

波動方程式に対するガラキン法に基づく数値計算手法の特性評価

On Properties of Numerical Procedures Based on Galerkin Method for Wave Equation

山田貴博*

Takahiro YAMADA

*正会員 学博 横浜国立大学教授 大学院環境情報研究院 (〒 240-8501 横浜市保土ヶ谷区常盤台 79-7)

In this paper, properties of several numerical procedures based on the Galerkin method for wave equation is evaluated. Numerical properties are characterised by numerical dispersion, which is calculated by combining errors driven from both spatial and temporal discretization. The present approach enables us to understand the function of each discretization in the overall accuracy of the schemes and indicates the guideline for the design of numerical procedures.

Key Words : numerical property, Galerkin method, wave equation, dispersion

1. 序

理工学の様々な分野において、波動方程式によって記述される物理現象が数多く現れる。特に、地震波動の伝播問題や構造物の衝撃解析においては、波動伝播現象としての性質を正確に評価できる数値計算手法が望まれる。このような数値計算手法を設計するためには、波動方程式に対する数値計算手法の基本的な特性を把握することは重要である。

波動方程式の数値計算手法は、空間方向と時間積分の離散化により構成される。空間方向に関しては、有限要素法における補間誤差評価などの基本的な特性の把握は行われている。一方、時間方向の離散化に関しては、離散化手法である数値時間積分法の評価が 1 質点系振動の観点から行われることがほとんどであった。このようなことから、波動方程式に対する各種の数値計算手法の特性については、個別の手法に対する経験的な知見は得られているものの、空間方向と時間方向の離散化の組み合わせによって決定される各種の手法に対して体系的に理解されることは少なかった。特にパルス成分を含む波動や衝撃問題などにおいては、低周波から高周波までの広帯域の波動に対して、周波数成分による位相ずれが少ないすなわち数値的な分散性の少ない手法が望まれる。これは、パルス成分を含む波動や衝撃問題では、この数値分散性により、含まれる成分毎に位相のずれが生じ、結果的に波形の変化を引き起こすためである。したがって、数値計算手法を数値分散性の観点から評価することが重要となる。

差分法に基づく数値解析手法などにおいては、近似方程式が漸化式として表される場合に、近似解を漸化式から解析的に構成し、数値特性の評価を行うことが可能である¹⁾。これに対して筆者らは、1 次元波動方程式に対する数値計算手法の数値特性を、進行波を構

成する初期条件を設定して得られる数値解によって評価する手法を提案し、従来はあまり示されることのなかった高次要素を含む各種の有限要素法といくつかの時間積分を組み合わせた手法の評価を行ってきた^{2),3)}。

そこで、本研究では、波動方程式の解が厳密解、近似解とも空間変数と時間変数に関して変数分離形として表現できることを利用し、空間離散化を特徴づける固有値問題の誤差と時間積分によって生じる数値的な角振動数を用いて、波動方程式の離散化で現れる数値分散性を計算し、数値特性を評価する手法を提案する。本研究は、このような数値特性の評価手法により、経験的に精度が高いことが知られている FDTD (Finite Difference Time Domain, 時間領域差分) 法⁴⁾などの数値計算手法の数値特性の発現メカニズムを理解するとともに、高精度な手法の設計指針を得るものである。

2. 1 次元波動方程式

本研究では、無限領域 $]-\infty, +\infty[$ における 1 次元線形波動方程式

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (1)$$

を考える。いま、位相速度は 1 としているが、以後の議論において一般性を失うことはない。

この方程式の解を変数分離形として

$$u(x, t) = e^{i\omega t} \bar{u}(x) \quad (2)$$

と表すと、 $\bar{u}(x)$ は固有値問題

$$-\omega^2 \bar{u} = \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial x^2} \quad (3)$$

