

ボロノイ分割による有限体積法と粒子法のハイブリッド 手法による偏微分方程式の数値解析

Hybrid method of finite volume method and particle method using Voronoi decomposition

降幡 大介¹⁾
Daisuke Furihata

¹⁾博(工)大阪大学 D3 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)

In our research on particle methods for solving partial differential equations beyond fluid dynamics, specifically the Cahn-Hilliard equation and the Allen-Cahn equation, we have discovered a potential for creating hybrid methods that combine particle methods with finite volume methods. This concept is grounded in finite volume methods that utilize Voronoi decomposition, where the positions of the particles serve as generating points. We aim to present this idea through several practical examples.

Key Words : particle method, finite volume method, hybrid method, Voronoi decomposition, Cahn–Hilliard equation, Allen-Cahn equation

1. はじめに

現実問題のモデル方程式の多くは質量保存性・局所組成保存性や全エネルギー減少性などの特徴的な(ときに大域的な)数学的性質を持つ。こうした性質を保存する構造保存数値解法国内外で一定程度の発展を遂げており、例えば国際研究集会 SciCADE ではこのトピックセッションが毎回開催され多くの研究者が参加する。構造保存数値解法は誤差の収束性や解の安定性などの性質が優れていることが多く、微積分などの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る。適切な数学的背景によるこうした利点がある代わり、差分法などに基づくこれらの手法は計算量が大きく、実用上はこれが難点となる。そこで異なるアプローチとして、構造保存への可能性を睨みながら偏微分方程式問題への粒子法の適用を考える。幸い、保存系時間発展問題に対しては、連続の式を適用して問題を書き換え、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が可能となっている。

そこで、さらにこの考え方をおしすすめ、非保存系偏微分方程式、たとえば Allen–Cahn 方程式などに上の粒子法適用の手法を拡張することを試みた。そしてその過程で、粒子法と有限体積法のハイブリッドともいすべき数値解析法が数学的に自然に考えられること、さらにそのハイブリッド比率を自由に調整可能なことを見出した。背景には、具体的な実現例としての粒子の位置を生成点とするボロノイ分割による有限体積法がある。この手法について、実例を交えて紹介したい。

2. 既知: 保存系時間発展問題への粒子法適用

(1) 連続の式を用いての保存系問題の変形

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 に関する適当なめらかな関数で、 $\delta G / \delta u$ 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。

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

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。

(2) 粒子位置に基づく Voronoi 分割による密度近似

上のアイディアに基づいて粒子法スキームを設計するには、さらに (3) 右辺の $\operatorname{grad}(\delta G / \delta u)$ 部分を離散化する必要がある。そのためには結局は微分作用素を近似的に離散化する必要がある。そのための粒子法としてよく知られた手法には 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 領域ごとに区分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。

(3) 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 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。

a) 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

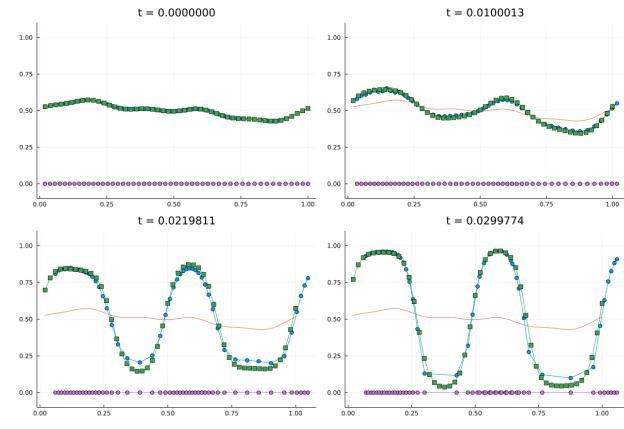


図-1 Voronoi 分割に基づく粒子法を 1 次元 Cahn–Hilliard 方程式に適用した数値解の様子

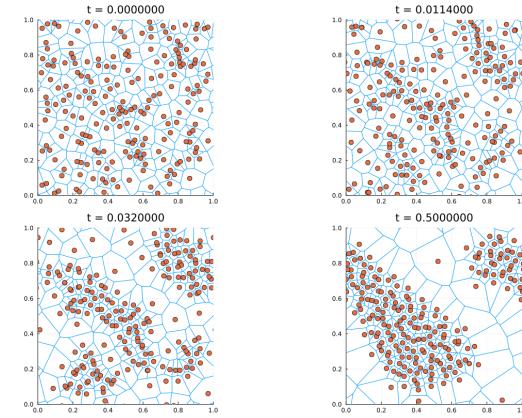


図-2 Voronoi 分割に基づく粒子法を 2 次元 Cahn–Hilliard 方程式に適用した数値解の様子

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。緑の点は通常差分法による数値解であり、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、粒子が少なく密度の低い点での近似精度が悪いこともよくわかる。

b) 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。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, q, r は上の問題と同じ、 $0 \leq x \leq 1$ 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 Runge–Kutta 法で解き、計算時間ステップ幅は $\Delta t = 0.00001$ である。粒子位置はオレンジの点で、その位置を generator とする Voronoi 領域境界を青い線で示している。時間経過に伴い粒子が集合する密な大領域と疎な大領域に分かれることが見てとれ、Cahn–Hilliard 方程式による相分離現象をよく再現している。

