

非線型波伝播の有限要素法

— F E M A L E —

旧大原研・理工学部 川上一郎 (Ichiro Kawakami)

相澤正満 (Masamitsu Aizawa)

保存型非線型双曲型偏微分方程式は、衝撃波などの不連続面が発生し、two step Lax-Wendroff法などの差分法では、数値的振動がおこることが知られている。この振動は、离散化のため、不連続面の近傍に流入したエネルギーが運動エネルギーとなるためである。この運動エネルギーは、熱化されねばならない。この熱化は、差分法に陰に含まれる粘性項（数値的粘性項 — Friedrichs scheme）や、強制的に附加した粘性項（人工粘性項 — von Neumann and Richtmyer）によって行われる。これらの粘性項は、不連続面を連続化し、したがって、数値解法によつては、不連続面は消滅し、この意味で精度は悪くなる。

MHD計算においては、非理想電磁流体模型による場合、電気抵抗を含んでいて、このため、粘性項と同じように、結果に拡散を起す。このような拡散は、物理的拡散であり、不

連続面を発生させない。物理的拡散項は、対象とする微分方程式にすでにあるもので、必要不可欠である。この項を含む微分方程式を数値的に解くときには、しかし、差分法に含まれる数値的拡散項による拡散と混じって数値解にあられ、普通の場合、物理的拡散と数値的拡散は区別できない。むしろ数値的拡散の方が、結漏を左右している。そのため、計算結果は、定性的にはともかく、定量的には、信頼性が失われれてしまっている。

ここでは、物理的拡散の全くない双曲型の方程式も、拡散の全くおこらないように解く方法を提案する。このような方法にしたがって方程式を数値的に解き、その上で物理的拡散も含ませることにより、物理的拡散の効果を見ることができると考えよう。

以下述べる方法は、有限要素法 (FEM) を拡張し、要素と節点を自由に運動させる自由度を含ませる。このように、要素や節点を自由に運動させることを ALE (Arbitrary Lagrangian and Eulerian) と呼んでいる。したがって、この方法を FEMALE 法と呼ぶ。もともとは、ICED ALE 法のアルゴリズムが見通しが悪いので、FEM で書き直そうとしたのが FEMALE 法のはじまりである。その上で、不連続面のあたりでも高精度を得るように、最適な要素・節点速度 v_g を

見出す。連続な $\Delta t = 3$ では、節点速度の与え方は、精度には影響がなく、文字通り ALE である。しかし、不連続面では正しく v_j をえらばないと、差分法と同じ振動が発生し、この振動をおさえるには、拡散を強制しなければならない。

§1. 有限要素法による离散化

以下、1次元問題とする。2次元と3次元への拡張は、若干の手続きが加わるが、難しくはない。3次元問題のプログラムはすでに稼働中である。1次元に限るのは、この種の問題は1次元で理論が展開されており、また理論も簡単であるからである。

保存型双曲型偏微分方程式系は、 U を未知ベクトルとすとき

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} = 0 \quad (1.1)$$

と書ける。Fは、Uの各成分に対応する流束を成分とするベクトルである。Uは、質量、運動量、エネルギー、磁束を成分とする。成分の数を n とすれば、 $U \in \mathbb{R}^n$ である。

双曲型であるとは、Jacobian $J = \partial F / \partial U \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ は、 n 個の固有値をもち、かつ全部の固有値が実でかつ互いに異なっていることである。

$$\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_n \quad (1.2)$$

物理的には、 λ_i は、非線型波の速度である。(1.1)は

$$\frac{\partial U}{\partial t} + J \frac{\partial U}{\partial x} = 0 \quad (1.3)$$

とも書ける。以上の式は、distributionの意味で微分を考えていい。以下同様。

プラズマなどの流体の占める空間を Ω とし、これを、

有限要素 Re ($e=1, 2, \dots, Ne$) に分割する。

$$\Omega = \bigcup_{e=1}^{Ne} Re, \quad Re \cap R_f = \emptyset \quad (e \neq f) \quad (1.4)$$

Re は、節点によって定義する。節点の位置を $x^M \in \Omega$ とする。 $(M=1, 2, \dots, N)$ 。節点数を N とすると、 N 個の関数 ϕ^M

