計算工学講演会論文集 Vol. 30 (2025 年 6 月)
日本計算工学会

最小二乗系のメッシュフリー法を高精度化する２，３の方法の比較：マルチモーメント法、コンパクト差分法、再帰的最小二乗法

Some methods to improve the accuracy of the least-squares meshfree method: Multi-moment, compact, and recursive methods

川田佳史 1) 2)
Yoshifumi Kawada

1)博 (理) 東京大学大学院理学系研究科（〒 113-0033 東京都文京区本郷 7-3-1, E-mail: ykawada@g.ecc.u-tokyo.ac.jp)
2)Quemix Inc.（〒 103-0027 東京都中央区日本橋 2-11-2 太陽生命日本橋ビル 16 階）

Meshfree methods are useful for calculating problems involving large deformations, brakeup and failure, and multiple phase changes. These methods are based on the least-squares to a group of distributed calculation points. In usual, the accuracy is given such that the highest derivative has the first order accuracy, and it improves by one order as the degree of derivative decreases by one step. This study introduces some methods to improve this class of methods that go beyond the above limitation. These are: the multi-moment method, which takes the first-order derivative as the dependent variable; the compact scheme, which obtains an implicit relation for higher-order derivatives; and the recursive method, which uses the first-order derivative resursively to obtain higher-order derivatives. We discuss the improvement and computational costs of some of these methods.

Key Words : *Meshfree method, multi-moment method, compact difference method, recursive difference method*

1. はじめに

工学や地球科学の問題には，不規則な形状を伴い，かつ分離･融合を繰り返すような現象が頻出する [1,2]．不規則な系に対する数値計算を行う場合，規則的な有限差分法の格子を局所的に細かく区切ることで対応できる場合もあるが，通常は有限要素法を用いて形状に合わせた格子を作ることが多いであろう．大変形に関しては，有限要素法などの格子法で扱うこともできるが，分離・融合を伴うような系を格子法で扱うのは一般には容易ではない．

不規則形状かつ大変形を伴う系では，そもそも格子を持たないメッシュフリー系の方法が好まれる．メッシュフリー法は，基本的には計算点を動かさないメッシュフリー差分法 [3] と，計算点の運動を陽に扱う粒子法 [4] にわけることができる (中間的な方法として，粒子を動かした後に元の位置の情報を補間して粒子を再配置するような方法も考えられる; [5])．これらのメッシュフリー法では，各点の関数値の Taylor 展開をもとに，これを最小二乗法を適用することで各点の微分係数を構成することが基本となる．なお，初期の粒子法は必ずしも Taylor 展開に基づいているわけではないので，必ずしも精度は担保されないことに注意 [6,7]．粒子法が最小二乗法によって高精度化される過程については [8,9] に詳しいので参照されたい．

小論では，最小二乗差分法を用いたメッシュフリー系の方法を高精度化するいくつかの取り組みを紹介する．まず基本的な最小二乗差分法の解説を行い，その後にこれを高精度化するための (表題に掲げた) いくつかの試みを紹介する．なお，本稿を通して，式の展開は空間 1 次元の場合に限定する．これを多次元の場合に応用することは容易であると思われる．

2. 最小二乗差分法

点 i における物理量の値とその微分係数を，この点の物理量 f_i および周りに散らばった複数の点 j の物理量 f_j を用いて補間することを考える．これを行うためには，各点 j での物理量を i のまわりで評価する必要がある．具体的には以下のような Taylor 展開を行う．

$$f_j = f_i + \Delta x_j f_{x,i} + \frac{\Delta x_j^2}{2} f_{xx,i} + \frac{\Delta x_j^3}{6} f_{xxx,i} + \cdots \quad (1)$$

このとき残差は以下のように与えられる．

$$R_j \equiv -f_j + f_i + \Delta x_j f_{x,i} + \frac{\Delta x_j^2}{2} f_{xx,i} + \frac{\Delta x_j^3}{6} f_{xxx,i} + \cdots \quad (2)$$