3. 前節の手法の非保存系への拡張

(1) 拡張方法のアイディア

前節の手法は(計算に伴う丸め誤差を除いて)離散的な計算の範囲で純粋に変形計算ができるため Green の定理や Gauss の定理等が離散化された形で厳密に成立し、その数学的性質の解析や、それを通じたより適切なスキームの設計などに多くの可能性を秘めている。しかしそのままでは連続の式が成り立つ保存系にしか適用できないという、そもそもにおける大きな欠点がある。

そこで、本手法を拡張することを考える。そのための一番単純な方法は、連続の式の $\text{div}(uv)$ に相当する部分には前節の手法を適用し、そうでない部分には「粒子の重さが変化する」方程式を割り当てる、という方法である。一般に粒子法では粒子一つあたりの重さに相当するパラメータは時間で変化しないように設計するが、そこを逆手に取る形になる。

単純な方程式を対象モデルとして、少し具体的にこのアイディアを紹介しよう。まず、たとえば Allen–Cahn 方程式のように、次のような形をしている偏微分方程式を対象として考える(ちなみにこの例は単純だが、より一般化することは容易い)。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = P(u) + c\Delta u \quad (10)$$

ただし、 $P(u)$ は u の多項式で、 c は定数である。見てわかるようにこの方程式の解には組成保存性ではなく、よって連続の式は成り立たない。そこで、 Δu を含む項が連続の式を引き受けると考えて、方程式全体が次の“密度 u –質量 m –速度 v ”方程式をなしているとして設計する。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{\Delta\Omega} \frac{dm}{dt} - \text{div}(uv). \quad (11)$$

ただし、 $\Delta\Omega$ はその粒子の支配領域の大きさで、たとえば前節の $|\Omega_i|$ として実装することになる。すると最終的な粒子法-有限体積法 スキームは次のように整理される。

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = -\left(\frac{c}{u}\right)\text{grad}(u), \\ \frac{dm}{dt} = P(u)\Delta\Omega. \end{cases} \quad (12)$$

この連立方程式の内容を見ると、第一式が粒子法を、第二式が有限体積法となっており、まさに偏微分方程式に対するハイブリッド解法となっていることが見て取れる。数値解析の手法上、とくにこの第二式の存在は意味が大きい。というのも、この式の存在により粒子の「重さ」が自然に変化し粒子の位置の変化が極端になることを防いでくれるため、「密度が低い領域で粒子がまばらにしか存在しなくなってしまうために数値解の精度が大変悪化する」という粒子法の欠点を大変自然に改善できるからである。

また、上の例では数学的に自然な対応として $c\Delta u$ 部分に $-\text{div}(uv)$ を対応させて立式したが、この対応関係は強制されるものではない。つまり、方程式のどの項を粒子法に対応させるかは自由度があり、その比率によってこのハイブリッド解法が「どれくらい純粋な粒子法に近いのか遠いのか」をスキーム設計者が自由に調整できるのである。

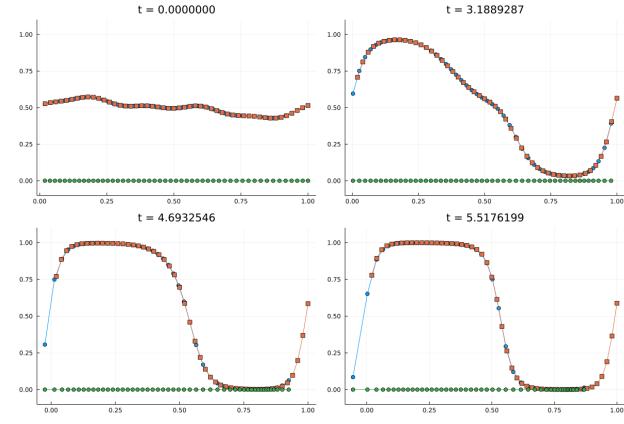


図-3 ハイブリッド解法を 1 次元 Allen–Cahn 方程式に適用した数値解の様子

(2) 1 次元問題への適用例

上に述べたハイブリッド解法 (12) を Allen–Cahn 方程式で空間が 1 次元の場合に適用してみた結果が図-3 である。左上からそれぞれ時間 $t = 0$, $t = 0.31889287$, $t = 4.6932546$, $t = 5.5176199$ における数値解である。ただし $P(u) = u - u^3$, $c = 0.001$ としたもとの Allen–Cahn 方程式の u (これは $u \in [-1, 1]$ の範囲を動く) をスケール変換して $[0, 1]$ の範囲を動くようにした方程式が対象で、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 Runge–Kutta 法で解いている(時間刻み幅は自動調整している)。計算対象である粒子の位置は緑の点で、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オレンジの点は通常の差分法による数値解であり、青の点とオレンジ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、緑の点の配置をみると粒子の配置にあまり極端な差がなく、「密度が低いため粒子配置が極度にまばらになる」という問題を回避できていることが見てとれる。

4. まとめ

Allen–Cahn 方程式をはじめとする非保存系時間発展問題に対しても適用可能な Voronoi 空間分割に基づく粒子法を提案し(これがハイブリッド解法)、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。

ただし、これらの解法が構造保存数値解法に具体的につながる方法論の構築は未だである。そのためのアイディア(機械学習により時間発展作用素を代替する)は以前より示しているが、その実現可能性や実用性については未知の状況である。これらの点はこれからの課題となる。