の解となり、一般解は

$$\bar{u}(x) = C_1 \cos \omega x + C_2 \sin \omega x \quad (4)$$

となる。このとき、波動方程式の解は、

$$u(x, t) = e^{i\omega t} (C_1 \cos \omega x + C_2 \sin \omega x) \quad (5)$$

と表され、 $\sin \omega x$, $\cos \omega x$ と表されるモードの定在波が時間方向に $e^{i\omega t}$ として振動する解の重ね合わせとなっていることが分かる。

また、この解は加法定理から

$$u(x, t) = C'_1 e^{i\omega(x-t)} + C'_2 e^{i\omega(x+t)} \quad (6)$$

と書き換えることが可能である。これは、三角関数で表されるモードに関して進行波 $e^{i\omega(x-t)}$ と後退波 $e^{i\omega(x+t)}$ が含まれることを表している。

次節以降では、上述の考え方を近似方程式に適用することにより、数値計算手法の特性評価を行う。

3. 空間離散化

3.1 ガラーキン近似

波動方程式 (1) に対して、空間方向に弱定式化を行うと次式が得られる。

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} w \, dx + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial w}{\partial x} \, dx = 0 \quad (7)$$

ここで、 w は仮想変位であり、領域内にコンパクトな台を持つ関数と仮定する。

弱定式化された波動方程式 (7) において、未知関数 $u(x, t)$ に対して、空間方向に基底関数 $\phi_k(x)$ を導入し、ガラーキン (Galerkin) 法に基づく離散化を行うと、次の半離散化方程式が得られる。

$$\mathbf{M} \frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial t^2} + \mathbf{K} \mathbf{U} = \mathbf{0} \quad (8)$$

ここで、 $\mathbf{U}(t)$ は基底関数の係数である未知パラメータベクトルであり時刻に関するベクトル値関数となっている。また、 $\mathbf{M}$, $\mathbf{K}$ はそれぞれ質量行列、剛性行列である。ただし、式 (7) のように無限領域の問題を考えていることから、 $\mathbf{U}(t)$, $\mathbf{M}$, $\mathbf{K}$ は無限次元のベクトル、行列となっている。

3.2 モード解析

未知パラメータベクトル $\mathbf{U}(t)$ に対して、次の変数分離形を考える。

$$\mathbf{U}(t) = e^{i\omega t} \bar{\mathbf{U}} \quad (9)$$

これを半離散化方程式 (8) に代入すると、モードベクトル $\bar{\mathbf{U}}$ に関する次の固有値問題が得られる。

$$\mathbf{K} \bar{\mathbf{U}} = (\omega^h)^2 \mathbf{M} \bar{\mathbf{U}} \quad (10)$$

このとき、固有値 $(\omega^h)^2$ を対角項とする行列 $\mathbf{\Omega}$ と対応する固有ベクトルを並べた行列 $\mathbf{P}$ について次の関係式が得られる。

$$\mathbf{M} \mathbf{P} \mathbf{\Omega} = \mathbf{K} \mathbf{P} \quad (11)$$

いま、 $\mathbf{P}$ を行列 $\mathbf{M}$ に対して正規化するすなわち $\mathbf{P}^T \mathbf{M} \mathbf{P}$ が単位行列になるように各ベクトルの大きさを定める。このとき、以下の剛性行列 $\mathbf{K}$ の対角化が可能となる。

$$\mathbf{\Omega} = \mathbf{P}^T \mathbf{K} \mathbf{P} \quad (12)$$

半離散化方程式 (8) は、各固有モードに対するモード座標 α_k を用いて、モード毎の方程式

$$\frac{\partial^2 \alpha_k}{\partial t^2} + (\omega_k^h)^2 \alpha_k = 0 \quad (13)$$

となる。

一方、要素幅 h とする一様分割された 1 次要素による有限要素近似において、無限区間の固有値問題は、節点 k における近似解を $\bar{u}_k$ と表すと、漸化式として以下のように表される。

$$\begin{aligned} (\omega^h)^2 h \left(\frac{1}{6} \bar{u}_{k-1} + \frac{2}{3} \bar{u}_k + \frac{1}{6} \bar{u}_{k+1} \right) \\ = \frac{1}{h} (-\bar{u}_{k-1} + 2\bar{u}_k - \bar{u}_{k+1}) \end{aligned} \quad (14)$$

