小特集

波動現象シミュレーションのための無反射境界の作り方

谷口隆晴*

ABSTRACT Nonreflecting boundary conditions for numerical simulations of waves are reviewed. We describe the idea of the classical Engquist-Majda boundary condition for linear wave equations and the Hedstrom boundary condition for quasilinear hyperbolic systems. Some comments on the theoretical aspects of the boundary treatments such as the validity of the nonreflecting boundary conditions are provided. The recent developments on this subject are also discussed.

1. はじめに

自動車，航空機設計などにおける流体シミュレーション，アンテナや高速回路の設計における電磁波シミュレーション，また，気候予測での大気･海洋シミュレーションなど，様々なところで波のシミュレーションは行われている．広大な領域上で波のシミュレーションを行う際には，空間を有限に打ち切るためだけに導入される人工的な境界の取り扱いが問題となる．この問題は昔から認識されており，この30年ほどの間に様々な方法が提案されているが，本稿では特に，その中でも基本的な方法について，その考え方を紹介する．

2. 人工的な境界とその取り扱い

例として，航空機の設計において，機体まわりの流れを数値的に計算する場合を考えよう．この場合，機体の周囲の空間を適当な格子やメッシュで区切り，流体の基礎方程式を離散化して計算するわけであるが，まさか航空機の飛行している空全体を計算機上で扱うわけにはいかないため，計算対象とする領域は適当な大きさで打ち切る必要がある．このとき「打ち切った断面」という物理的には存在しない人工的な境界が現れる(**図1**)．そのときに問題となるのが，人工的な境界からの反射波である．このような境界は現実には存在していなかったのだから，境界上で波が反射してしまうと，現実の問題をうまくシミュレーションできたことにはならない．実際，航空機の例では，周囲の境界で反射波が発生してしまうと密閉された部屋の中で航空機を飛ばしているようなことになり，何をやっているのかよくわからない．

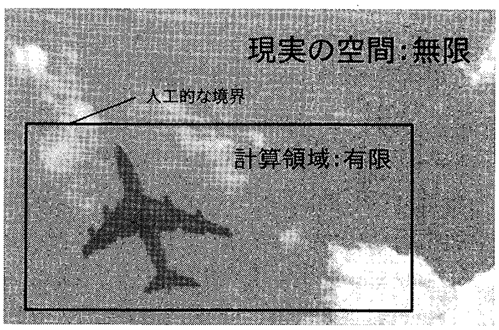

図1　計算領域の打ち切りと人工的な境界

単純な方法としては，例えば，境界上の値を外挿により求めるという方法が考えられるであろう．しかし，これでは大抵の場合にはうまくいかない．簡単な例として，波動方程式

$$u_{tt}-u_{xx}-u_{yy}=0 \quad (x>0, y\in \mathbf{R})$$

を差分法で離散化することを考えよう．ただし，ここでは下付きの添字は偏微分を表している．境界以外の点では単純に中心差分を用いて

$$\frac{u_{i,j}^{(n+1)}-2u_{i,j}^{(n)}+u_{i,j}^{(n-1)}}{(\Delta t)^2}-\frac{u_{i+1,j}^{(n)}-2u_{i,j}^{(n)}+u_{i-1,j}^{(n)}}{(\Delta x)^2}-\frac{u_{i,j+1}^{(n)}-2u_{i,j}^{(n)}+u_{i,j-1}^{(n)}}{(\Delta y)^2}=0$$

などと離散化することにする．ただし，$u_{i,j}^{(n)}$ は $u(i\Delta x, j\Delta y, n\Delta t)$ の近似値を表すものとする．さて，境界上の

The Design of Nonreflecting Boundaries for Numerical Simulations of Waves. By *Takaharu Yaguchi* (University of Tokyo).