$(M=1, 2, \dots, N)$ によってつくる関数列

$$\{ \phi^1(x, t), \phi^2(x, t), \dots, \phi^N(x, t) \}$$

を導入する。ただし、

$$(i) \quad \sum_{M=1}^N \phi^M(x, t) = 1, \quad x \in \Omega \quad (1.5)$$

$$(ii) \quad \phi^M(x^\nu, t) = \delta^{M\nu} \quad (1.6)$$

$$(iii) \quad \phi^M(x, t) = 0, \quad x \notin \Lambda_M = \{ Re \mid x_M \in Re \} \quad (1.7)$$

(1.5) は ϕ^M が内挿関数列であることを暗示し、(1.6) は、 ϕ^M は x^M で 1、その他の要素の節点上で 0 であることを示し、(1.7) は、 ϕ^M が x^M のまわりに局所的であることを示す。いづれも通常の FEM の場合と同じである。 ϕ^M を形状関数 (shape function) と呼ぶ。

次に、 $\phi^M(x, t)$ は、運動する要素の上では、時間と共に一定であるとす (ALE)。すなわち、

$$(iv) \quad \frac{\partial \phi^M}{\partial t} + v_g \frac{\partial \phi^M}{\partial x} = 0. \quad (1.8)$$

いいかえると、 $\phi^M(x, t)$ は

$$\frac{dx}{dt} = v_g \quad (1.9)$$

によって一定である。 v_g は、この段階では任意とする。

U と F を、 ϕ^M によって展開する:

$$U \cong \sum_{\mu} \phi^{\mu} U_{\mu}(t) \equiv U'(x, t), \quad (1.10)$$

$$F \cong \sum_{\mu} \phi^{\mu} F_{\mu}(t) \equiv F'(x, t). \quad (1.11)$$

展開係数 U_{μ} と F_{μ} は、 $x = x^M$ における U と F の節真値である。U と U' 、F と F' は、(1.6) により、それぞれ一致する。

Galerkin 法により、

$$\int_{\Omega} d\Omega \phi^M \left(\frac{\partial U'}{\partial t} + \frac{\partial F'}{\partial x} \right) = 0 \quad (1.12)$$

を要請し、(1.12) を $U_{\mu}(t)$ の決定方程式とす。(1.12)

は、(1.8) - (1.11) を代入して

$$\sum_{\nu} \alpha^{\mu\nu} \frac{dU_{\nu}}{dt} = C^{\mu}, \quad (1.13)$$

$$\begin{aligned} \text{ただし} \quad C^{\mu} &= \int_{\Omega} d\Omega \phi^M \left(v_g \frac{\partial U'}{\partial x} - \frac{\partial F'}{\partial x} \right) \\ &= \sum_{\nu} R^{\mu\nu} v_{g\nu} - S^{\mu} \end{aligned} \quad (1.14)$$

$$R^{\mu\nu} = \int_{\Omega} d\Omega \phi^{\mu} \phi^{\nu} (\partial U' / \partial x) \quad (1.15)$$

$$= \sum_{\rho} \beta^{\mu\nu\rho} U_{\rho},$$

$$S^{\mu} = \int_{\Omega} d\Omega \phi^{\mu} \partial F' / \partial x \quad (1.16)$$

$$= \sum_{\nu} \beta^{\mu\nu} F_{\nu},$$

また

$$\beta^{\mu\nu\rho} = \int_{\Omega} d\Omega \phi^{\mu} \phi^{\nu} (\partial \phi^{\rho} / \partial x) \quad (1.17)$$

$$\beta^{\mu\nu} = \int_{\Omega} d\Omega \phi^{\mu} (\partial \phi^{\nu} / \partial x) \quad (1.18)$$

であり、 $\alpha^{\mu\nu}$, $\beta^{\mu\nu\rho}$ および $\alpha^{\mu\nu}$ は、 x^{μ} が与えられたとき
の幾何学定数である。 ϕ^{μ} が簡単なものである場合は、 $\alpha^{\mu\nu}$, $\beta^{\mu\nu\rho}$
および $\alpha^{\mu\nu}$ は解析的に求められる。以下要素は simplex と
する。 $n=2$ は 1次元だから、要素は線分、 ϕ^{μ} は 1次関数、
 $\beta^{\mu\nu\rho}$, $\beta^{\mu\nu}$ は定数である。 C^{μ} ($1 < \mu < N$) は、 $C^{\mu} \in \mathbb{R}^n$ で

$$\begin{aligned} C^{\mu} = & \frac{1}{6} [v_{g\mu+1} (U_{\mu+1} - U_{\mu}) - (F_{\mu+1} - F_{\mu}) \\ & + 2 v_{g\mu} (U_{\mu+1} - U_{\mu-1}) - (F_{\mu+1} - F_{\mu-1}) \\ & + v_{g\mu-1} (U_{\mu} - U_{\mu-1}) - (F_{\mu} - F_{\mu-1})] \end{aligned} \quad (1.19)$$