このとき、近似解を

$$\bar{u}_k = e^{i\omega h k} \quad (15)$$

とおくと、

$$(\omega^h)^2 = \frac{6}{h^2} (1 - \cos \omega h) (2 + \cos \omega h)^{-1} \quad (16)$$

のとき、この近似解は、離散化された固有値問題 (14) を満足することが分かる。この近似解は、また厳密解の固有モードに節点で一致するものである⁵⁾。したがって、空間方向の位相角 ω と近似解における角振動数 ω^h の関係は

$$\omega^h = \frac{1}{h} \sqrt{\frac{6(1 - \cos \omega h)}{2 + \cos \omega h}} \quad (17)$$

として与えられる。式 (5) より、厳密解の角振動数 ω は空間方向の位相角と一致する。したがって、この角振動数 ω^h と厳密解の角振動数 ω を直接比較することで計算手法の数値特性を評価することができる。

また、質量行列を対角化した場合、近似方程式は 2 次精度中心差分法に基づくものと一致し、以下のように表される。

$$(\omega^h)^2 h \bar{u}_k = \frac{1}{h} (-\bar{u}_{k-1} + 2\bar{u}_k - \bar{u}_{k+1}) \quad (18)$$

このときの固有値の近似解は

$$\omega^h = \frac{1}{h} \sqrt{2(1 - \cos \omega h)} \quad (19)$$

となる。

以上の結果を図-1 に示す。一方、ガラーキン法に基づく固有値の近似解は、Min-Max 原理より厳密解より大きくなることが事前誤差評価として知られている⁵⁾。

上述のように、1 次要素による有限要素近似や差分法などでは無限区間の固有値問題を漸化式として表して、近似固有値を解析的に求めることができるが、2 次要素などを用いる場合は、後述するように近似固有値を求めることは容易ではない。このような場合は、有

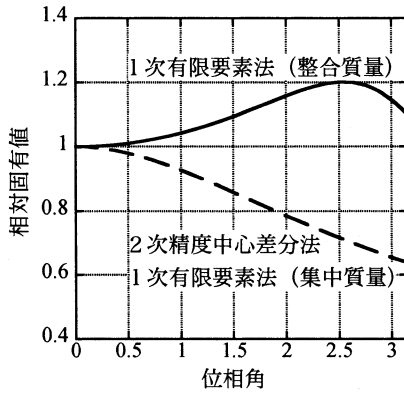


図-1 固有値の精度 (2次精度中心差分法, 1次有限要素法)

限区間に対して, 両端に周期境界条件を課し, 得られた有限次元の固有値問題を数値的に解く事により, 同様な固有値の近似解を求めることが可能である。

4. 時間積分と分散性

4.1 時間積分手法

波動方程式の解析において, しばしば用いられるFDTD法や衝撃解析においては一般的である動的陽解法において時間積分には中心差分法が用いられる。また, 有限要素法に基づく振動解析の分野では, Newmark法が広く用いられている。本研究では, 時間積分手法として中心差分法とNewmark法を考える。

時刻 t_n における節点変位ベクトルを $\mathbf{U}(t_n)$, 速度ベクトル $\mathbf{V}(t_n) = \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t}(t_n)$ の時間方向に離散化した近似ベクトルをそれぞれ $\mathbf{U}_n, \mathbf{V}_n$ とする。中心差分法では, 時刻 $t_{n+\frac{1}{2}} = t_n + \frac{1}{2}\Delta t$ における速度 $\mathbf{V}_{n+\frac{1}{2}}$ を導入し, 以下のように離散化を行う。

$$\frac{1}{\Delta t} \mathbf{M}(\mathbf{V}_{n+\frac{1}{2}} - \mathbf{V}_{n-\frac{1}{2}}) = \mathbf{K} \mathbf{U}_n \quad (20)$$

$$\mathbf{U}_{n+1} = \mathbf{U}_n + \Delta t \mathbf{V}_{n+\frac{1}{2}} \quad (21)$$

