

保存系偏微分方程式へのボロノイ粒子法の適用

A particle method based on Voronoi decomposition for conservation partial differential equations

降幡 大介¹⁾

Daisuke Furihata

¹⁾博(工) 大阪大学 サイバーメディアセンター 教授 (〒 560-0043 大阪府豊中市待兼山町 1-32, E-mail: daisuke.furihata.cmc@osaka-u.ac.jp)

We want to perform appropriate and fast numerical calculations using machine learning of the time-evolving operator of some conservation partial differential equations, such as the Cahn–Hilliard equation. Still, in the context of FDM and FEM, the amount of machine learning becomes enormous. Therefore, we consider applying a particle method based on the Voronoi decomposition and calculating particle behavior using machine learning.

Key Words : particle method, Voronoi decomposition, conservation partial differential equation, Cahn–Hilliard equation

1. はじめに

Cahn–Hilliard 方程式などの偏微分方程式で記述される問題で、質量保存性・局所組成保存性などとよばれる保存性を持つ保存系時間発展問題の数値解析を考えたい。こうした問題は上に述べた質量保存やエネルギー減少性・エネルギー保存性などといった大域的な性質を持っており、これらの性質は元の問題の物理的・化学的・生物学的・社会的な問題の性質を反映する重要な特徴である。そして、実際にこうした性質を持つ時間発展問題は多く存在する。これらの性質を保存する目的を持つ数値解析法として構造保存数値解法(structure-preserving method)や geometric integration method などと呼ばれる)が既に存在し、国内外で一定程度の発展を遂げている。例えば SciCADE(international conference on scientific computation and differential equations) という国際研究集会ではこのトピックに関するセッションが毎回開催され、多くの研究者が参加する。既存の構造保存数値解法は数値解の性能が優れていることが多く、ODE ではハミルトン系をベースに取り扱うことが一般的だが、PDE では変分構造を介して考えることができ、日本発の離散変分導関数法などがその例である。これらの手法は微積分などの連続極限で定義される作用素を離散化したうえで一貫性を保証するアプローチをとっており数学的に厳密であるが、計算量の大きさが難点である。構造保存数値解法の枠組みは偏微分方程式の場合は基本的に差分法、有限要素法、有限体積法に基づくもので既存研究はすぐれて進展しているが、その大きな計算量によって対象問題の規模に制約がかってしまう現状の根本的な打破は困難である。そのため、異なるアプローチとして、問題への粒子法の適用を検討すべき段階と考える。そこで、Cahn–Hilliard 方程式をはじめとする保存系時間発展問題に対し、連続の式を適用することで粒子法に適した形式に問題を書き換える、そのうえで構造保存の枠組みの導入の可能性

を鑑みて空間の Voronoi 分割に基づく粒子法を適用することを考える。

2. 相分離問題のモデル方程式 Cahn–Hilliard 方程式などの保存系時間発展問題の既存解法

Cahn–Hilliard 方程式を始めとする保存系時間発展問題に対する数値解法としては、まずは通常の解法である method of line がある。これは時間方向の離散化幅 Δt を小さくすれば一応使えるが、質量保存性、エネルギー減少性は離散化に伴って破られ、物理的にみておかしな数値解になりがちである。とくに長時間発展には不適切である。構造保存数値解法としての離散変分導関数法は長時間発展も考えると現在の本命である。とくに細かいパラメータ調整等もなくきちんと動作し、数値解の様子が物理的におかしいということあまり無い。数値解の一意存在性や安定性が証明できるケースもある。ただし、原理的に数値スキームが時間方向に陰的となり、そのため計算量は大きめである。予測子・修正子法による計算量の低減化や多段化に基づく線形スキーム設計の方法論も存在するが、前者はスキームの事前評価が理論的に困難であること、後者は問題の非線形性が多項式でないと不適であることや次数が 4 次を越えると数値不安定性が強くなることなどの制限がある。このように、保存系時間発展問題に対して、「数学的に適切な数値解を高速に確実に得る」という方法論については充実しているとはまだ言い難い。

3. 保存系時間発展問題への粒子法の適用

保存系時間発展問題に粒子法を適用することは難しくない。ここでいう「保存系」とはいわゆる局所保存性が成り立つ系、すなわち下記の連続の式が成り立つ系のことを指している。