である。また、 $\alpha^{\mu\nu}$ は

$$\begin{aligned} \sum_{\nu} \alpha^{\mu\nu} \frac{dU_{\nu}}{dt} = & \frac{1}{6} [(x_{\mu+1} - x_{\mu}) \frac{dU_{\mu+1}}{dt} \\ & + 2 (x_{\mu+1} - x_{\mu-1}) \frac{dU_{\mu}}{dt} \\ & + (x_{\mu} - x_{\mu-1}) \frac{dU_{\mu-1}}{dt}] \end{aligned} \quad (1.20)$$

(1.13) は,

$$\frac{dU}{dt} = v_g \frac{\partial U}{\partial x} - \frac{\partial F}{\partial x} \quad (1.21)$$

の共役近似となつてゐる。この式自身は、 $d/dt = \partial/\partial t + v_g \partial/\partial x$ と考えれば、(1.1) である。また、ICED ALE の基礎方程式

$$\frac{d}{dt} \int_{Re} d\Omega U = \int_{Re} d\Omega \operatorname{div} (U v_g - F) \quad (1.22)$$

は、(1.12) を変形して

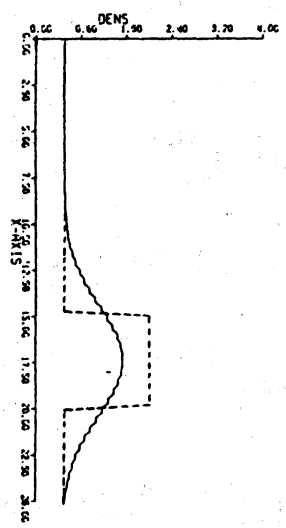
$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} d\Omega \phi^M U' = \int_{\Omega} d\Omega \phi^M \operatorname{div} (U' v_g - F') \quad (1.23)$$

と対照すれば、異同は明きらかである。ただし、右辺が C^M とした形 (1.13) は、(1.23) の形より大きな利便があることが、以下明きらかになる。

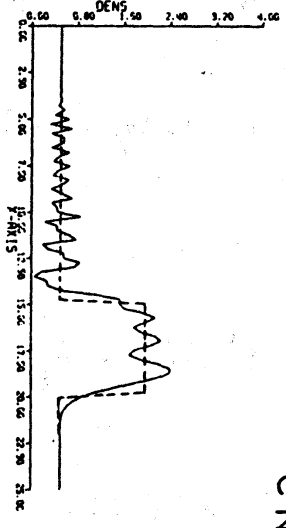
§2. 一般化 Rankine-Hugoniot 関係式による最適化

これまで、 v_g は任意であった。先にも述べた通り、(1.13) と、 $x = x_f$ とした (1.9) を、連続な $U \in C^1$ に対して連立常微分方程式と考へて解く限り、 v_g は $v_g = 0$ (Eulerian) としても、 $v_g = v$ (Lagrangian) としても問題は無い。ICED ALE と比べて、見通しのよい式になつてゐるだけである。

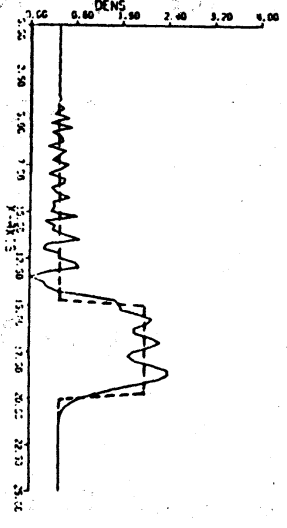
ここでは、先ず、不連続性のあつた 1 次元パルスの伝播の問題を解いて見る。この問題は、単一の双曲型偏微分方程式



