

粒子配置摂動のベイズ的解釈による 高次SPHの動的安定化

Adaptive Regularization of Higher-Order SPH via
a Bayesian Interpretation of Particle Configuration Perturbations

土岐翔洋¹⁾, 辻勲平²⁾, 井上恵天³⁾, 大竹 雄⁴⁾

Shoyo Toki, Kumpei Tsuji, Yoshitaka Inoue and Yu Ohtake

¹⁾東北大学 大学院工学研究科 土木工学専攻 修士課程

(〒 980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-06, E-mail: toki.shoyo.s5@dc.tohoku.ac.jp)

²⁾博(工) 東北大学 大学院工学研究科 土木工学専攻 助教

(〒 980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-06, E-mail: kumpei.tsuji.e1@tohoku.ac.jp)

³⁾東北大学 大学院工学研究科 土木工学専攻 修士課程

(〒 980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-06, E-mail: inoue.yoshitaka.r8@dc.tohoku.ac.jp)

⁴⁾博(工) 東北大学 大学院工学研究科 土木工学専攻 准教授

(〒 980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-06, E-mail: g.y.ohtake@gmail.com)

Numerical analysis in civil engineering often depends on expert-driven parameter tuning, adjustments to boundary conditions, and model selection. This reliance can hinder the broader adoption of computer-aided engineering (CAE). In response, this study introduces a data-driven adaptive control approach, the "proxy for process know-how," which aims to replace trial-and-error methods while preserving the theoretical foundation of numerical methods. This paper presents an adaptive regularization technique that employs a Bayesian interpretation of local perturbations in particle configurations. When applied to higher-order SPH, our method effectively addresses instability issues associated with solving linear inverse problems. The regularization parameters are dynamically adjusted based on particle distribution by extending ridge regression through Bayesian principles. Numerical experiments with the Taylor-Green vortex show improved stability and reduced error accumulation compared to fixed regularization.

Key Words : Particle method, SPH, SPH(2), Regularization, Bayesian interpretation, TG vortex

1. はじめに

粒子法や有限要素法といった数値解析では、計算対象となる微分方程式の本質的な近似(離散化)だけでなく、様々なパラメータ設定や境界条件、各種モデルの選択など、ユーザーが持つ多様なノウハウを駆使して最適解を導くのが一般的である。しかし、これらの一連の過程は専門家の技量に依存している部分が多い。この問題は、特に土や水といった複雑で不確かさを含んだ材料を扱う土木分野で顕著であり、その曖昧さがComputer-Aided Engineering (CAE) の普及を阻む一因となっている。著者らは、数値解析の準備から実行までの試行錯誤や調整作業を、データ駆動型のアプローチによって代替する「プロセス・ノウハウの代理」に取り組んでいる。この手法は、外挿問題に課題を抱えるサロゲートモデリングとは異なり、数値解析の理論や計算アルゴリズムを損なうことなく補完しつつ自動化を実現することで、解析プロセス自体を支援する点に特徴がある。本稿ではその第一歩として、ベイズ的機械学習の解釈に基づき、状況に応じた適応的な局所的な正則化手法を提案する。

近年, Asai et al.(2023) [1] によって提案された高次精度の粒子法 Smoothed Particle Hydrodynamics (高次

SPH) である SPH(2) は、粒子配置の乱れや影響域内に含まれる近傍粒子数の不足によって計算が不安定化することが報告されている (Tsuji et al. (2024) [2])。この課題は、物理量の二階導関数を求める際に解く必要がある線形逆問題において発生する特異化に起因する。従来、この特異化に対しては、行列の対角項に固定ノイズ(正則化パラメータ)を加える Ridge 回帰が広く用いられており、SPH と類似の手法である Moving Particle Semi-implicit (MPS) の研究でもその有効性が示されている (Matsunaga et al.(2022) [3])。しかし、従来手法では解析を行うユーザーの事前の判断に基づいた、経験的な固定値の正則化パラメータしか扱うことができず、その時々粒子配置に応じた適応的正則化手法の確立が求められる。そこで本研究では、この課題に対処するために、Ridge 回帰をベイズ機械学習の枠組みで解釈することで、高次粒子法における適応的な正則化手法を提示する。