しかしながら, この中心差分法では速度が定義される時刻が, 変位を定義する時刻とずれているため, 次項に述べる数値的な角振動数の評価が困難である。そこで, 本研究では中心差分法と等価な Verlet 法を考える。Verlet 法では, 速度を

$$\mathbf{V}_n = \frac{1}{2}(\mathbf{V}_{n-\frac{1}{2}} + \mathbf{V}_{n+\frac{1}{2}}) \quad (22)$$

とおく。これを中心差分法による離散化方程式 (20) (21) に適用すると次の近似方程式が得られる。

$$\mathbf{V}_{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{V}_n - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{M}^{-1} \mathbf{K} \mathbf{U}_n \quad (23)$$

$$\mathbf{U}_{n+1} = \mathbf{U}_n + \Delta t \mathbf{V}_{n+\frac{1}{2}} \quad (24)$$

$$\mathbf{V}_{n+1} = \mathbf{V}_{n+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{M}^{-1} \mathbf{K} \mathbf{U}_{n+1} \quad (25)$$

また, 質量行列 $\mathbf{M}$ を集中化質量行列 $\bar{\mathbf{M}}$ に置き換えると, $\bar{\mathbf{M}}^{-1}$ は対角行列となり陽解法としての近似方程

式が得られる。この手法は, 衝撃解析においてしばしば用いられる動的陽解法に対応する。

一方, 時間積分として Newmark 法を半離散化方程式 (8) に適用すると以下の近似方程式が得られる。

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_{n+1} &= \mathbf{U}_n + \Delta t \mathbf{V}_n \\ &\quad - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{M}^{-1} \mathbf{K} \{(1-2\beta)\mathbf{U}_n + 2\beta\mathbf{U}_{n+1}\} \end{aligned} \quad (26)$$

$$\mathbf{V}_{n+1} = \mathbf{V}_n - \Delta t \mathbf{M}^{-1} \mathbf{K} \{(1-\gamma)\mathbf{U}_n + \gamma\mathbf{U}_{n+1}\} \quad (27)$$

ここで, β, γ は数値特性を定めるパラメータであり, $\beta = 1/4, \gamma = 1/2$ のとき, 平均加速度法, $\beta = 1/6, \gamma = 1/2$ のとき, 線形加速度法となる。

4.2 時間積分の数値特性

上述の時間積分手法を, 変位 u_n , 速度 v_n を独立変数とする 1 質点系に適用すると, 時間積分手法は一般形として

$$\begin{Bmatrix} u_{n+1} \\ v_{n+1} \end{Bmatrix} = \mathbf{A} \begin{Bmatrix} u_n \\ v_n \end{Bmatrix} \quad (28)$$

と表される⁶⁾。このとき, 時間積分を表す行列 $\mathbf{A}$ の固有値を λ_1, λ_2 とすると, 行列 $\mathbf{A}$ は非対称行列であることから以下のように λ_1, λ_2 は複素数として表される。

$$\lambda_1 = \bar{\lambda}(\cos \theta + i \sin \theta), \quad \lambda_2 = \bar{\lambda}(\cos \theta - i \sin \theta) \quad (29)$$