ここで $f_{x\cdots x,i}$ は点 i における微分係数 (x の個数が微分の階数である)，Δx_j は点 i と点 j の間の距離である．

最小二乗差分法では，各点の残差の重み付き二乗和を最小化する．

$$J = \frac{1}{2}\Sigma_j w_j R_j^2 \rightarrow min. \quad (3)$$

ここで重み関数 w_j は距離に依存した減少関数で，距離 0 で 1，ある距離 (典型的な粒子間距離の 3 倍程度を取

ることが多い) で 0 になるものを選択する．3 次や 5 次のスプライン関数を用いることが多い．目的関数の最小化を求めるには，求めたい微分係数に対する停留条件を計算すればよい．これらをまとめて $|a\rangle$ と表すと

$$\frac{\partial J}{\partial |a\rangle} = 0 \tag{4}$$

となる．これらを解いた結果は連立一次方程式にまとめることができる．

$$A\,|a\rangle = |b\rangle \tag{5}$$

ここで $|\cdot\rangle$ は縦ベクトル，また $\langle\cdot|$ はその転置すなわち横ベクトルを表すものとする (いわゆる Dirac 記法)．$|a\rangle$, A, $|b\rangle$ の具体的な形については以下の節で与える．

以下，2 種類の流儀を考える [10]．ひとつめは $|a\rangle$ をそのまま点 i における微分係数を考える流儀 (通称 diffuse derivative)，ふたつめは $|a\rangle$ を形状関数と見て，これと基底関数との内積で曲面を構成する流儀 (full derivative) である．Diffuse derivative についてはさらに，計算点で与えられた情報を拘束するか否かにより 2 つの方法に分けられる (以下では，その名称は [11] に従う)．なおスペースの関係で，例示は低精度の場合について行っている箇所がある．

(1)　Type A

Diffuse derivative のひとつは，最小二乗法で求める曲面が f_i を通ることを要請する場合である．このとき停留条件を具体的に書くと，0 階微分を含まない

$$\frac{\partial J}{\partial f_{x,i}} = 0,\ \frac{\partial J}{\partial f_{xx,i}} = 0,\ \cdots \tag{6}$$

となる．2 階微分まで取ったときの連立一次方程式の構成要素は ($|a\rangle$ も 0 階微分を含まず)

$$|a\rangle = (\ f_{x,i}\ \ f_{xx,i}\ )^T \tag{7}$$

$$A = \begin{pmatrix} \sum_j w_j & \sum_j w_j \Delta x_j \\ \sum_j w_j \Delta x_j & \sum_j w_j \Delta x_j^2 \end{pmatrix} \tag{8}$$

$$|b\rangle = \begin{pmatrix} \sum_j w_j \Delta x_j (x_j - x_i) \\ \sum_j w_j \dfrac{\Delta x_j^2}{2} (x_j - x_i) \end{pmatrix} \tag{9}$$

となる．ここで j に関する和には i が含まれないことは，右辺のベクトル $|b\rangle$ の表式から明らかであろう (もし含めても自動的に無効化される)．

(2)　Type B

もうひとつの diffuse derivative は値も含めて補間する場合である．停留条件は 0 階微分を含む

$$\frac{\partial J}{\partial f_i} = 0,\ \frac{\partial J}{\partial f_{x,i}} = 0,\ \frac{\partial J}{\partial f_{xx,i}} = 0,\ \cdots \tag{10}$$

であり，2 階微分まで取ったときの連立一次方程式の構成要素は (こちらも今度は $|a\rangle$ は 0 次微分を含み)

$$|a\rangle = (\ f_i\ \ f_{x,i}\ \ f_{xx,i}\ )^T \tag{11}$$

$$A = \begin{pmatrix} \sum_j w_j & \sum_j w_j \Delta x_j & \sum_j w_j \dfrac{\Delta x_j^2}{2} \\ \sum_j w_j \Delta x_j & \sum_j w_j \Delta x_j^2 & \sum_j w_j \dfrac{\Delta x_j^3}{2} \\ \sum_j w_j \dfrac{\Delta x_j^2}{2} & \sum_j w_j \dfrac{\Delta x_j^3}{2} & \sum_j w_j \dfrac{\Delta x_j^4}{4} \end{pmatrix} \tag{12}$$

$$|b\rangle = \begin{pmatrix} \sum_j w_j f_j \\ \sum_j w_j \Delta x_j f_j \\ \sum_j w_j \dfrac{\Delta x_j^2}{2} f_j \end{pmatrix} \tag{13}$$

となる．最小二乗法の行列のサイズが先ほどより 1 つ大きくなっていることに注意．また，ここでの j に関する和には i (に相当する点) も含まれることにも注意．

ばらつきの大きいデータを補間する場合は，ある点を通ることを拘束する Type A よりも，これを要請しない Type B の方が良好であることが予想される．一方，計算量は行列サイズの小さい Type A が優れる．