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \operatorname{div}(uv) = 0. \quad (1)$$

ただし $u = u(x, t)$ は場所 x , 時間 t での系の密度 (0 以上 1 以下の実数値をとる) であり, ベクトル値関数 $v = v(x, t)$ は同じく場所 x , 時間 t での系の粒子速度ベクトルである。

そして, 保存系時間発展問題の微分方程式として

$$\frac{\partial u}{\partial t} = (-1)^{M+1} \Delta^M \frac{\delta G}{\delta u}, \quad M \geq 0. \quad (2)$$

と書けるものを (適切な境界条件の存在とともに) 一般に想定する。ただし Δ はラプラシアンであり, $G = G(u, x)$ は u, x に関する適當ななめらかな関数で, $\delta G / \delta u$ はその変分導関数である。なお以降の議論では一般性を失わない範囲で $M = 1$ として記述する。

この対象となる問題 (2) に連続の式 (1) を適用することで密度の時間発展項を消去でき, 空間微分作用素も一階分消去できることから, 粒子の速度を粒子の密度分布で記述する次の式を得る。

$$v = -\left(\frac{1}{u}\right) \text{grad} \left(\frac{\delta G}{\delta u} \right) \quad (3)$$

あとは粒子の速度がこの式に従うとして粒子法を適用すれば近似計算が可能になる。

4. Voronoi 分割に基づく粒子法

粒子法としてよく知られた手法に SPH 法 (smoothed particle hydrodynamics) や MPH 法 (moving particle semin-implicit) などがあるが, 上に述べたようにわれわれは構造保存数値解法を設計する可能性を鑑みたい。そこで粒子の位置を母点とした Voronoi 空間分割に基づいて各 Voronoi 領域ごとに定数関数として粒子の密度を定義し, その全体空間の密度分布に対して Voronoi 空間分割に対して微分作用素を一種の有限体積法的な考え方で離散化・定義する手法を採用する。具体的には, 粒子 i の位置を母点とする Voronoi 領域を Ω_i とするとき, その領域上で密度 u_i (領域上で定数) を

$$u_i \stackrel{\text{def}}{=} \frac{m}{|\Omega_i|} \quad (4)$$

と定義する。ただし, m は粒子の重さである (すべての粒子が同じ重さとしている)。

離散化した微分作用素については, たとえば以下のような定義を用いる。これらの定義を用いると, 部分積分の一般化であるいわゆる Green の定理, Gauss の定理等が離散化された形で厳密に成立し, さまざまな変分計算等が計算過程による誤差なく計算可能となり, 構造保存数値解法の設計に可能性をもたらす (根拠と詳細は本紙面では省略する)。

$$\text{grad}_d \phi|_i \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{|\Omega_i|} \sum_{j \in N_i} \phi_{(i,j)} \mathbf{n}_{ij} r_{ij}, \quad (5)$$

$$\Delta_d \phi|_i \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{|\Omega_i|} \sum_{j \in N_i} \left(\frac{\phi_j - \phi_i}{l_{ij}} \right) r_{ij}. \quad (6)$$

ただし, 母点 i に対し隣接母点の集合を N_i とし, 隣接母点までの距離を l_{ij} , 隣接母点 j との間の境界面の大き

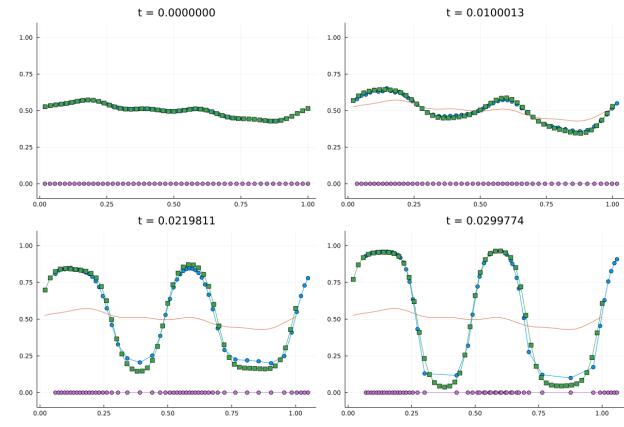


図-1 Voronoi 分割に基づく粒子法を 1 次元 Cahn–Hilliard 方程式に適用した数値解の様子

さを r_{ij} , その境界面での外向き法線ベクトルを \mathbf{n}_{ij} とする。また, Voronoi 領域上の値 ϕ_i に対し隣接母点 j との間の境界面におけるその値を $\phi_{(i,j)} = (\phi_i + \phi_j)/2$ とする。