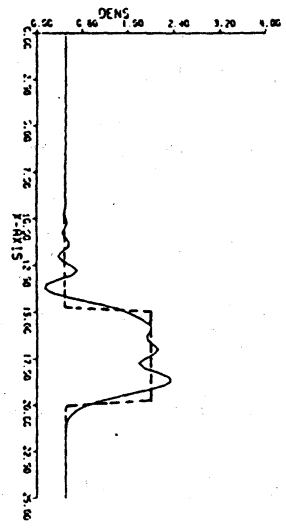
F



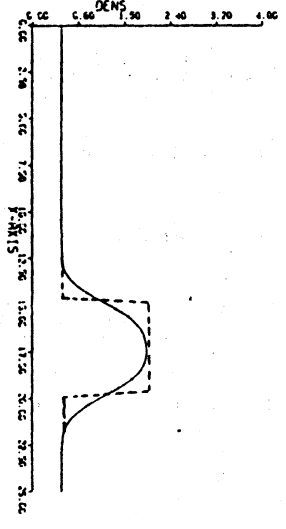
CN



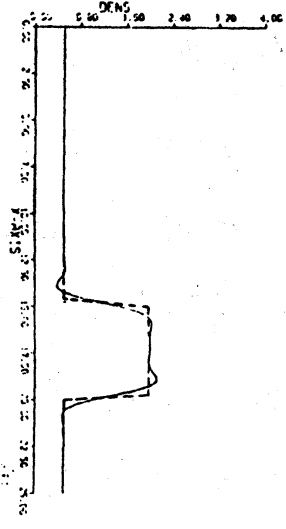
LF



LW



G



FCT

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial PV}{\partial t} = 0 \quad v = \text{const.} \quad (2.1)$$

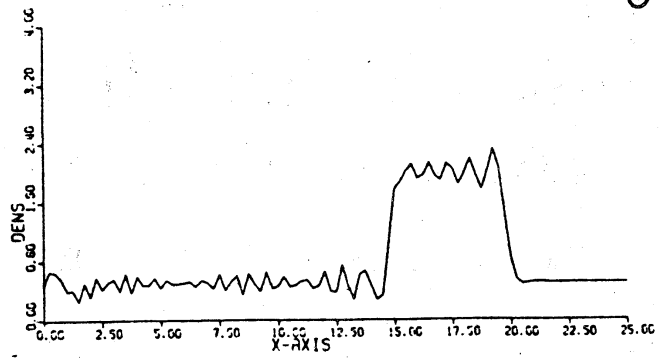
で記述され、SHASTA-FCTの試計算問題として取り上げられた問題である。参考のために、EulerianのスキームであるFriedrichs (F), Crank-Nicholson (CN), leap frog (LF), two step Lax-Wendroff (LW), Godunov (G), SHASTA-FCT (FCT)の各スキームで解いた数値例を示す。SHASTA-FCTは圧倒的によい結果を与えている。各スキームに特徴的な拡散と振動が見られる。

(2.1)に対応する(1.13)は、 $U=P$, $F=PV$ とおいて(1.19)と(1.20)より

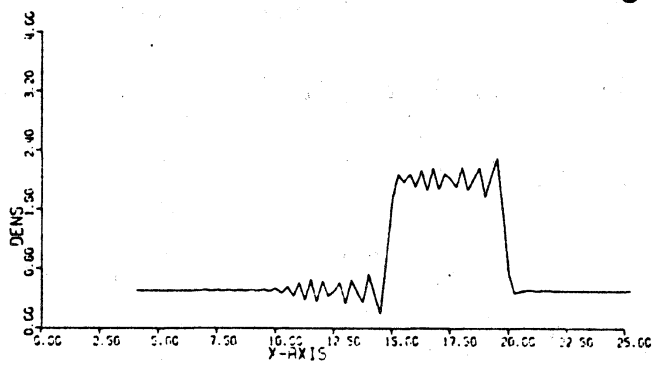
$$\begin{aligned} & \frac{1}{6} \left[(x_{\mu+1} - x_{\mu}) \frac{dP_{\mu+1}}{dt} + 2(x_{\mu+1} - x_{\mu-1}) \frac{dP_{\mu}}{dt} + (x_{\mu} - x_{\mu-1}) \frac{dP_{\mu-1}}{dt} \right] \\ & = \frac{1}{6} \left[(v_{g\mu+1} - v)(P_{\mu+1} - P_{\mu}) + 2(v_{g\mu} - v)(P_{\mu+1} - P_{\mu-1}) \right. \\ & \quad \left. + (v_{g\mu-1} - v)(P_{\mu} - P_{\mu-1}) \right] \end{aligned} \quad (2.2)$$