このとき, θ は時間刻み Δt 当たりの位相の変化を表すことから, 時間積分における見かけ上の角振動数である数値角振動数 $\tilde{\omega}$ は

$$\tilde{\omega} = \frac{\theta}{\Delta t} \quad (30)$$

と表される。

このようにして得られた数値角振動数 $\tilde{\omega}$ を方程式の角振動数 ω で正規化した相対角振動数 $\tilde{\omega}/\omega$ と時間刻み Δt を時間刻み当たりの位相の変化として表した位相角 $\omega \Delta t$ に対する関係として表したものを図-2 に示す。陽解法である中心差分法は, 見かけ上角振動数が大きくなる結果を与え, 陰解法である平均加速度法と線形加速度法は見かけ上角振動数が小さくなる結果を与えるものであることが分かる。また, 条件付き安定な解法である中心差分法と線形加速度法は無条件安定である平均加速度法に比べ, 数値角振動数に関して精度が高くなっていることが分かる。

4.3 位相速度の評価

上述から, $x_k = kh, t_j = j\Delta t$ における近似解 $u_{(k,j)}$ は,

$$\begin{aligned} u_{(k,j)} &= C' e^{i\tilde{\omega}^h \Delta t j} e^{i\omega k h} = C' \exp\left\{\omega(kh + \frac{\tilde{\omega}^h}{\omega} j\Delta t)\right\} \\ &= C' \exp\left\{\omega(x_k + \frac{\tilde{\omega}^h}{\omega} t_j)\right\} \end{aligned} \quad (31)$$

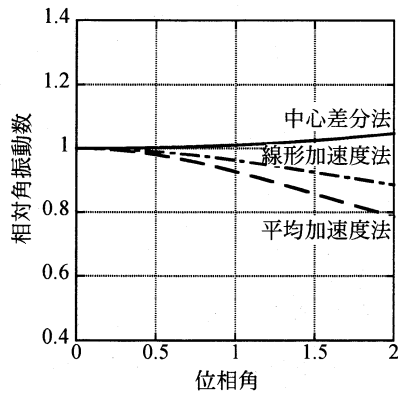


図-2 時間積分の精度（中心差分法、平均加速度法、線形加速度法）

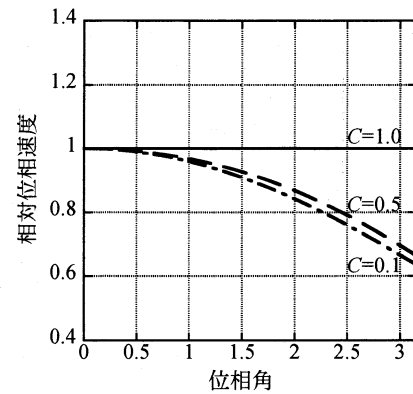


図-3 数値分散性（1次有限要素法，集中質量行列，中心差分時間積分法）

と表されることが分かる。ここで、 $\tilde{\omega}^h$ は、空間離散化による近似固有値 ω^h に対して、時間積分手法を適用し得られた数値角振動数である。したがって、 $\tilde{\omega}^h$ は空間離散化と時間積分の両者の特性から定まるものとなる。

本研究で考える1次元波動方程式は、式(5)のようにモードに依存せず位相速度が一定である。一方、式(31)から得られる位相速度

$$c^h = \frac{\tilde{\omega}^h}{\omega} \quad (32)$$

は、モードに依存する位相速度であり、近似によって本来はない分散性が数値的に現れたものと考えられる。

5. 各種手法の数値特性

本節では、1次有限要素法に基づく手法と高次の基底関数を用いた手法について、クーラン数 $C = \Delta t/h$ 毎に得られる数値分散性の曲線により考察する。

5.1 1次有限要素法

図-3に空間方向離散化を集中質量行列を用いた1次有限要素法とし、時間積分に中心差分法を用いた手法の数値分散性を示す。この手法では、空間離散化から定まる近似固有値は、図1のように厳密解より小さくなるのに対して、時間積分による数値角振動数は図2のように厳密解より大きくなる。したがって、空間離散化と時間積分の誤差は、位相速度に関しては誤差を相殺し合うものとなり、精度が高いものとなっている。

一方、図-4に空間方向離散化を整合質量行列を用いた1次有限要素法とし、時間積分に中心差分法を用いた手法の数値分散性を示す。この場合は、空間離散化から定まる近似固有値と時間積分による数値角振動数は図1と図2のようにともに厳密解より大きくなる方向にあり、結果として誤差が拡大している。