(3)　もう一つの最小二乗法あるいは full derivative

最後に full derivative [12,13] について説明を行う．これは，値に関しても回帰に含める Type B の変種と捉えることも可能である．実際，目的関数は Type B と同じである (しかしその意味付けは異なる)．ここでは full derivative の流儀に従って記号を変える．まず目的関数は次のように書ける．

$$\begin{aligned} J &= \frac{1}{2} \sum_I w_I \left\{ \sum_i p_i(x_I) a_i(x) - u_I \right\}^2 \\ &= \{\langle a|\,P - \langle u|\}^T\, W(x)\, \{P\,|a\rangle - |u\rangle\} \to min. \end{aligned} \tag{14}$$

ここで基底ベクトル $|p\rangle$ および形状ベクトル $|a\rangle$

$$|p\rangle = \begin{pmatrix} 1 & x & x^2 & \cdots \end{pmatrix}^T \tag{15}$$

$$|a\rangle = (\ a_1\ \ a_2\ \ \cdots\ )^T \tag{16}$$

データベクトル $|u\rangle$

$$|u\rangle = (\ u_1\ \ u_2\ \ \cdots\ )^T \tag{17}$$

および行列

$$P = (\ \langle p_1|\ \ \langle p_2|\ \ \cdots\ )^T \tag{18}$$

$$W = \begin{pmatrix} w_1 & & \\ & w_2 & \\ & & \ddots \end{pmatrix} \tag{19}$$

を定義した (W は対角行列)．目的関数の停留条件より

$$A\,|a\rangle = B\,|u\rangle \tag{20}$$

あるいはこの連立一次方程式を解いた

$$|a\rangle = A^{-1} B\,|u\rangle \tag{21}$$

を得る．ここで

$$A = P^T W P \tag{22}$$

$$B = P^T W \tag{23}$$

と定義した，行列 A, B は重み関数 w_j として x 依存性を持つ．ここまでは diffuse derivative と同じである．

Full derivative では，任意の位置の関数をいま求めた形状関数 $|a(x)\rangle$ と，関数を評価する場所での基底関数 $\langle p(x)|$ との内積で評価する．すなわち

$$\begin{aligned} u(x) &= \langle p(x) | a \rangle \\ &= \left\langle p(x) \middle| A^{-1} B \middle| u \right\rangle \\ &= \langle \phi(x) | u \rangle \end{aligned} \tag{24}$$

と与えられる (最初と最後の行で基底が異なる)．ここで

$$\langle \phi(x) | \equiv \langle p(x) | A^{-1} B \tag{25}$$

と定義した．Full derivative における $|a(x)\rangle$ の解釈は，これを x の関数ではなく直接 i での微分係数と考える diffuse derivative とは決定的に異なる．

以上を用いると，full derivative の 1 階微分は

$$\begin{aligned} \frac{du}{dx} &= \left\langle \frac{d\phi(x)}{dx} \middle| u \right\rangle \\ &= \left\langle \frac{dp}{dx} \middle| A^{-1} B \middle| u \right\rangle + \left\langle p \middle| \frac{d}{dx}\left(A^{-1} B\right) \middle| u \right\rangle \end{aligned} \tag{26}$$

と与えられる．第 2 項目の演算に必要な逆行列の微分は

$$(A_{,x})^{-1} = -A^{-1} A_{,x} A^{-1} \tag{27}$$

と計算できる [12].

2 階以上の高階の微分係数に対しても，同様の演算を用いて求めることができる．ただし，微分階数の増加とともに微分を行う箇所が指数関数的に増加するため，高階微分を行う場合の計算量は多い．また，x での微分を行うのは形状関数 p および重み関数 w に対してであるから，これらが次数の低い関数である場合，そもそも高階の微分係数を精度良く求めることはできない．

Diffuse derivative は，full derivative の微分の最初の項だけを考慮したことに相当する．この観点からは，diffuse derivative は不完全なのではないかと考えることもできるだろう．しかし，diffuse derivative と full derivative のどちらが優れるかについては未だ議論がある [10,14].