となる。 $v_g = 0$ (Eulerian), $v_g = 0.8v$, $v_g = v$ (Lagrangian), $v_g = 1.2v$ として解いた数値例を、上述の差分法による例の次に示す。 $v_g < v$ では、振動がパルスの後方に現われ、 $v_g > v$ では、前方に表われている。あたかも、流体の中を物体が走る時の波が現れるのと同じ現れ方である。 $v_g = v$ は、物体が流体に対して静止していることに対応する。波の表われ方は、 $|v_g - v|$ が大きいほど大きい。 $v_g = v$ の時には

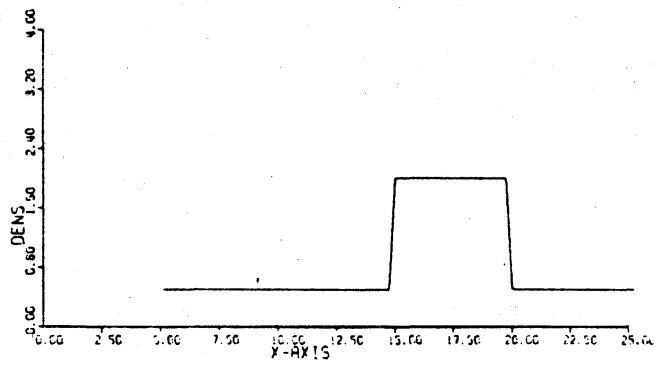
0



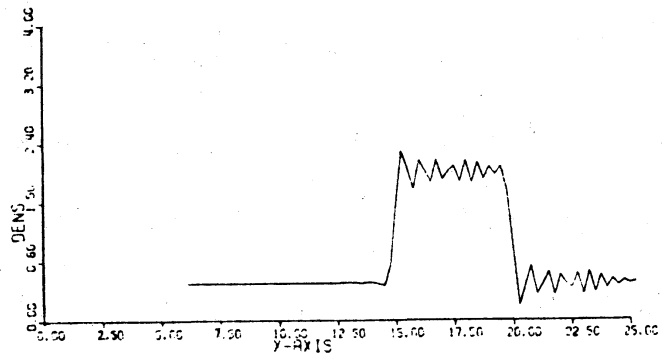
0.8



1.0



1.2



完全に正確である。計算負荷は少なくてよく、この問題では不連続面の前後に1負ずがあればよい。この高精度の理由は、(2.2)で、 $v_f = v$ とおけば、右辺は0となり、結局、

$$\frac{dP_M}{dt} = 0 \quad (2.3)$$

を解いていくことになるからである。

この例では、単一方程式であって、かつ v_f は Lagrangian であったときに厳密解と一致する数値解が得られた。一般に連立方程式となる流体の場合にも、Lagrangian では、質量保存は厳密に満たされるので、ICED ALE のような ALE 法では、Lagrangian が推奨されていく。しかし、その他の量である運動量やエネルギーの保存は、 $C^h \neq 0$ となるという意味において成り立たない。もう少し non-trivial な問題によって、 $C^h = 0$ の条件を調べて見る。 $C^h \in R^n$ で $n > 1$ の問題として、Riemann 問題を取り上げる。

Riemann 問題は、 $t = 0$ において不連続面があったとき、 $t > 0$ での U の値を求める問題である。 $U = (p, p v, e)^T$, $e = \frac{1}{2} p v^2 + p$ とすると、 $F = (p v, p v^2 + p, (e + p) v)^T$ である。この解は、衝撃波と接触不連続面との不連続面、および希薄化波の similarity solution によってあらわされることが知られていく。不連続面の速度を C_s とすると、衝撃波面においては C_s は衝撃波面速度であり、接触不連続面にお

いては、 $C_s = v$ (流速) である。不連続面の左では $U = U_L$ 、右では $U = U_R$ とすると、Rankine-Hugoniot の関係

$$(U_R - U_L)C_s = F_R - F_L \quad (2.4)$$

が成立していい。 $U \in \mathbb{R}^n$, $F \in \mathbb{R}^n$, $n=3$ であるから、(2.4)

は $n=3$ 個の関係式である。 U と F を、Heaviside 関数により

$$U = U_L + \theta(x - x_\mu)(U_R - U_L) \quad (2.5)$$

$$F = F_L + \theta(x - x_\mu)(F_R - F_L) \quad (2.6)$$

とあらわす。このとき、不連続面の近傍での C^M は、

$$\begin{aligned} C^M &= \int dx \left(v_g \frac{\partial U}{\partial x} - \frac{\partial F}{\partial x} \right) \phi^M \\ &= v_g(x_\mu)(U_R - U_L) - (F_R - F_L) \end{aligned} \quad (2.7)$$