* 東京大学大学院情報理工学系研究科

扱いであるが，例えば，境界 $x=0$ 上で

$$\frac{u_{0,j}^{(n+1)}-2u_{0,j}^{(n)}+u_{0,j}^{(n-1)}}{(\Delta t)^2}-\frac{u_{1,j}^{(n)}-2u_{0,j}^{(n)}+u_{-1,j}^{(n)}}{(\Delta x)^2}-\frac{u_{0,j+1}^{(n)}-2u_{0,j}^{(n)}+u_{0,j-1}^{(n)}}{(\Delta y)^2}=0 \qquad (1)$$

としたくなるが，$u_{-1,j}^{(n)}$ の値はわからない．そこで，境界付近のデータを利用して外挿してみる：

$$u_{-1,j}^{(n)} \simeq 2u_{0,j}^{(n)}-u_{1,j}^{(n)}$$

これを(1)に代入すると，u_{xx} の近似項が

$$\frac{u_{1,j}^{(n)}-2u_{0,j}^{(n)}+u_{-1,j}^{(n)}}{(\Delta x)^2}=\frac{u_{1,j}^{(n)}-2u_{0,j}^{(n)}+2u_{0,j}^{(n)}-u_{1,j}^{(n)}}{(\Delta x)^2}=0 \qquad (2)$$

となってしまい，実質的に $u_{xx}=0$ という境界条件が課されていることがわかる．(2)は固定端と同様の境界条件を表した式であり，実際，実装してみると**図2**のように反射が起きてしまう．

反射を防ぐための方法としては，大きく分けて次の2通りのアプローチがとられている：

- 境界上で「波が内側から外側への一方通行」となる境界条件(無反射境界条件, nonreflecting boundary condition, NRBC)を設置する方法，
- 境界付近に波が拡散，減衰してしまうような層(吸収層，absorbing layer)を設置する方法．

本稿では，無反射境界条件の例として，線形波動方程式に対するEngquist-Majdaの境界条件，準線形双曲型偏微分方程式系に対するHedstromの境界条件の2つを紹介する．紹介するのは，いずれも基礎的かつ古典的な手法であるが，その考え方はその後に提案された手法に影響を与えた重要なものである．吸収領域の設置法としてはBerengerのPML(Perfectly Matched Layer)法[2]が代表的である．詳細は省略するが，PML法は電磁波のシミュレーションに用いられ，損失性のある媒質で計算領域を囲み，波を分散させる方法である．その際，領域外側の媒質との接続部で反射波が発生する可能性があるが，そこではインピーダンスマッチングがとれるように外側の媒質をつくる．電磁波のシミュレーションに対する方法としては現在最も有効であるとされている方法であり，それ以外の問題への拡張も進んでいる．

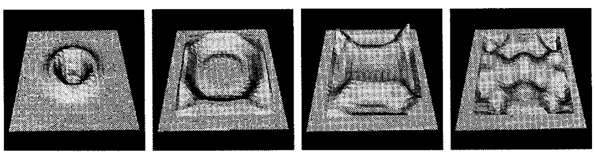

図2　境界上で外挿法を利用した場合の反射波

3. 線形波動方程式に対するEngquist-Majdaの無反射境界条件

この節では，Engquist-Majdaの線形の波動方程式に対する無反射境界条件[4]について紹介する．この手法はこの分野の草分け的な手法で，現在，広く利用されているMurの境界条件やHigdonの境界条件などもこの手法の改良とみなすことができる．

Engquist-Majdaの無反射境界条件はより広いクラスの方程式に対して適用することができるが，ここでは，簡単のために，定数係数の波動方程式を半空間 $x>0$ 上で解く場合

$$u_{tt}-u_{xx}-u_{yy}-u_{zz}=0 \quad (x>0,\, y, z \in \mathbf{R}) \qquad (3)$$

を考え，境界 $x=0$ で反射波の発生を防ぎたい場合を考える．この問題は極めて単純であるが，音源から十分遠方の音波や真空中の電波などを扱う場合はこの形の問題に帰着される．そのため，実用上はこの問題を考えれば十分である場合が多い．

