存在する問題を、従来の時間域 BIEM と \mathcal{H} -matrix を用いた時

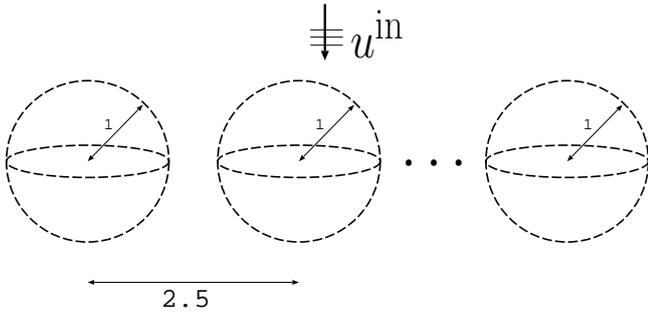


Fig. 6 複数個の散乱体による入射波散乱問題

Table 1 計算時間の比較 (散乱体 2 個の問題)

N	Δt	N_T	mem. (GB)	time(sec)	
				Conv.	using \mathcal{H} -mat
4000	0.12	38	0.30	46.8	32.1
9000	0.08	58	1.53	310	137
16000	0.06	75	4.80	1255	488
25000	0.048	94	11.6	3573	1154
36000	0.04	113	24.3	9037	2634

間域 BIEM の 2 通りの手法で数値解析を行った。境界要素分割数 N を変えて両手法で解析した計算時間の比較を Table 1, 2, Fig. 7, 8 に示す。なお、全ての問題において \mathcal{H} -matrix を用いた時間域 BIEM では、 $\text{maxlev}=12$, $\text{leafmax}=40$ とした。また、計算は全て 1 core (Appro GreenBlade 8000(IntelXeon E5 2.6GHz)) で行った。

Fig. 7, 8 から明らかなように、従来の時間域 BIEM では 3 次元波動方程式の求解に $\mathcal{O}(N^{5/2})$ の計算時間を要したが、 \mathcal{H} -matrix を用いることにより、計算時間を $\mathcal{O}(N^2)$ まで減らすことができた。

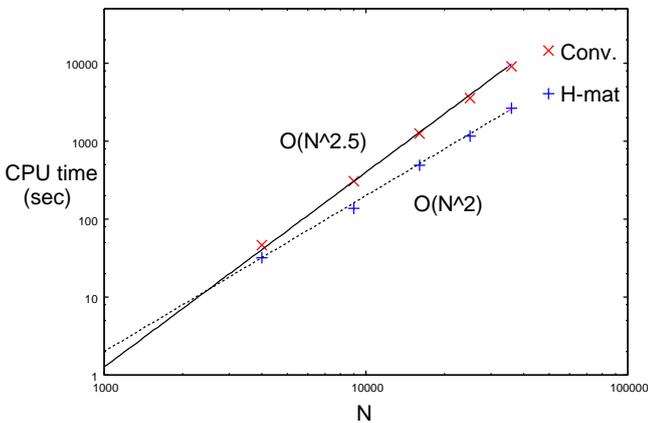


Fig. 7 計算時間の比較 (散乱体 2 個の問題)

Table 2 計算時間の比較 (散乱体 3 個の問題)

N	Δt	N_T	mem. (GB)	time(sec)	
				Conv.	using \mathcal{H} -mat
6000	0.12	59	0.76	147	117
13500	0.08	88	3.82	1015	384
24000	0.06	117	12.2	4366	1492
37500	0.048	155	31.1	14074	4417

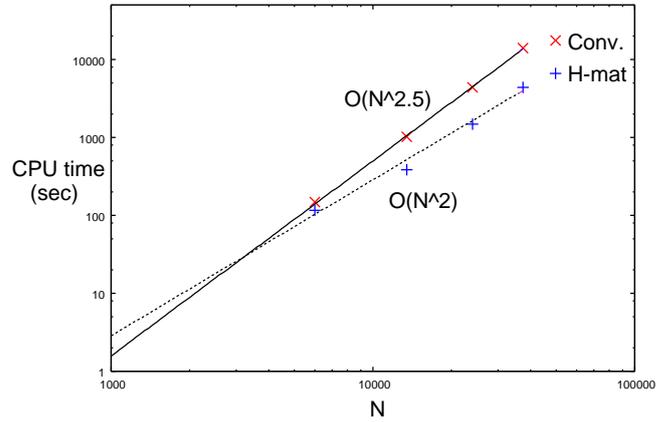


Fig. 8 計算時間の比較 (散乱体 3 個の問題)

5. 結論

3 次元波動方程式を従来の時間域 BIEM で解く場合、基本解の形から影響係数行列は疎行列となる。影響係数を求める積分計算に必要な計算量は $\mathcal{O}(N^2)$ であるが、どの成分が非ゼロなのかを判定するために $\mathcal{O}(N^{5/2})$ の計算量が必要であった。しかし、 \mathcal{H} -matrix を用いることで階層化された影響係数行列の、クラスタに対応する部分行列を纏めて零行列であるかどうかを判定した。これにより、非ゼロ成分の判定に掛かる計算量は $\mathcal{O}(N^{3/2} \log N)$ となり、求解にかかる時間を $\mathcal{O}(N^2)$ と軽減できた。

参考文献

- (1) 小林昭一 他: 波動解析と境界要素法, 京都大学学術出版会, 2000.
- (2) W. Hackbusch: A sparse matrix arithmetic based on \mathcal{H} -matrices. Part I: Introduction to \mathcal{H} -Matrices, *Computing.*, Vol.62, pp.89–108, 1999.
- (3) S. Walker: Scattering analysis via time-domain integral equations: Methods to reduce the scaling of cost with frequency, *IEEE Ant. Prop. Mag.*, Vol. 39, pp.13–20, 1997.
- (4) H. Yoshikawa and N. Nishimura: An improved implementation of time domain elastodynamic BIEM in 3D for large scale problems and its application to ultrasonic NDE, *Electronic Journal of Boundary Elements*, Vol. 1, Issue 2, pp.201–217, 2003.