さらに、図-5に空間方向離散化を整合質量行列を用いた1次有限要素法とし、時間積分に平均加速度法を用いた手法の数値分散性を示す。この手法では、固有値の誤差と時間積分の誤差が相殺し合うものとなるが、集中質量行列を用いた1次有限要素法と中心差分法による時間積分を組み合わせたと比べて必ずしも精度が高いとはいえない。この手法は、無条件安定であるため、低次モードによる振動現象の解析においては有効であるが、衝撃を含むような波動現象にはあまり適さないと考える。

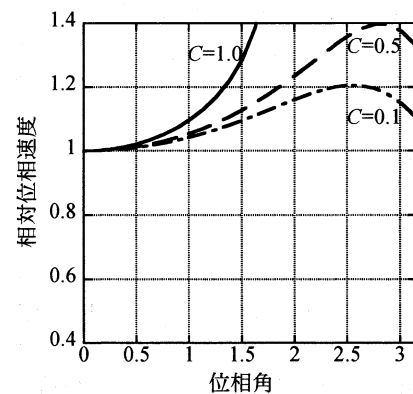


図-4 数値分散性（1次有限要素法，整合質量行列，中心差分時間積分法）

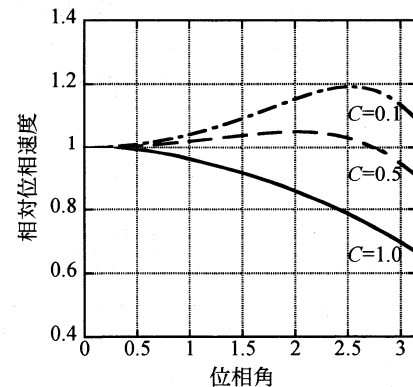


図-5 数値分散性（1次有限要素法，整合質量行列，平均加速度法）

5.2 高次の基底による離散化

時間刻みが小さくなったときは、空間離散化における固有値の精度がその上限となる。したがって、波動方程式の数値解法を高精度化するためには、空間離散化を高精度化することが必要となる。

楕円型方程式等の静的問題では、有限要素近似の補間関数を1次から高次関数へと変更することにより、補間誤差が改善され、精度が高くなることが知られている。そこで、本研究ではまず2次要素の適用を考える。

2次要素では、頂点節点と中点節点に関して、図-6のように近似基底が異なることから、離散化方程式が頂点節点と中点節点に関するものとして2種類現れる。このとき、離散化方程式から固有値を計算することは困難であることから、周期境界条件を課した領域に対する数値計算によって固有値を求める。図-7に数値計算によって得られた固有値の精度を示す。低次モードの精度は1次有限要素法に比べて高いが、位相角 $\pi/2$ において、固有値が急激に変化し、それ以降の高次モードの精度は高くない。位相角 $\pi/2$ における固有値の変化は、位相角 $\pi/2$ に対する固有モードとして、図-8のように頂点節点のモードと中点節点のモードの2種類が存在することから生じる現象である。また、時間積分に平均加速度法を用いた場合の伝播速度の精度を図-9に示す。この結果は、前項で評価した1次有限要素あるいは2次精度中心差分法の結果と比べて、精度が向上したとは言えず、有限要素法を用いた波動方程式の数値解法として、2次要素は精度を向上させるものではないことが分かる。

このような問題に対して、近年ではスプライン関数を近似基底に用いた手法が目まぐるしく注目されている⁷⁾。また、音響問題においては格子点において微分値を定義し高精度化を行うコンパクト差分法⁸⁾がしばしば用いられている。本研究では、このような観点から2次のスプラインガラーキン法と3次エルミート関数を近似基底に用いた有限要素法を考える。