2. 研究方法

(1) 勾配やラプラシアン計算のための線形逆問題

高次 SPH である SPH(2) の定式化では、物理量 ϕ の勾配 $\nabla\phi$ やラプラシアン $\nabla^2\phi$ などの微分演算に用いら

れる二階導関数は、次式に基づいて計算される。

$$\begin{bmatrix} M_{1111} & M_{1122} & M_{1112} \\ M_{2211} & M_{2222} & M_{2212} \\ M_{1211} & M_{1222} & M_{1212} \end{bmatrix}^i \begin{bmatrix} \left\langle \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_{\text{pos},1}^2} \right\rangle_{(2)}^i \\ \left\langle \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_{\text{pos},2}^2} \right\rangle_{(2)}^i \\ 2 \left\langle \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_{\text{pos},1} \partial x_{\text{pos},2}} \right\rangle_{(2)}^i \end{bmatrix} \quad (1)$$

$$= 2 \sum_{j \in \mathbb{S}^i} \left[\frac{m^j}{\rho^j} \frac{\underline{r}^{ij} \cdot \tilde{\nabla} w^{ij}}{|\underline{r}^{ij}|^4} \left\{ \phi^{ij} - \underline{r}^{ij} \cdot \langle \nabla \phi \rangle_{(1)}^i \right\} \underline{s}^{ij} \right]$$

$$M_{ijkl}^i = \sum_{j \in \mathbb{S}^i} \frac{m^j}{\rho^j} \frac{\underline{r}^{ij} \cdot \tilde{\nabla} w^{ij}}{|\underline{r}^{ij}|^4} \left\{ r_1^{ij} r_j^{ij} r_k^{ij} r_l^{ij} - (r_1^{ij} r_j^{ij}) \underline{r}^{ij} \cdot \sum_{k \in \mathbb{S}^i} \frac{m^k}{\rho^k} (r_k^{ik} r_l^{ik}) \tilde{\nabla} w^{ik} \right\} \quad (2)$$

$$\underline{s}^{ij} = \left[(r_1^{ij})^2, (r_2^{ij})^2, r_1^{ij} r_2^{ij} \right]^T \quad (3)$$

ここで、 $\langle \cdot \rangle^i$ は粒子 i に関する SPH 近似、 ϕ^{ij} は粒子間の物理量 ϕ の差 $\phi^j - \phi^i$ を表す。 w は、着目粒子 i と近傍粒子 j の相対距離 $r^{ij} = |\underline{r}^{ij}|$ に依存するカーネル関数である。 $\tilde{\nabla} w^{ik}$ はカーネル勾配 $\nabla w(r^{ij}, h)$ の修正勾配であり、 $\nabla w(r^{ij}, h) = -\frac{\partial w}{\partial r^{ij}} \frac{\underline{r}^{ij}}{r^{ij}}$ である。 \mathbb{S}^i は空間に配置された粒子 i の近傍粒子 j の集合を表す。

なお、式 (1) を以下の統計的機械学習の記法で表現することができる。

$$\underline{y} = \mathbf{H} \underline{x} \quad (4)$$

ここで、 \underline{x} は未知量ベクトルであり、物理量 ϕ の各二階導関数を表す。 \mathbf{H} は線形作用素であり、近傍粒子との相対的な位置関係のみに依存する行列であり、粒子法におけるモーメントマトリクスと呼ばれる行列である。 \underline{y} は SPH の一次精度近似による二階導関数の残差ベクトルであり、統計的機械学習においては観測量ベクトルとして位置付けられる。

(2) 線形逆問題の適応的正則化

線形逆問題のベイズの定理に基づく最適解 $\underline{x}_{\text{opt}}$ は、事前分布及び観測誤差を $\underline{x} \sim \mathcal{N}(\underline{\bar{x}}, \alpha^{-1} \mathbf{I})$ 、 $\underline{\varepsilon} \sim \mathcal{N}(0, \beta^{-1} \mathbf{I})$ と仮定すると次のように表される。

$$\underline{x}_{\text{opt}} = \underline{\bar{x}} + (\beta \mathbf{H}^T \mathbf{H} + \alpha \mathbf{I})^{-1} \mathbf{H}^T (\underline{y} - \mathbf{H} \underline{\bar{x}}) \quad (5)$$