Engquist-Majdaの境界条件の厳密な理論的背景は代数解析的な手法に基づく理論でやや複雑であるため，代わりに平面波を用いた直感的な説明を行う．なお，Engquist-Majdaの境界条件では，特異性の伝搬に基づいて反射の有無が議論されており，数値計算という観点からは若干の注意が必要である．例えば，定数係数でない方程式を扱う場合には，特異性を持たない滑らかな関数は0と同一視されるため，厳密に言えば，そのような滑らかな関数で記述される反射波が発生する可能性がある．このことについては，Antoineら[1]によっても指摘されている．

3.1 平面波解に対する無反射境界条件

$\tau>0$ とし(3)の平面波解

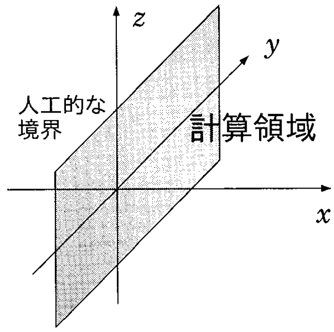

図3　(3)で考える計算領域．境界 $x=0$ で反射を防ぐ．

$$u(x, y, z, t) = \exp(\mathrm{i}(\xi x + \eta y + \zeta z + \tau t))$$

を考える．方程式(3)の分散関係は

$$\tau^2 - \xi^2 - \eta^2 - \zeta^2 = 0$$

であるから，$\tau^2 - \tau^2 - \zeta^2 > 0$ となるような η, ζ, τ の組を固定するごとに，

$$\xi = \xi_{\mathrm{left}} = \sqrt{\tau^2 - \eta^2 - \zeta^2}$$

と

$$\xi = \xi_{\mathrm{right}} = -\sqrt{\tau^2 - \eta^2 - \zeta^2}$$

を x 方向の周波数とする，2つの平面波が解となる．ここで，$\xi = \xi_{\mathrm{left}}$ と $\xi = \xi_{\mathrm{right}}$ はそれぞれ左に進む波と右に進む波に対応している．いま，計算領域は $x > 0$ としたので $\xi = \xi_{\mathrm{left}}$ が流出波，$\xi = \xi_{\mathrm{right}}$ が流入波，すなわち反射波に対応する．反射波の発生を防ぐためには，境界上で一方通行，すなわち，流出は可能であるが，流入はできないようにすればよく，それは，境界上では $\xi = \xi_{\mathrm{left}}$ となる波のみが解として許されるような境界条件を設定することで実現できる．従って，

$$u_x = \mathrm{i}\sqrt{\tau^2 - \eta^2 - \zeta^2}\,u \qquad (4)$$

なる境界条件を設定すれば反射を防ぐことができる．

3.2 一般の解に対する無反射境界条件とその局所化

これまでは単独の平面波解について考えていたが，一般には解 u は平面波の重ね合わせで記述される．そこで，境界条件についても(4)を重ね合わせた

$$u_x = \mathcal{F}^{-1}\left(\mathrm{i}\sqrt{\tau^2 - \eta^2 - \zeta^2}\,\tilde{u}(\xi, \eta, \zeta, \tau)\right) \qquad (5)$$

を設定すればよい．ただし，$\tilde{u}$ は u の Fourier変換したものを表し，$\mathcal{F}^{-1}$ は逆Fourier変換を表す．

境界条件(5)は確かに反射を防ぐことができるが，Fourier変換を用いるため，設定には計算領域全域でのデータが必要となる．(5)のように，計算領域全域でのデータを用いた計算を必要とする境界条件を大域的な境界条件と呼ぶ．一般に，波のシミュレーションを行う際には航空機の翼やアンテナなどといった様々な物体まわりの計算を行うことが多く，計算領域は複雑な形をしている．そのため，大域的な境界条件を用いると，複雑な形をした領域上でFourier変換の計算などを行わなくてはならず，望ましくない．また，全域でのデータを用いた計算は計算量の面からも実用的ではない．そこで(5)を近似し，局所化した境界条件が利用される．