図-10に数値計算によって得られた固有値の精度を示す。2次のスプラインガラーキン法と3次エルミート有限要素法は、1次有限要素法、2次精度中心差分法と比較して高精度であり、2次有限要素法のような固有値の急激な変化なども見られないことが分かる。

これらの手法に対して、ガラーキン法による空間離散化との組み合わせを考え、平均加速度法と線形加速度法を時間積分として適用する。

図-11に空間方向離散化を2次スプラインガラーキン法を用い、時間積分に平均加速度法を用いた手法の数値分散性を示す。時間刻みを小さくする場合（クーラン数が小さい場合）には、固有値の精度が高いことから、数値分散性は小さくなるが、時間刻みが大きい場合は、平均加速度法の特長により、数値分散性は比較的大きなものとなっている。

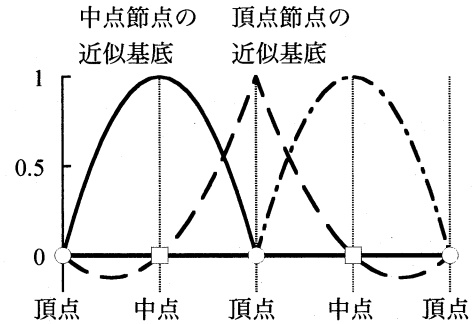


図-6 2次有限要素の近似基底

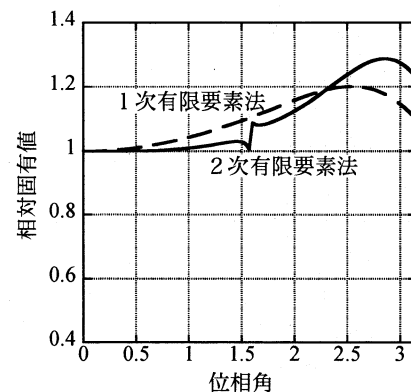


図-7 固有値の精度 (2次有限要素法)

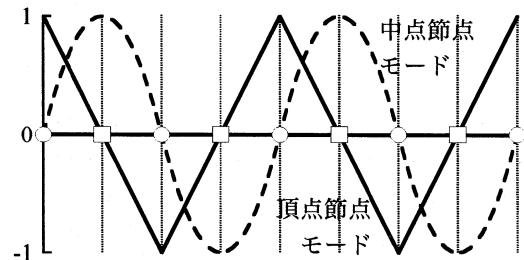


図-8 2次有限要素法における固有モード

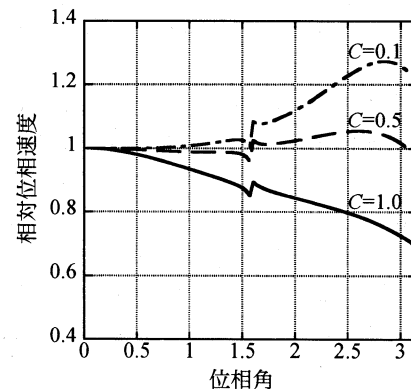


図-9 数値分散性 (2次有限要素法, 平均加速度法)

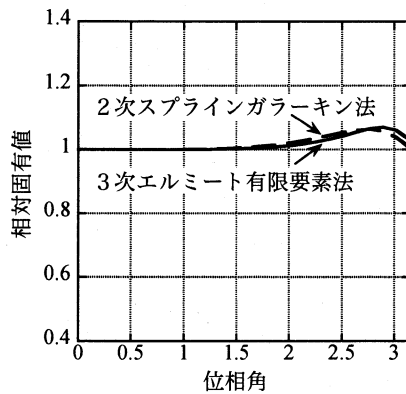


図-10 固有値の精度 (2次スプラインガラキン法, 3次エルミート有限要素法)