ここで、 $\underline{\bar{x}} = 0$ の時、この問題は Ridge 回帰と呼称され、この際、正則化パラメータは $\lambda = \frac{\alpha}{\beta}$ となる (Bishop et al (2007) [4])。本研究では、粒子配置の乱れによる計算誤差 $\underline{\varepsilon}$ を、線形作用素の劣化成分 $\Delta \mathbf{H}$ による摂動として表現する。

$$\underline{y} = \mathbf{H}_0 \underline{x} + \Delta \mathbf{H} \underline{x} + \underline{\varepsilon} = \mathbf{H}_0 \underline{x} + \underline{\varepsilon}^* \quad (6)$$

ここで、 \mathbf{H}_0 は粒子の格子配置時の作用素、 $\Delta \mathbf{H}$ はその劣化成分であり、みかけの観測誤差を $\underline{\varepsilon}^* = \Delta \mathbf{H} \underline{x}$ と定義する。このとき、 $\Delta \mathbf{H}$ のフロベニウスノルム $\|\Delta \mathbf{H}\|_F$ を用いて観測誤差の期待値を推定し、観測誤差のスケールパラメータ β^{-1} に関連付ける。

$$\mathbb{E}[\underline{\varepsilon}^{*T} \underline{\varepsilon}^*] = \mathbb{E}[\underline{x}^T (\Delta \mathbf{H}^T \Delta \mathbf{H}) \underline{x}] \quad (7)$$

$$= \mathbb{E}[\|\Delta \mathbf{H}\|_F^2 \|\underline{x}\|^2] = \|\Delta \mathbf{H}\|_F^2 \cdot \mathbb{E}[\|\underline{x}\|^2] \quad (8)$$

さらに、 \underline{x} の分散が $\alpha^{-1} \mathbf{I}$ であることを利用すると、 α と β の関係は次のように整理できる。

$$\lambda = \frac{\alpha}{\beta} \approx \frac{d}{\dim(\Delta \mathbf{H})} \cdot \|\Delta \mathbf{H}\|_F^2 \quad (9)$$

ここで、 d は \underline{x} の次元を表す。なお、 α は一定値と仮定し、 β を $\Delta \mathbf{H}$ から計算することで適応的に \underline{x} を求める。

3. Taylor-Green 渦解析による数値実験

流体の流れ場に対する理論解が存在する問題として Taylor-Green 渦問題に対する提案手法の適用結果を示す。本研究における計算条件は、表-1 に示す通りである。なお、本研究では提案手法の適用性を確認するため、各種粒子再配列法 [2] は一切導入せず、流れ場によって意図的に粒子配置が乱れて SPH の計算が破綻してしまう状況を作り出した。

表-1 解析条件

解析条件	設定
解析次元	2
代表速度 U (m/s)	1.0
解析領域 L (m ²)	$[-1.0, 1.0] \times [-1.0, 1.0]$
境界条件	周期境界
動粘性係数 ν (m ² /s)	0.001
粒子間隔 Δx_{pos} (m)	0.05 (1600 個)
粒子密度 ρ (kg/m ³)	1.0
粒子代表体積 V (m ²)	Δx_{pos}^2

図-1 は正則化パラメータの空間分布、図-2 は SPH によって計算された速度勾配 ∇v_x の近似誤差を示している。それぞれの図において、左図が正則化を施さない高次 SPH (正則化パラメータ $\lambda = 0.0$)、右図が提案する適応的正則化手法を適用した際の結果を示している。図-1 は $t = 0.29\text{s}$ 時点の粒子配置と正則化パラメータ λ の空間分布を示しており、粒子配置に応じて λ が動的に決定されていることが確認できる。また、図-2 から、粒子配置に起因する局所的な誤差の増大を抑えることができていくことがわかる。

図-3 は、全粒子における速度勾配 ∇v_x 、速度ラプラシアン $\nabla^2 v_x$ の理論と SPH による計算値の残差の時系列変化を示している。上段が ∇v_x 、下段が $\nabla^2 v_x$ の結果である。上段を比べると、提案手法 (適応的正則化手法) は、従来の SPH(2) とよりも効果的に誤差の急増が抑制されていることがわかる。この傾向は、圧力勾配

∇P でも同様であり、勾配計算において誤差の急増が発生しにくいことを示している。一方で、 $\nabla^2 v_x$ ではいくつかの粒子で誤差が漸増する傾向が見られる。