5. Cahn–Hilliard 方程式への適用例

以上の考え方を Cahn–Hilliard 方程式に適用するならば, もっとも単純な粒子法を適用すべき式は下記のような粒子数だけの連立の常微分方程式となる (i は粒子の番号相当)。

$$\frac{dx_i}{dt} = -\frac{|\Omega_i|}{m} \left(\text{grad}_d \frac{\delta G}{\delta u} \right)_i, \quad (7)$$

$$\left(\frac{\delta G}{\delta u} \right)_i = pu_i + 4r(u_i - \frac{1}{2})^3 + q(\Delta_d u)_i, \quad (8)$$

$$u_i = \frac{m}{|\Omega_i|}. \quad (9)$$

ただし \mathbf{x}_i は粒子 i の位置であり, $p, q < 0, r > 0$ は Cahn–Hilliard 方程式のもつ実数値定数パラメータである。

(1) 1 次元問題への適用例

上に述べた粒子法 (7)–(9) を Cahn–Hilliard 方程式で空間が 1 次元の場合に適用してみた結果が図-1 である。左上からそれぞれ時間 $t = 0, t = 0.0100013, t = 0.0219811, t = 0.0299774$ における数値解である。ただし $p = -1.0, q = -0.001, r = 1.0, 0 \leq x \leq 1$ で境界条件は周期的境界条件とし, 粒子数は 50, 常微分方程式は Euler 法で解き, 計算時の時間ステップ幅は自動調整している。計算対象である粒子の位置は紫の点で, その位置によって計算される密度は青い点で示されている。同時に示されている緑の点は通常の差分法による数値解であり, 緑の点と青の点が本質的に同じ挙動であることからこの粒子法が近似計算法として成立していることがわかる。また, 粒子が少ないところ, すなわち密度の低い点での近似精度が悪いことも見て取れる (こうした欠点についてはいくつか解決方法が考えられる)。

(2) 2 次元問題への適用例

上に述べた粒子法 (7)–(9) を Cahn–Hilliard 方程式で空間が 2 次元の場合に適用してみた結果が図-2 である。

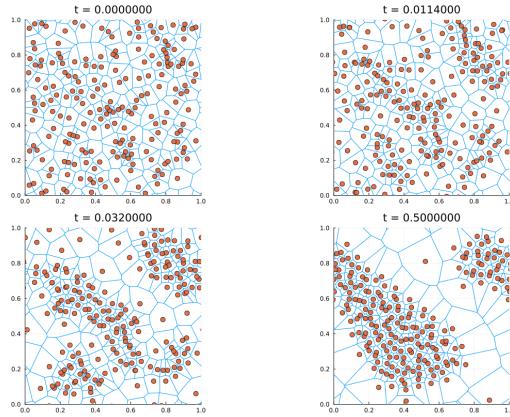


図-2 Voronoi 分割に基づく粒子法を 2 次元 Cahn–Hilliard 方程式に適用した数値解の様子

左上からそれぞれ時間 $t = 0$, $t = 0.0114$, $t = 0.0320$, $t = 0.50000$ における数値解である。ただし $p = -1.0$, $q = -0.001$, $r = 1.0$, $0 \leq x \leq 1$ で境界条件は周期的境界条件とし、粒子数は 200、常微分方程式は古典的 4 段 4 次 Runge–Kutta 法で解き、計算時の時間ステップ幅は $\Delta t = 0.00001$ である。計算対象である粒子の位置はオレンジの点で、その位置によって計算される Voronoi 領域の境界を青い線で示している。時間経過に伴い、粒子が均一に集合する「密な」大きな領域とほぼ粒子が存在しない「疎な」大きな領域に分かれることがよく見て取れ、Cahn–Hilliard 方程式が記述する相分離現象をよく再現していると言える。