より、 $v_g(x_\mu) = C_s$ なる、 $C^M = 0$ となる。希薄化波の領域では、 $U(x, t)$ は、 $\xi = x/t$ ($t=0$ で不連続面は $x=0$ にあるとす) のみの関数であるから、 C^M の被積分関数は

$$v_g \frac{\partial U}{\partial x} - \frac{\partial F}{\partial x} = (v_g - \xi) \frac{\partial U}{\partial x} \quad (2.8)$$

となり、 $v_g = \xi$ とおけば、0 となる。したがって、 $t > 0$ では、 $C^M = 0$ である。故に、Riemann 問題においては v_g がそれぞれの局所的な非線型波の速度に等しいときには、 $C^M = 0$ である。したがって、Riemann 問題は、 $t > 0$ においては、

$$\frac{dU_\mu}{dt} = 0, \quad \frac{dx_\mu}{dt} = v_{g\mu} \quad (2.9)$$

に帰着する。 $v_{g\mu}$ が正確なら、 U_μ の数値解は正確である。

したがって Riemann 問題は、distribution の意味で

$$\frac{\partial U}{\partial x} v_g = \frac{\partial F}{\partial x} \quad (2.10)$$

を、 v_g に対する 独立 一次方程式とみなして解くことになす。

Riemann 問題に属するかぎり、(2.10) の n 個の方程式は v_g が唯一に定まる。しかし、一般の問題には、 $n > 1$ であるから、overdetermined となす。そこで、 v_g を残差

$$r = \frac{\partial F}{\partial x} - v_g \frac{\partial U}{\partial x} \in \mathbb{R}^n \quad (2.11)$$

のユークリッドノルム $\|r\|_2$ を最小にするものと要請することになす。そうすれば、 $\partial U / \partial x = 0$ でない限り

$$\frac{\partial U^T}{\partial x} \frac{\partial U}{\partial x} v_g = \frac{\partial U^T}{\partial x} \frac{\partial F}{\partial x} \quad (2.12)$$

より v_g は定まる。このようにして定めた v_g は、 $J = \partial F / \partial U$ の固有値 (1.2) と次のような関係にある： J の固有関数

(right eigenvector) を r_i ($i=1, 2, 3, \dots, n$) とすると、 r_i は完全系をなす。 $\partial U / \partial x$ を r_i で展開する。 $(\|r_i\|_2 = 1)$

$$\frac{\partial U}{\partial x} = \sum_{i=1}^n a_i r_i \quad a_i : \text{amplitude} \quad (2.13)$$

こうすると

$$\frac{\partial F}{\partial x} = J \frac{\partial U}{\partial x} = \sum_{i=1}^n \lambda_i a_i r_i \quad (2.14)$$

また、 J の固有関数 (left eigenvector) を l_i ($i=1, 2, \dots, n$) とし、 $\|l_i\|_2 = 1$ と規格化して

とす。 (2.12) は、
$$\frac{\partial U^T}{\partial x} = \sum_i b_i l_i \quad b_i: \text{amplitude (2.15)}$$

となり、 w_i は w_i なる重みによる算術和となる。 $\therefore w_i$ は

$$w_i = b_i a_i / \sum_{i=1}^n b_i a_i \quad (2.17)$$

である。 \therefore

$$l_i r_j = \delta_{ij} \quad (2.18)$$

なる関係を用いた。(2.16)は、不連続面がエントロピー条件を満たすことを示している。(2.16)の v_g は、必ずしも $C^H=0$ とはならない。したがって、一般の問題では、

(2.12)より求めた v_g を C^H (1.19)に代入し、(1.13)より U_μ を求めることになる。

(2.10)は、一般化されたRankine-Hugoniot関係式に他ならない。微分が存在しない場合(不連続面)には、distributionの意味でのRankine-Hugoniot関係式である。

(1.1)は、Rankine-Hugoniot関係式が成立する時には、右辺が0になつていゝ。パルス伝播問題では、 $J=U$ となつていゝため、Rankine-Hugoniot関係式は、 $v_g=U$ (Lagrangian)を与え、したがって $C^H=0$ が常に満たされていゝ。