(4) ここまでのまとめ

ここまで紹介したいずれの手法では，$|a\rangle$ が含む最も高い階数の微分係数が空間 1 次精度となる．たとえば，上の例では 2 階微分までを考慮したので，2 階微分が 1 次精度，1 階微分が 2 次精度となる (計算点の配置が規則的な場合，精度が上がることもある．有限差分法でよく用いられる規則的な格子ではそのようなことが起こる）．しかし，実用的にはもっと高い精度がほしい．有限差分法の枠組みでは，マルチモーメント法やコンパクト差分など，通常の差分法を超える精度を持つ手法の開発が進んでいる．メッシュフリー法でも，同様の高精度の手法が存在する．以下ではこれらのうちのいくつかについて考察を行う．

3. 最小二乗法の高精度化

以下，マルチモーメント最小二乗差分法およびコンパクト差分法については diffuse derivative の定式化を採用する．マルチモーメントについては full derivative の定式化も可能である．一方，再帰的方法については full derivative の定式化を採用する．

(1) マルチモーメント最小二乗差分法

マルチモーメント法 [15] は，物理量 f_i に加えてその空間微分 $f_{x,i}$ を従属変数に取る方法である．従属変数が増えたため，解く式の数も増える．たとえば熱伝導方程式

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa T_{xx} \tag{28}$$

(κ は熱拡散係数) をマルチモーメント法で解く場合，この式に加え，その空間微分

$$\frac{\partial T_x}{\partial t} = \kappa T_{xxx} \tag{29}$$

も解く必要がある．ここで左辺の T, T_x は従属変数そのものである，右辺の T_{xx}, T_{xxx} は分布した従属変数の値を用いて最小二乗法的に決定する量である．なお，複数段のマルチモーメント法を考えることもできる [16]. この場合は，段数とともに精度は上がるが，高階の微分係数を従属変数として取ることになり，解く式の数も増えることになる．以下では従属変数として 1 階微分までを取ることにする．

マルチモーメント法をメッシュフリー法や粒子法に適用した例はいくつかある [17,19]. マルチモーメント法をメッシュフリー法に適用する場合，計算点 i の周りでの Taylor 展開を，点 j での関数値 f_j に加えて，空間微分 $f_{x,j}$ に対しても行う．

$$\begin{aligned} f_j = f_i + \Delta x_j f_{x,i} + \frac{\Delta x_j^2}{2} f_{xx,i} + \frac{\Delta x_j^2}{6} f_{xxx,i} \\ + \frac{\Delta x_j^2}{24} f_{xxxx,i} + O(\Delta x^5) \end{aligned} \tag{30}$$

$$\begin{aligned} f_{x,j} = f_{x,i} + \Delta x_{xx,i} f_{x,i} + \frac{\Delta x_j^2}{2} f_{xxx,i} + \frac{\Delta x_j^3}{6} f_{xxxx,i} \\ + O(\Delta x^4) \end{aligned} \tag{31}$$

このあとの処方箋は通常の最小二乗法と同じである．すなわち残差

$$\begin{aligned} R_j = f_i + \Delta x_j f_{x,i} + \frac{\Delta x_j^2}{2} f_{xx,i} + \frac{\Delta x_j^2}{6} f_{xxx,i} \\ + \frac{\Delta x_j^2}{24} f_{xxxx,i} - f_j \end{aligned} \tag{32}$$

$$R_{x,j} = f_{x,i} + \Delta x_{xx,i} f_{x,i} + \frac{\Delta x_j^2}{2} f_{xxx,i} + \frac{\Delta x_j^3}{6} f_{xxxx,i} - f_{x,j} \tag{33}$$

の重み付き二乗和を目的関数に取り，これを最小化する．

$$J = \frac{1}{2} \Sigma_j w_j R_j^2 + \frac{1}{2} \Sigma_j w_j R_{x,j}^2 \rightarrow min. \tag{34}$$

この場合，2 階微分は 3 次精度，3 階微分は 2 次精度，4 階微分は 1 次精度になることが期待できる．なお，ここでは，２つの項の重みを共通にしたが，これが最適かどうかは自明ではない．

ここでは Type A に相当する場合 (回帰が着目点の値と勾配を取ることを要請) を考える．Type B に相当する場合についても同様に構成することができる．目的関数の停留条件 (0 階微分および 1 階微分は含まない)

$$\frac{\partial J}{\partial f_{xx,i}} = 0,\ \frac{\partial J}{\partial f_{xxx,i}} = 0,\ \frac{\partial J}{\partial f_{xxxx,i}} = 0,\ \cdots \tag{35}$$