6. Cahn–Hilliard 方程式のエネルギー散逸性に関する構造保存としての立式

Cahn–Hilliard 方程式は $J = \int G(u, x) dx$ で定義される全エネルギーが散逸するという性質を持ち、本来、われわれはこの散逸性を再現する粒子法を設計したい。この J に対して粒子速度は（少し面倒な式変形を経て）原理的には下記の式で書き直せるため、この概念を離散化できればわれわれの希望が叶うことになる。

$$v_i = -\frac{1}{u(x_i, t)^2 |\Omega_i|} \left(\frac{\partial J}{\partial x_i} \right). \quad (10)$$

問題は粒子の位置 x_i による全エネルギーへの影響を表す $\partial J / \partial x_i$ をどう計算するかという点であるが、これを陽に数式に落とすことは困難で、また、Voronoi 分割がアルゴリズミックにプログラムされることを考えるとプログラム過程に対してなんらかの微分を適用することも難しい。そのためこのアイディアは一見実現不可能なように思われるが、下記の機械学習による計算過程の代替が可能であれば、ニューラルネットワークの自動微分によりこの問題点の解決が見込まれる。つまり、機械学習の利用による構造保存数値解法の設計可能性が（将来的に）存在する。

7. 機械学習による時間発展近似

上に述べた粒子法 (7)–(9) は Voronoi 分割などのやや複雑な過程を含み、そのプログラミングはやや煩雑で、

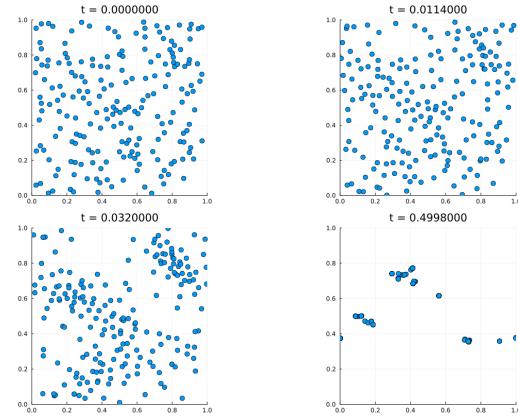


図-3 Voronoi 分割に基づく粒子法の速度計算を機械学習に任せた数値解の様子

かつ、実際の実行時間もそれなりに大きなものになってしまう。そこで、粒子の速度計算を機械学習によって代替することを考える。ただし現時点では既にいくつかの問題が予見されるため、今回は試験的な試みという位置づけになる。

構成したニューラルネットワークは 3 つの隠れ層を持つ単純な dense NN で、対象粒子の周囲 42 点の位置情報を用いてその粒子の速度を出力する。ただし、機材の都合もあり学習は十分に収束していない状況である。そのニューラルネットワークによる計算結果を示したもののが図-3 である。境界条件をはじめ、多くの条件は図-2 のときのものと同じである。図-2 と比較すると、大変興味深いことに $t = 0.03$ 程度までは十分にうまく計算ができる一方で、煩雑なプログラムの代わりに機械学習によって学習させたニューラルネットワークを時間発展作用素として代替できる可能性を示している。

この代替が真に可能であれば、先に述べたようにニューラルネットワークに対する自動微分の存在により構造保存数値解法の設計が可能になる可能性が高い。そのため、機械学習の利用は単なる計算の代替可能性だけでなく、数値解法のさらなる発展につながるものであることをこの状況は強く示唆している。

8. まとめ

Cahn–Hilliard 方程式をはじめとする保存系時間発展問題に対し、Voronoi 空間分割に基づく粒子法の適用を提案し、数値実験により確かにその適用が近似解法として有効であることを示した。また、この解法が構造保存数値解法につながるための数式を示し、それが機械学習による時間発展作用素の代替により実現可能であるであろうことを示した。

ただし、粒子法への変換により特有の近似精度の低下問題（密度が低い箇所で近似が悪い）等が見られることへの対処は必要である。また、機械学習による時間発展作用素の代替は現状では短時間での代替可能性が示された程度であり、長時間発展に耐えうる代替可能性を持つかについては未知の状態である。これらの点はこれから課題となる。