局所化の基本的な考え方は以下のようなものである．まず，境界に入射する波の多くは境界に対して垂直に入射すると期待できる．そのため，実用上はそのような波が入射した場合について反射波が発生しなければ十分であり，境界に平行な波については性能が落ちてもよい．つまり，入射波について τ は ξ と同程度，η, ζ は ξ に比べて十分小さいと仮定できる．そこで，$\eta/\tau, \zeta/\tau$ が微小であると仮定して $\sqrt{\tau^2 - \eta^2 - \zeta^2}$ を展開し，多項式で近似する．すると，周波数領域での多項式は微分作用素に置き換えられるので(5)が局所的な境界条件で近似できる．

Engquist-Majda の境界条件では $\sqrt{\tau^2 - \eta^2 - \zeta^2}$ の近似にTaylor展開を用いている．$\eta/\xi, \zeta/\xi, \tau/\xi$ が微小であると仮定してTaylor展開をすると，1次までの近似

$$\sqrt{\tau^2 - \eta^2 - \zeta^2} \simeq \tau$$

から

$$u_x - u_t = 0$$

という境界条件が得られる．これは1次元の空間で左方向に進む波を記述した方程式である．2次までの近似では

$$\sqrt{\tau^2 - \eta^2 - \zeta^2} \simeq \tau - \frac{1}{2}\left(\frac{\eta^2}{\tau} + \frac{\zeta^2}{\tau}\right)$$

となり，分母を払って

$$u_{xt} - u_{tt} + \frac{1}{2}(u_{yy} + u_{zz}) = 0$$

という境界条件が導かれる．より高次の近似も可能であるが，高次の手法は不安定(Hadamardの意味で初期値境界値問題として不適切になる)であったり，高階の偏微分作用素が現れ実装が複雑になったりするため，利用されることはほとんどない．実際に，2次の近似を行った場合の計算例を**図4**に示す．この程度の近似でも十分に反射波が打ち消せていることがわかる．

近似の仕方にはTaylor展開以外にも様々な方法が提案されており，特に，Padé近似による有理多項式近似を利用した方法は，問題の適切性を保証し，手法の安定性の面からも有用である．

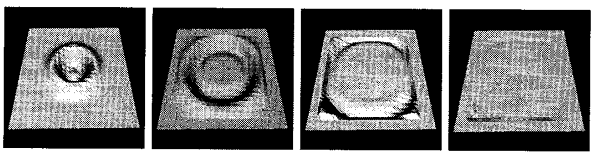

図4　2次精度Engquist-Majda無反射境界条件を利用した場合の波の伝搬

4. 非線型方程式系に対する特性曲線法を用いた無反射境界条件

非線型方程式に対する無反射境界条件は，大きく分けて次の3通りのアプローチが主流である：

1. 方程式を線形化して線形の理論に帰着させる方法，
2. PML法をはじめとする吸収層を利用した方法，
3. 非線型方程式における波の伝搬理論を利用した方法．

この節では3の非線型性を考慮した方法として，Hedstrom[7]の特性曲線法に基づく無反射境界条件について紹介する．

1次元の双曲型準線形方程式系

$$\vec{u}_t + A(\vec{u})\,\vec{u}_x = 0, \quad (x > 0) \tag{6}$$

について，境界 $x=0$ で反射を防ぎたい場合を考えよう．ただし，$\vec{u} = \vec{u}(x, t)$ は従属変数を並べた n 個の成分からなるベクトル，A は $\vec{u}$ に依存する対角化可能な $n \times n$ 行列とする．Hedstromの境界条件の考え方は(6)の解が単純波(simple wave)であると仮定して波を分解し，特性曲線法を用いてその進行方向を求め，流入する波を消去するというものである．