により，連立一次方程式を得る．その結果は次のようになる．

$$(A_0 + A_1)\,|a\rangle = |b_0\rangle + |b_1\rangle \tag{36}$$

$$|a\rangle = (\ f_{xx,i}\ \ f_{xxx,i}\ \ f_{xxxx,i}\ )^T \tag{37}$$

$$A_0 = \begin{pmatrix} \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^2}{4} & \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^3}{12} & \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^4}{48} \\ \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^3}{12} & \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^4}{36} & \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^5}{144} \\ \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^4}{48} & \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^5}{144} & \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^6}{576} \end{pmatrix} \tag{38}$$

$$A_1 = \begin{pmatrix} \sum_j w_j \Delta x_j^2 & \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^3}{2} & \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^4}{6} \\ \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^3}{2} & \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^4}{4} & \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^5}{12} \\ \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^4}{6} & \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^5}{12} & \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^6}{36} \end{pmatrix} \tag{39}$$

$$|b_0\rangle = \begin{pmatrix} \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^2}{2}(f_j - f_i - \Delta x_j f_{x,i}) \\ \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^2}{6}(f_j - f_i - \Delta x_j f_{x,i}) \\ \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^2}{24}(f_j - f_i - \Delta x_j f_{x,i}) \end{pmatrix} \tag{40}$$

$$|b_1\rangle = \begin{pmatrix} \sum_j w_j (f_{x,j} - f_{x,i}) \\ \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^2}{2}(f_{x,j} - f_{x,i}) \\ \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^3}{6}(f_{x,j} - f_{x,i}) \end{pmatrix} \tag{41}$$

(2) 最小二乗コンパクト差分

コンパクト差分 [20] は，高次精度の微分係数を陰的に求めるための方法である．ここで陰的とは，ある点の微分係数が，隣接した点の微分係数との線形結合として与えられるという意味である (通常の陽的な方法ではある点の微分係数は直接指定できる)．以下ではコンパクト差分をメッシュフリー法に適用した Tamai and Koshizuka (2014) [11] の紹介を行う．コンパクトなメッシュフリー法については，他にも方程式に回帰させる実装例もある [21]．なお，オリジナルのコンパクト差分 [20] は 1 階微分係数のみを未知数とする方法である．ここで紹介する方法は，1 階微分以上の高階の微分係数も未知数とする結合コンパクト差分に近い [22]．

Tamai and Koshizuka (2014) [11] のコンパクト差分では，必要なだけの微分係数に関する Taylor 展開を求め，ここから不要な微分係数を削除することで，高階の微分係数に関する陰的な表現を得る．この陰的な表現からある場所の微分係数を得るには，一般にグローバルな行列方程式を解く必要がある (不動点法によるローカルな収束計算で対応できる可能性もある)．この点は，ここまでに紹介した方法とは大きく異なっている．

以下，式の展開を行う．点 j における物理量とその 1 階および 2 階の微分係数を，i 点に関して Taylor 展開する．考慮した微分階数の数だけ精度が上がると考えて良い (低精度な項から順番に削除できるので)．

$$\begin{aligned} f_j = f_i + \Delta x_j f_{x,i} + \frac{\Delta x_j^2}{2} f_{xx,i} + \frac{\Delta x_j^3}{6} f_{xxx,i} \\ + \frac{\Delta x_j^3}{24} f_{xxxx,i} + O(\Delta x^5) \end{aligned} \tag{42}$$

$$\begin{aligned} f_{x,j} = f_{x,i} + \Delta x_j f_{xx,i} + \frac{\Delta x_j^2}{2} f_{xxx,i} + \frac{\Delta x_j^3}{6} f_{xxxx,i} \\ + O(\Delta x^4) \end{aligned} \tag{43}$$

$$f_{xx,j} = f_{xx,i} + \Delta x_j f_{xxx,i} + \frac{\Delta x_j^2}{2} f_{xxxx,i} + O(\Delta x^3) \tag{44}$$

値 (0 階微分) の Taylor 展開の式から 3 階および 4 階の微分係数を消去することを考える．このためには，各微分階数の Taylor 展開の線形結合を求め，対応する微分係数に関する係数を 0 と置けば良い．すなわち

$$\begin{aligned} & f_j + c_1 f_{x,j} + c_2 f_{xx,j} \\ =& f_i + \Delta x_j (1 + c_1) f_{x,i} + \Delta x_j^2 \left(\frac{1}{2} + c_1 + c_2\right) f_{x,i} \\ &+ \Delta x_j^3 \left(\frac{1}{6} + \frac{c_1}{2} + c_2\right) f_{xxx,i} \\ &+ \Delta x_j^4 \left(\frac{1}{24} + \frac{c_1}{6} + \frac{c_2}{2}\right) f_{xxxx,i} + O(\Delta x^5) \end{aligned} \tag{45}$$