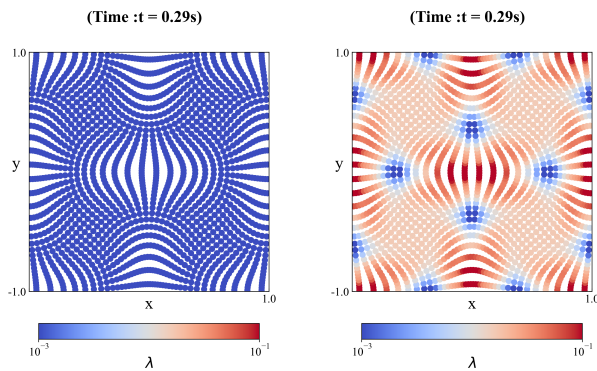


図-1 λ 空間分布 (左図：SPH，右図：提案手法)

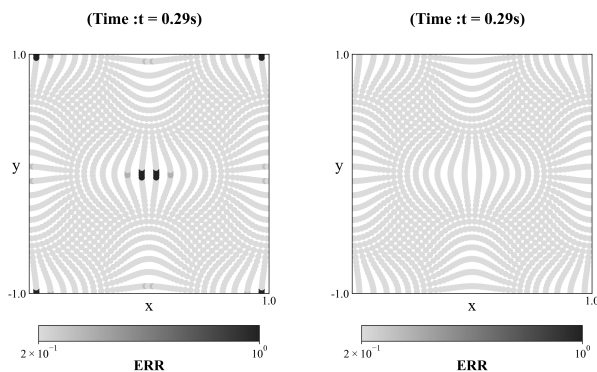


図-2 ∇v_x 近似残差空間分布 (左図：SPH，右図：提案手法)

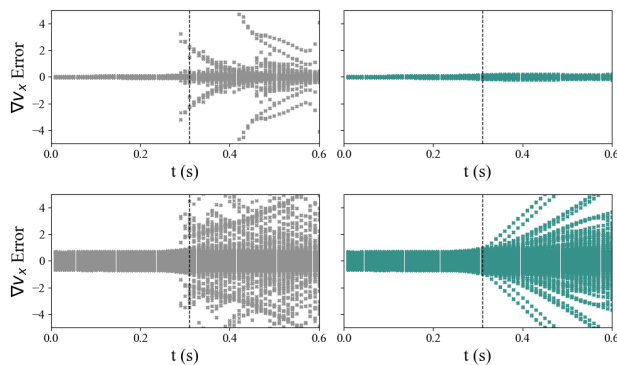


図-3 計算誤差の時系列 (上図: $ERR_{\nabla v_x}$, 下図: $ERR_{\nabla^2 v_x}$; 左図: SPH(2), 右図: 提案手法 (適応的))

図-4 は、提案手法を用いて推定された線形逆問題の解 \underline{x} の各要素における計算誤差を示している。提案手法によって、粒子配置の摂動によって引き起こされる計算誤差の爆発的な増加をある程度抑制できているものの、その効果は完全ではないことが確認できる。ラプラシアン の導出においては、高次の導関数を用いるため、線形逆問題に基づく近似計算の誤差が支配的となり、誤差が漸増していると考えられる。一方で、勾配の導出においては線形逆問題の精度がボトルネック

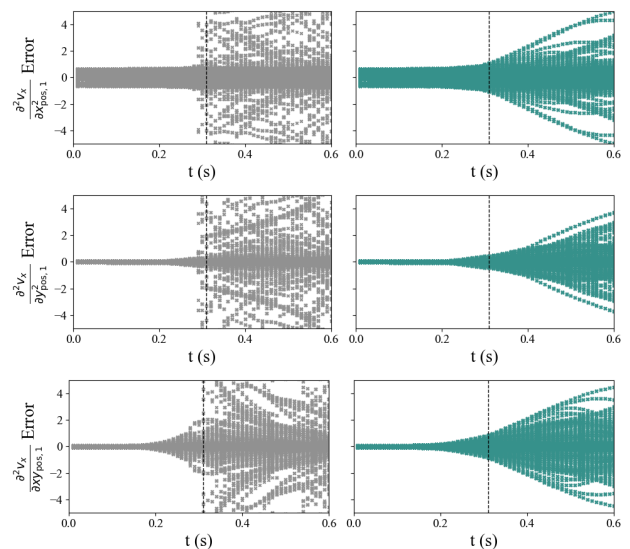


図-4 二階導関数 \underline{x} 各要素の計算誤差 (左図：SPH(2)，右図: 提案手法 (適応的))