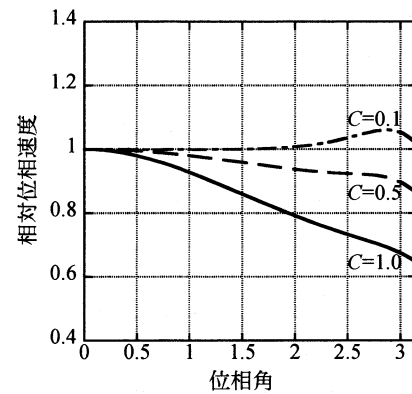


図-12 数値分散性 (3次エルミート有限要素法, 平均加速度法)

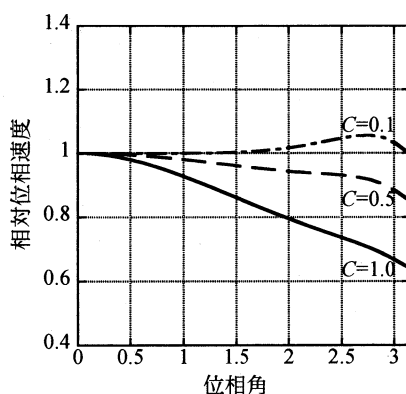


図-11 数値分散性 (2次スプラインガラキン法, 平均加速度法)

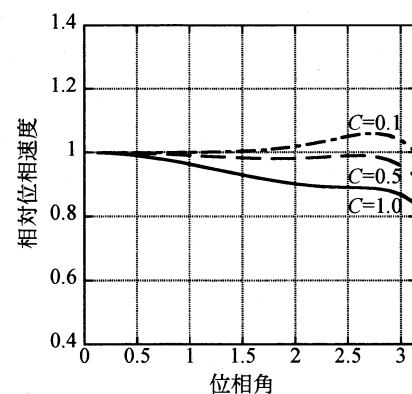


図-13 数値分散性 (2次スプラインガラキン法, 線形加速度法)

さらに, 2次スプラインガラキン法に線形加速度法を組み合わせた手法の結果を図-13に示す. この手法は全般に高精度なものとなっている.

6. 結び

本研究では, 1次元波動方程式について, 数値分散性の観点からガラキン法に基づく数値計算手法の特性を評価した. 集中質量行列を用いた1次有限要素法を空間離散化に用い, 時間積分に中心差分法を適用した手法は, 他の手法と比べても精度が高いことが確認できた. この手法は, FDTD法として知られる手法と同値な手法であり, また衝撃解析において動的陽解法として広く用いられていることから, 経験的には波動方程式に対して精度が高いことは分かっていた. 本研究により, 空間離散化と時間積分の誤差が相殺し合うことにより, 総合的に精度が高くなっていることが明らかとなった. また, より高精度な手法の構築には, 空間離散化としてスプラインガラキン法が適しているが, それを生かすためには陰解法で精度の高い線形加速度法のような手法と組み合わせることが必要である.

参考文献

- 1) 登坂 宣好, 大西 和栄: 偏微分方程式の数値シミュレーション, 第2版, 東京大学出版会, 2003.
- 2) 山田貴博: 波動方程式に対する高次有限要素近似の特性評価, 計算工学講演会論文集, Vol. 11, No. 2, pp.465-466, 2006.
- 3) 山田貴博: 波動方程式に対する有限要素スキームの数値特性, 第19回計算力学講演会講演論文集, pp.263-264, 2006.
- 4) 佐藤 雅弘: FDTD法による弾性振動・波動の解析入門, 森北出版, 2003.
- 5) W. G. Strang and G. J. Fix: An Analysis of the Finite Element Method, Cambridge Press, 1973.
- 6) T. J. R. Hughes: The Finite Element Method: Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis, Dover, 2000.
- 7) J. A. Cottrell, A. Reali, Y. Bazilevs, T. J. R. Hughes: Isogeometric Analysis of Structural Vibrations, Comput. Meth. Appl. Mech. Eng., Vol. 195, pp. 5257-5296, 2006.
- 8) G. Capdeville: A New Category of Hermitian Upwind Schemes for Computational Acoustics, J. Comput. Phys., 210, pp.133-170, 2005.

(2008年4月14日 受付)