において $c_1 = -1/2, c_2 = 1/12$ とすればよい．その結果，残差として以下が得られる．

$$\begin{aligned} R_j \equiv & f_i + \frac{1}{2}\Delta x_j f_{x,i} + \frac{1}{12}\Delta x_j^2 f_{xx,i} \\ & - \left(f_j - \frac{1}{2}\Delta x_j f_{x,j} + \frac{1}{12}\Delta x_j^2 f_{xx,j}\right) \\ = & O(\Delta x^5) \end{aligned} \tag{46}$$

ここから，1 階微分は 4 次精度，2 階微分は 3 次精度になると推察される．

目的関数としていつものように残差の重み付き二乗和を取り，これを最小化する．

$$J = \frac{1}{2}\sum_j w_j R_j^2 \rightarrow min. \tag{47}$$

ここでは Type B (回帰曲面を値で拘束しない) を採用する．Type A に関してもほぼ同様に式を構成できる．目的関数の停留条件より，以下を得る．

$$A\,|a\rangle = |b\rangle \tag{48}$$

ここで

$$|a\rangle = \left(\ f_i \ \ f_{x,i} \ \ f_{xx,i}\ \right)^T \tag{49}$$

$$A = \begin{pmatrix} \sum_j w_j & \sum_j w_j \frac{\Delta x_j}{2} & \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^2}{12} \\ \sum_j w_j \frac{\Delta x_j}{2} & \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^2}{4} & \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^3}{24} \\ \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^2}{12} & \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^3}{24} & \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^4}{144} \end{pmatrix} \tag{50}$$

$$|b\rangle = \begin{pmatrix} \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^2}{2}\left(f_j - \frac{\Delta x_j}{2} f_{x,j} + \frac{\Delta x_j^2}{12} f_{xx,j}\right) \\ \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^2}{6}\left(f_j - \frac{\Delta x_j}{2} f_{x,j} + \frac{\Delta x_j^2}{12} f_{xx,j}\right) \\ \sum_j w_j \frac{\Delta x_j^2}{24}\left(f_j - \frac{\Delta x_j}{2} f_{x,j} + \frac{\Delta x_j^2}{12} f_{xx,j}\right) \end{pmatrix} \tag{51}$$

これまでの方法では連立一次方程式の右辺は既知であった (陽的) が，コンパクト差分では未知 (陰的) となる．そこで，1 階以上の微分係数を左辺に移し，すべての i についての (グローバルな) 行列を組み上げる．未知数の数 (行列の大きさ) は，求めるべき微分係数の数と粒子の総数との掛け算である．影響半径が限られているため行列は疎，計算点間の相互の影響は同じであるため行列は対称である．

(3)　再帰的最小二乗法

再帰的な方法 [17,18] は，ある関数の高階微分を求めるために，低次の微分を繰り返し適用する方法である．有限差分法でも「1 階微分の 1 階微分」を 2 階微分と捉えることもできるが，その一般化である．既往の報告によると，高階の微分係数についても高い精度が実現されている．以下の説明は主に [17] に基づく．

通常の full derivative で微分係数を求めるには，

$$\frac{du}{dx} = \left\langle \frac{dp}{dx} \middle| A^{-1}B \middle| u \right\rangle + \left\langle p \middle| \frac{d}{dx}\left(A^{-1}B\right) \middle| u \right\rangle \tag{52}$$

$$\frac{d^2u}{dx^2} = \left\langle \frac{d^2p}{dx^2} \middle| A^{-1}B \middle| u \right\rangle + \left\langle \frac{dp}{dx} \middle| \frac{d}{dx}\left(A^{-1}B\right) \middle| u \right\rangle + \left\langle p \middle| \frac{d^2}{dx^2}\left(A^{-1}B\right) \middle| u \right\rangle \tag{53}$$

のように計算量が増大してしまうのが問題なのであった．加えて，基底関数や重み関数は有限の次数の関数であることから，何回も微分を行えるわけではないことも問題である．

再帰的方法では，full derivative の形状関数が幾何学的情報のみを有し，物理量の情報を含まないことに着目する．たとえば full derivative の 1 階微分はいかなる関数に対しても適用可能，つまり

$$\frac{d(\cdot)}{dx} = \left\langle \frac{dp}{dx} \middle| A^{-1}B \middle| (\cdot) \right\rangle + \left\langle p \middle| \frac{d}{dx}\left(A^{-1}B\right) \middle| (\cdot) \right\rangle \tag{54}$$