とはならない程度に抑えることができていると考えられる。提案手法によって計算の安定性が向上していることは確かであるが、高次微分計算においてはさらなる誤差抑制手法が求められる。

線形逆問題の計算が安定しない要因として、粒子配置の変化により各方向における離散精度が低下し、それに伴って観測量 y も劣化することが挙げられる。現状用いている正則化手法では、観測誤差の共分散を考慮することや、粒子配置の変化に伴う回転を考慮することで正則化の精度を向上させる手法も考えられる。しかし、これらの手法では根本的な解決には至らない可能性が高い。

4. 結論と今後の課題

本研究では、高次 SPH における線形逆問題の不安定性を改善するため、ベイズの定理に基づいて粒子配置の乱れによる線形作用素の劣化程度をリアルタイムに評価する方法を提案した。提案手法を Taylor-Green 渦の数値シミュレーションに適用し、従来の固定パラメータによる正則化と比較した。結果として、速度や圧力の勾配の推定誤差の増大を抑制し、安定した計算が可能であることを確認した。しかし、線形逆問題本来の安定性改善には未だ至っておらず高次導関数を直接利用して計算するラプラシアンに対しては十分に効果が発揮されないことがわかった。今後は、1) コヒーレント構造を考慮した擬似粒子の生成による正則化、2) 深層学習や強化学習を組み合わせた適応的なパラメータ調整手法についても検討し、数値解析手法の更なる汎化性の向上に取り組む予定である。

付録: 状態空間モデルによる記述 式 (5) は式 (4) を状態空間モデルで記述することにより導出される。状態空間モデルは、状態方程式と観測方程式の 2 つの関数で構成、時間ステップごとの未知量の遷移を表現することができる。これにより従来 SPH(2) では考慮されていなかった過去の時間ステップの履歴も反映すること

が可能となる。

状態方程式は、粒子 i の状態量ベクトル \underline{x}_k が次のステップ \underline{x}_{k+1} に遷移する過程を記述するものである。

$$\underline{x}_{k+1} = \mathcal{F}(\underline{x}_k) + \underline{w}_k \quad (10)$$

ここで、 $\mathcal{F}(\cdot)$, \underline{w}_k はそれぞれ粒子 i の状態遷移を記述する作用素, 粒子 i におけるプロセスノイズである。本稿では、ローカルレベルモデルを採用し、 $\mathcal{F}(\cdot)$ を線形な単位行列 \mathbf{I} とする。

観測方程式は、粒子 i の状態量ベクトル \underline{x}_k を観測量ベクトル $\underline{y}_k^{(i)}$ に関連付けるものである。

$$\underline{y}_k = \mathcal{H}(\underline{x}_k) + \underline{\varepsilon}_k \quad (11)$$

ここで、 $\mathcal{H}(\cdot)$, $\underline{\varepsilon}_k$ はそれぞれ粒子 i の観測を記述する非線形作用素, 観測におけるノイズである。 $\mathcal{H}(\cdot)$ は、粒子配置に基づいて線形作用素 \mathbf{H}_k として定義される。

また、プロセスノイズ \underline{w} , 観測ノイズ $\underline{\varepsilon}$ の共分散をそれぞれ $\alpha^{-1}\mathbf{I}$, $\beta^{-1}\mathbf{I}$ と仮定している。ここで α , β はそれぞれ事前情報の精度, モデルの精度と定義することができる。

参考文献

- [1] Asai, M., Fujioka, S., Saeki, Y., Morikawa, D. S., and Tsuji, K.: A class of second-derivatives in the smoothed particle hydrodynamics with 2nd-order accuracy and its application to incompressible flow simulations, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol.415, pp.116203, 2023.
- [2] Tsuji, K., Fujioka, S., Morikawa, D. S., and Asai, M.: A reliable sph(2) formulation for darcy–forchheimer–brinkman equation using a density-based particle shifting in the ale description, *Computational Particle Mechanics*, Nov 2024.
- [3] Matsunaga, T. and Koshizuka, S.: Stabilized lsmps method for complex free-surface flow simulation, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol.389, pp.114416, 2022.
- [4] Bishop, C. M.: *Pattern recognition and machine learning*, 2007.