特性曲線法は，1階の(連立でない)偏微分方程式を常微分方程式系に帰着する方法で，これを用いると波の伝搬経路，つまり，波の進行方向を求めることができる．しかしながら，偏微分方程式系に対しては直接には適用はできず，何らかの仮定が必要である．解が単純波であるというのは，そのような仮定のひとつである．

単純波とは，(6)の解のうち，ただひとつのパラメータで記述することのできるような解，すなわち，あるスカラー値関数 $\theta(x, t)$ が存在して，$\vec{u}(x, t) = \vec{\phi}(\theta(x, t))$ のように記述できるような特別な解を指す．例えば，平面波 $\vec{u}(x, t) = \exp(\mathrm{i}(\xi x + \tau t))\,\vec{u}_0$ は，$\theta(x, t) = \xi x + \tau t$, $\phi(\theta) = \exp(\mathrm{i}\theta)\,\vec{u}_0$ を用いて $\vec{u}(x, t) = \vec{\phi}(\theta(x, t))$ と書けるので単純波である．

これは弱い仮定ではないが，無反射境界条件が設定されるのは，計算結果を切り捨ててもかまわないような，興味のある現象が起こっている場所から十分に遠方の領域である．そのため，興味のある現象をとらえるのに必要な，非線型性から生ずる複雑な相互作用などはないと仮定してもよいであろう．このような場合には，波は相互作用から切り離されて単独で伝搬し，解が単純波となることが期待される．

実際に解が単純波である場合の波の伝搬を考えよう．$\vec{u}(x, t) = \vec{u}(\theta(x, t))$ を(6)に代入すると，

$$(\theta_t I + \theta_x A)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\vec{\phi} = 0$$

となる．これが自明な解 $\vec{\phi}$ = (定数)以外の解を持つためには

$$\det(\theta_t I + \theta_x A) = 0 \tag{7}$$

でなくてはならない．すると，(7)は行列 A の固有方程式であるから，

$$\theta_t = -\,\theta_x \times (A\text{の固有値}), \tag{8}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\vec{\phi} = (A\text{の右固有ベクトル}) \tag{9}$$

であることがわかる．(8)は1階の，連立でない偏微分方程式であるから特性曲線法が利用できて，波は (x, t) 空間中の曲線

$$\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}x} = (A\text{の固有値})$$

上を伝搬することがわかる．これは行列 A の固有値が波の速度を表すことを意味する．一方，(9)からは，行列 A の固有値をひとつ定めたときに，対応する波の増分が右固有ベクトルで表されることがわかる．まとめると，ベクトル $\vec{u}$ は行列 A の各固有値に対応した n 個の波に分解でき，その固有値が波の速度を，固有ベクトルが波の増分を表していることになる．

無反射境界条件を定めるためには，流入する波が発生できないような境界条件を定めればよいのであった．従って，固有値を調べて波の流入，流出を判定し，流入する波についてはその増分を0とおけばよい．A の固有値を λ_j, $j = 1, \ldots, n$，右固有ベクトルを $\vec{r}_j$, $j = 1, \ldots, n$，左固有ベクトルを $\vec{l}_j$, $j = 1, \ldots, n$ と表すことにする(A は対角化可能と仮定したので固有ベクトルは独立に n 本とれること，$\vec{l}_j$ は横ベクトルであることに注意)．すると，$\vec{u}$ を，$\vec{u}_t = \Sigma_j c_j \vec{r}_j$ のように，$\vec{r}_j$ の線型結合で表すことができるが，$\lambda_j > 0$ に対応する $\vec{r}_j$ については右に進む波，すなわち，流入波に対応しているので，反射波を防ぐには $c_j = 0$ となるように境界条件を設定したい．従って，右固有ベクトルと左固有ベクトルは相反系をなすようにとれるため c_j は $c_j = \vec{l}_j \vec{u}_t$ と書くことができることに注意すると，設定したい境界条件は