の $(\cdot)$ の部分にはどのような関数を入れることができる (ただし，すべての計算点で値が揃っているとする)．したがって，通常の方法で 1 階微分を求めた後，2 階微分以降を求める際には 1 階微分を

$$\begin{aligned} \frac{d^2u}{dx^2} &= \frac{d}{dx}\left(\frac{du}{dx}\right) \\ &= \left\langle \frac{dp}{dx} \middle| A^{-1}B \middle| \frac{du}{dx} \right\rangle + \left\langle p \middle| \frac{d}{dx}\left(A^{-1}B\right) \middle| \frac{du}{dx} \right\rangle \end{aligned} \tag{55}$$

$$\frac{d^3u}{dx^3} = \left\langle \frac{dp}{dx} \middle| A^{-1}B \middle| \frac{d^2u}{dx^2} \right\rangle + \left\langle p \middle| \frac{d}{dx}\left(A^{-1}B\right) \middle| \frac{d^2u}{dx^2} \right\rangle \tag{56}$$

のように繰り返し適用すればよい．この手法では，微分の階数が増加しても項の数が増えることもない．ただし，微分の階数が増えるごとに，影響領域はベキで広がる．例えば影響半径 (重み関数が 0 でない値を持つ半径) を r_c とすると，1 階微分を求める際にはこの範囲の点の情報が含まれる．2 階微分の影響範囲は $2r_c$，3 階微分の影響範囲は $4r_c$，$\cdots$ となる．この性質から，境界条件についての取り扱いが難しくなる可能性がある．

なお，[18] によると再帰的最小二乗法の計算精度は l_2 ノルムに関して通常の最小二乗法に比べて 1 段高い．これは [17] の計算結果とも整合的であるようだ．

(4)　以上の「合せ技」についてのコメント

以上の方法は，いずれも単体で高精度化を実現する方法である．これらは，単独で使用するだけでなく，組み合わせて用いることもできる．例えば，マルチモーメント法と再帰的方法を組み合わせたメッシュフリー法はすでに実装されている [17]．コンパクト差分をマルチモーメント法と組み合わせることも可能であり，規則格子の有限体積法としての実装例はある [23]．ただし，これをメッシュフリー法に適用した例はまだないようである．さらに，実用性はともかく，これらすべてを組み込んだ方法も，(報告はないが) 可能であろう．

4.　議論

ここまで議論してきたいくつかの方法について，1 階微分を 4 次精度，2 階微分を 3 次精度で求める場合について，簡単な計算量の比較を行う．まず通常の最小二乗法では，4 階微分まで係数 $|a\rangle$ に含める必要がある．値を拘束する Type A の場合，1 階から 4 階までの微分係数を考慮した 4×4 の連立一次方程式を各点で構成すれば良い．一方，値を拘束しない Type B の場合，0 階から 4 階までの微分係数を考慮した 5×5 の連立一次方程式を各計算点で構成する必要がある．

マルチモーメント法では 1 階微分は従属変数である．そこで，Type A では，2 階から 4 階までの微分係数を考慮した 3×3 の連立一次方程式を各点で構成すれば良い．連立 1 次方程式は小さくなるが，適用する方程式

の数は (1 階微分が従属変数なので) 1 つ増える．一方 Type B では，5×5 の連立一次方程式を構成する必要がある (もちろん方程式の数は 1 つ増える)．このため，Type B では計算量は増える要素しかない．

コンパクト差分では，高次の微分係数は計算する必要がない．値の Taylor 展開で 4 階微分まで考慮した式に，1 階・2 階微分に対する Taylor 展開を用いて，3 階・4 階微分を消去する．この結果，Type A では 1 階と 2 階微分に対する 2×2 の連立一次方程式が，Type B では 0 階から 2 階微分に対する 3×3 の連立一次方程式が，各点で構成される (なお，[11] は，Type A は行列が特異になる場合があるとのことで使用を推奨していない)．行列サイズは他の方法より小さい．しかしこれらは周囲の点の寄与を含む陰的な表現であるため，各点での微分係数を得るにはグローバルな連立一次方程式を解く必要がある．

再帰的最小二乗差分では，通常の最小二乗差分に比べて 1 段程度高い精度が得られている [17]．この方法は full derivative を用いる (diffuse derivative の Type B に相当する) ため，行列サイズとして 4×4 の連立一次方程式を各計算点で構成すれば良いことになる (通常の最小二乗法に比べて 1 つサイズが小さい)．ただし，diffuse derivative の最小二乗法を基準にすると，full derivative の 1 階微分に関する演算が余分に必要となる．