§3. 数値解法

一般に、3次元の

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \operatorname{div} F = 0 \quad (3.1)$$

を解くことを考える。Uは未知ベクトル $U \in R^n$, Fは対応する流束ベクトル $F \in R^n \times R^3$ である。Galerkin法によ

$$\text{り、} \quad \sum_{\nu} \alpha^{\mu\nu} \frac{dU_{\nu}}{dt} = C^{\mu} \quad (3.2)$$

$$C^{\mu} = \sum_{\nu} R^{\mu\nu} \cdot v_{g\nu} - S^{\mu} \quad (3.3)$$

$$\begin{aligned} R^{\mu\nu} &= \int_{\Omega} d\Omega \phi^{\mu} \phi^{\nu} \operatorname{grad} U \\ &= \sum_P \beta^{\mu\nu P} U_P \end{aligned} \quad (3.4)$$

$$\begin{aligned} S^{\mu} &= \int_{\Omega} d\Omega \phi^{\mu} \operatorname{div} F \\ &= \sum_{i,\nu} \beta_i^{\mu\nu} F_{i\nu} \end{aligned} \quad (3.5)$$

$$\beta^{\mu\nu P} = \int_{\Omega} d\Omega \phi^{\mu} \phi^{\nu} \operatorname{grad} \phi^P \quad (3.6)$$

$$\beta_i^{\mu\nu} = \int_{\Omega} d\Omega \phi^{\mu} \operatorname{div} (\phi^{\nu} \mathbf{e}_i) \quad (3.7)$$

を得る。これから

$$\frac{d\alpha_{\mu}}{dt} = v_{g\mu} \quad (3.8)$$

と立させて、数値的に解くことにより、(3.1)の近似解を

求める。

$W_{g\mu}$ は、(3.3) の C^M のユークリッドノルム $\|C^M\|_2$ を最小にするという条件から求める。しかし、一般には、この条件だけでは、 $W_{g\mu}$ は一意には定まらない。そこでさらに、 $\|W_{g\mu}\|_2$ も最小にするという条件をつける。このとき、 $W_{g\mu}$ は一意に定まる。この事情は、一般逆行列 (generalized inverse of matrix) の理論において、Moore-Penrose の一般逆行列を用いた解を求めたことに相当する: A は任意の行列とする。 $A \in R^m \times R^n$ 。この時、在立一次方程式

$$Ax = b, \quad x \in R^n, \quad b \in R^m \quad (3.9)$$

の一般解は、 A^+ を Moore-penrose の一般逆行列とするとき、

$$x = A^+b + (I - A^+A)x_0 \quad (3.10)$$

で与えられる。 x_0 は任意のベクトル、 $x_0 \in R^n$, I は単位行列 $I \in R^n \times R^n$, である。(3.10) は、 $\|b - Ax\|_2$ を最小にする x であり、 A^+b は、さらに $\|x\|_2$ を最小にする。 A が正則なら $A^+ = A^{-1}$ となり、 $x = A^{-1}b$ である。 A^+b を求める数値解法は、

$$A^T A x = A^T b \quad (3.11)$$

に対する共役勾配法 (CG) で、初期ベクトル $x_0 = 0$ として逐次的に求めていく。初期ベクトルを $x_0 \neq 0$ とすれば、丁度 (3.10) の x に収束する。

v_{gm} が求められたら、この値を(3.3)に代入し、この C^M を(3.2)の右辺とする。(3.2)から dU_M/dt を求める。 $[A^{ML}]$ な2行列は、対称・正定値であるから、ICCG法によって dU_M/dt を得る。 dU_M/dt より U_M を得るのは、常微分方程式の数値解法による。これまでの議論により、この常微分方程式は右辺が小さくなることが多い(そのように v_{gm} をえらんでいくから)ので、stiffになることは稀だと考えられる。したがって、Adams法によればよいと考えられる。

衝撃波管内問題を上に述べたような手順で計算した結果を次に示す。 $U_L = (P_L, P_L v_L, E_L)^T$, $U_R = (P_R, P_R v_R, E_R)^T$ とするとき、 $P_L/P_R = 50$, $E_L/E_R = 250$, $v_L = v_R = 0$ を初期条件としておいた。マッハ数 ≈ 3.88 である。実線は厳密解、黒点は計算値である。プロフィールを正しく出すためには、衝撃波の近傍より希薄波のあたりに計算点の数が多ければ望ましい。