$$\vec{l}_j \vec{u}_t = 0 \quad (\text{for } j, \lambda_j > 0) \tag{10}$$

と得られる．これがHedstromの境界条件である．

Hedstromの境界条件は1次元の流れに対しては有効

であるものの，多次元化は困難である．実際，Thompson[13]によって形式的に多次元化された手法をNavier-Stokes方程式へ拡張したPoinsot-Leleの境界条件[14]は広く利用されているが，この手法は本質的に1次元的であることが知られている．これに対し，筆者らはHedstromと同様に解が単純波であると仮定して，流れの向きに対してアダプティブな方法を提案した[15]．数値計算例として[15]に示されている噴流に先行する音波のシミュレーション例を示す．**図5**がPoinsot-Leleの手法を用いた場合，**図6**がアダプティブな方法を用いた場合の結果である．図中，左側の動かない部分は噴流であり，そこから発生した音波の伝搬の様子が示されている．図5に比較し，図6では反射波が少なくなっていることが確認できる．

非線型性を考慮した方法としては，ここで紹介した特性曲線法を利用した方法以外に，非線型超局所解析に基づいた方法がSzeftel[12]によって提案されている．Szeftelの方法は非線型Schrödinger方程式を主な対象としており，Engquist-Majdaの境界条件と同様に特異性の伝搬に着目して導出されている．また，数値実験上も良い結果が得られているようである．

5. その他の方法

これまでに紹介してきた手法はどちらも古典的なもので，その後，様々な手法が提案されている．

Engquist-Majdaの境界条件の流れを汲むものとしては，Higdonの境界条件[8]が代表的である．Higdonの境界条件では，速度c，入射角αで境界に侵入する波は，境界条件$\cos(\alpha)u_t - cu_x$を満たすことに着目し，これを連立させた条件$\Pi_{j=1}^{m}(\cos(\alpha_j)\partial/\partial t - c\partial/\partial x)u = 0$を用いる．$m$は想定する波の向きの数であり，$m$を無限大にした極限では反射を完全に防ぐことができる．また，この方法ではmが増加するに従って偏微分作用素の階数が上がってしまい，実装や安定化に手間がかかるが，2階までの偏微分作用素を利用するだけで高精度化を達成する方法がGivoli-Netaによって提案されている[6]．

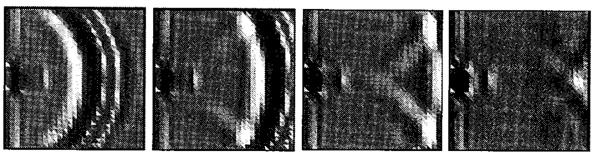

図5　Poinsot-Leleの境界条件を利用した場合

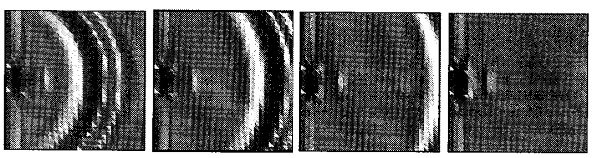

図6　Yaguchi-Sugiharaの境界条件を利用した場合

また，Dirichlet to Neumann写像を利用する方法[5]もある．こちらは局所的な境界条件とはならないことが多いが，厳密な理論保証が得られている．

有限要素法との組合せでは無限要素法[3]という方法も提案されている．これは，無限大サイズの要素を利用して無限領域をシミュレーションしようとする方法である．古くから提案されていた手法だが，改良が進み，最近，利用が進んでいる．なお，同じ無限要素法という名前を持つ方法で，メッシュの切り方に規則性を持たせることで実質的に無限個の有限要素を利用して計算を行うという方法[9]も提案されているが，こちらは特異点解析などへの応用が中心で，無反射境界条件としての利用はまれである．