5. 結論

本稿では，最小二乗法を用いたメッシュフリー差分法の高精度化法について概観した．マルチモーメント法は従属変数として値に加えてその微分係数を取るものである．コンパクト差分は，複数の階数の Taylor 展開の線形結合を取ることにより，高精度の微分係数を陰的に得るものである．一方，再帰的差分法は 1 階微分を繰り返し適用する手法である．これらの方法はいずれも有効であるが，適材適所がありうまく使い分けていくことが肝要であると思われる．

なお，本稿では粒子法に特有の計算点を動かすことは扱わなかったが，今回議論した内容は，メッシュフリー差分法・粒子法のいずれにも成り立つことに注意されたい．

謝辞: 本講演は科学研究費 22K03765 の支援を受けた．

参考文献

[1] Ferziger, J. H. et al.: Computational methods for fluid dynamics, Springer, 2019.
[2] Gerya, T.: Introduction to numerical geodynamic modelling, Cambridge University Press, 2019.
[3] Liszka, T. and Orkisz, J.: The finite difference method at arbitrary irregular grids and its application in applied mechanics, *Comput. Struct.*, vol.11(1-2), pp.83-95, 1980.
[4] 浅井光輝: 明解粒子法: SPH, MPS, DEM の理論と実践, 丸善出版, 2022.
[5] Hu, F. et al.: An ALE particle method using upwind interpolation, *Comput. Fluids*, vol.145, pp.21-36, 2017.
[6] Gingold, R. A. and Monaghan, J. J.: Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars, *Mon. Not. Royal Astron. Soc.*, vol.181(3), pp.375-389, 1977.
[7] Koshizuka, S. and Oka, Y.: Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid, *Nucl. Sci. Eng.*, vol.123(3), pp.421-434, 1996.
[8] 菖蒲迫健介ほか: 最小二乗法を用いた SPH 法の高精度化について, 計算工学講演会論文集, Vol.29, pp.809-814, 2024.
[9] 菖蒲迫健介ほか: 最小二乗 SPH 法の打切り誤差に基づく古典的 SPH 法の離散化誤差の検証, 計算工学講演会論文集, Vol.30, 2025.
[10] Breitkopf, P. et al.: An introduction to moving least squares meshfree methods, *Rev. Euro. Elem.*, vol.11(7-8), pp.825-867, 2002.
[11] Tamai, T. and Koshizuka, S.: Least squares moving particle semi-implicit method: An arbitrary high order accurate meshfree Lagrangian approach for incompressible flow with free surfaces, *Comput. Part. Mech.*, vol.1, pp.277-305, 2014.
[12] Belytschko, T.: Element-free Galerkin methods, *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, vol.37(2), pp.229-256, 1994.
[13] Belytschko, T. et al.: Meshless methods: an overview and recent developments, *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, vol.139(1-4), pp.3-47, 1996.
[14] Mirzaei, D. et al: On generalized moving least squares and diffuse derivatives, *IMA J. Numer. Anal.*, vol.32(3), pp.983-1000, 2012.
[15] Aoki, T.: Interpolated differential operator (IDO) scheme for solving partial differential equations, *Comput Phys. Comm.*, vol.102(1-3), pp.132-146, 1997.
[16] Utsumi, T. and Kimura, H.: Solutions of partial differential equations with the CIP-BS method, *JSME Int. J. Ser. B*, vol.47(4), pp.761-767, 2004.
[17] 村山真理ほか: メッシュフリー法近似による高階微分の算出と精度について, 計算力学講演会講演論文集, vol.2008.21, pp.201-202, 2008.
[18] Wan, J. and Li, X. : Analysis of a superconvergent recursive moving least squares approximation, *Appl. Math. Lett.*, vool.133, no.108223, 2022.
[19] 川田佳史: 粒子法のマルチモーメント化あるいはマルチモーメント法のラグランジュ化の試み, 計算工学講演会論文集, Vol.29, pp.767-772, 2024.
[20] Lele, S. K.: Compact finite difference schemes with spectral-like resolution, *J. Comput. Phys.*, vol.103(1), pp.16-42, 1992.
[21] Trask, N. et al.: Compact moving least squares: an optimization framework for generating high-order compact meshless discretizations, *J. Comput. Phys.*, vol.326, pp.596-611, 2016.
[22] Chu, P. C. and Fan, C.: A three-point combined compact difference scheme, *J. Comput. Phys.*, vol.140(2), pp.370-399, 1998.
[23] 小野寺直幸: コンパクト差分を用いた高次精度マルチ・モーメント法の開発, 日本計算工学会論文集, vol.2010, no.20100019, 2010.