FEMALE法でもっとも計算時間を要するのは、 v_{gm} を求める計算である。特に3次元計算では、 R^{ML} 行列の組立てのところでまぎれこんで来た打ち切り誤差や丸め誤差が、 R^{ML} のランクをふやすために、一般逆行列の本来的に小さくあるべき要素を誤差の逆数程度まで大きくすることがある。特異値分解を行って、この誤差による部分を除去には必要がある。

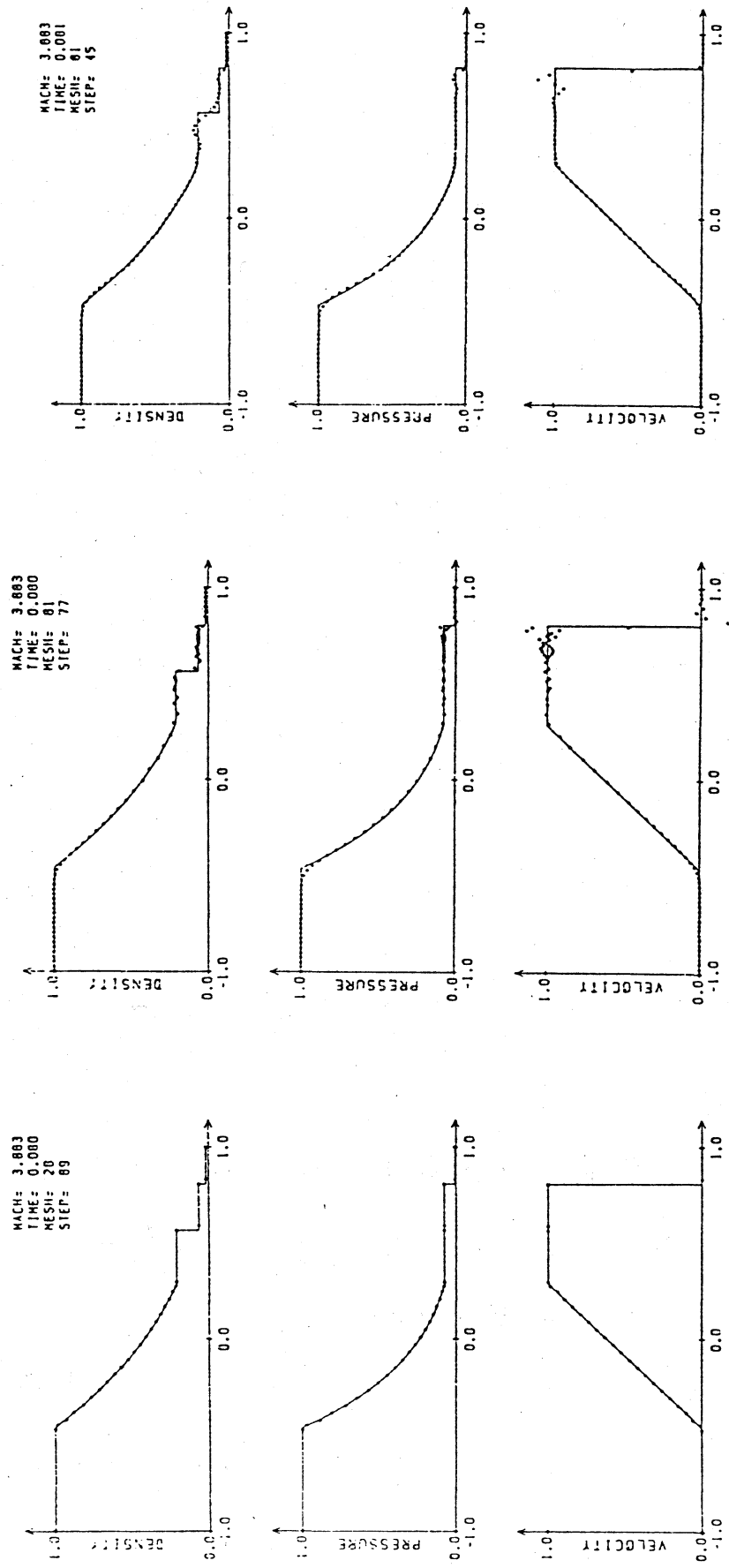


Fig. 1

FEMALE method

Fig. 2

Lagrangian method

Fig. 3

Two-step Lax-wendroff method