相補演算子法(complementary operator method)[11]の考え方も面白い．既に提案されているある境界条件について，完全に反射を消すことができず，反射波が発生してしまっているとしよう．相補演算子法は，このような場合に，反射波と逆位相の反射波を発生させる別の境界条件を導出し，2つを組み合わせることで反射波を打ち消し，もとの境界条件の性能を高めるという方法である．

その他にも，吸収層に基づく方法や離散化の影響を考慮したものなど，様々な観点から非常に数多くの手法が提案されている．それらの手法については，やや古いがTsynkov[10]の論文によくまとめられているので，そちらを参照されたい．

6. おわりに

無反射境界条件の作り方については，この30年間の間に様々な研究がなされてきた．特に，方程式が線形の場合，あるいは，線形化が有効であるような場合には十分な解析がされている．最近の手法であれば，どの手法を利用しても実用上十分な性能が得られるであろう．ただし，無反射境界条件の導出は解くべき方程式の解析と密接に関わっているため，方程式の係数が少し変わるだけでも手法の修正が必要となる．その点は注意が必要である．方程式が非線型の場合には，特性曲線法を利用した方法を紹介したが，十分な性能を持つとはいえず，主流は吸収層を利用する方法である．しかし，吸収層を利用した方法は確かに良い性能を持

つが，計算領域の5倍もの厚さの層を用いなければいけない例なども報告されており，計算効率の観点からは不満が残る．非線型方程式に対する方法についてはさらなる改善の必要があるであろう．

参 考 文 献

1) X. Antoine and H. Barucq: Microlocal Diagonalization of Strictly Hyperbolic Pseudodifferential Systems and Application to the Design of Radiation Conditions in Electromagnetism, SIAM J. Appl. Math., **61**-6, 1877/1905 (2001)

2) J. P. Berenger: A Perfectly Matched Layer for the Absorption of Electromagnetic Waves, J. Comput. Phys., **127**, 363/379 (1996)

3) P. Bettess: Infinite Elements, Penshaw Press (1992)

4) B. Engquist and A. Majda: Absorbing Boundary Conditions for the Numerical Simulation of Waves, Math. Comp., **31**, 629/651 (1977)

5) D. Givoli and J. B. Keller: A Finite-element Method for Large Domains, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., **76**, 41/66 (1989)

6) D. Givoli and B. Neta: High-order Nonreflecting Boundary Scheme for Time-Dependent Waves, J. Comput. Phys., **186**, 24/46 (2003)

7) G. W. Hedstrom: Nonreflecting Boundary Conditions for Nonlinear Hyperbolic Systems, J. Comput. Phys., **30**, 222/237 (1979)

8) R. L. Higdon: Absorbing Boundary Conditions for Difference Approximations to the Multidimensional Wave Equation, Math. Comp., **47**, 437/459 (1986)

9) R. W. Thatcher: On the Finite Element Method for Unbounded Regions, SIAM J. Numer. Anal., **15**-3, 466/477 (1978)

10) S. V. Tsynkov: Numerical Solution of Problems on Unbounded Domains. A Review, Appl. Numer. Math., **27**-4, 465/532 (1998)

11) O. M. Ramahi: The Complementary Operators Method in FDTD Simulations, IEEE Antennas Propagat. Magazine, **39**-6, 33/45 (1997)

12) J. Szeftel: A Nonlinear Approach to Absorbing Boundary Conditions for the Semilinear Wave Equation., Math. Comp., **75**, 565/594 (2006)

13) K. W. Thompson: Time-dependent Boundary Conditions for Hyperbolic Systems, J. Compt. Phys., **68**, 1/24 (1987)

14) T. J. Poinsot and S. K. Lele: Boundary Conditions for Direct Simulations of Compressible Viscous Flows, J. Compt. Phys., **101**, 104/129 (1992)

15) T. Yaguchi and K. Sugihara: A New Characteristic Nonreflecting Boundary Condition for the Multidimensional Navier-Stokes Equations, AIAA Paper, 2005-2868 (2005)