

平成 30 年 6 月 19 日現在

機関番号：32682

研究種目：若手研究(A)

研究期間：2015～2017

課題番号：15H05303

研究課題名(和文) 粒子法流体解析における統計モデル導入による新しい知識発見原理の構築

研究課題名(英文) Construction of novel principle for knowledge discovery in particle methods for fluid dynamics using statistical models

研究代表者

中村 和幸 (NAKAMURA, Kazuyuki)

明治大学・総合数理学部・専任准教授

研究者番号：40462171

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,700,000円

研究成果の概要(和文)：粒子法流体解析では、流体を多粒子で表現して分析する。ここに現れる誤差に対して、予測誤差推定手法構築、水槽実験計測、統計的誤差評価の実施を通じて、分布で与えるための枠組みと原理を構築した。特に、粒子系におけるマクロパラメータを表現する誤差モデルとしての有限正規-様混合分布の有効性や、誤差分布のモデルとして裾の重い分布を用いることの有効性が確認できた。また、鍵となる物理量を理解しやすい形で確認し、分析内容の検証に役立てることができる可視化結果、粒子法と関係する確率的セルオートマトンモデルにおける誤差評価結果や局所ノイズ鋭敏性と粒子法解析との関係性についての成果を得た。

研究成果の概要(英文)：In the particle methods for fluid analysis, fluids are represented by many particles and analyzed. In this study, we constructed the framework and principles for the error of the particle methods in the form of distribution through construction of estimation method of prediction errors, measurements of water tank experiments, and evaluation of statistical error. Especially, we obtained the effectiveness of bounded Gaussian and uniform mixture distribution for error model of macroscopic parameters and the effectiveness of the use of heavy-tailed distributions for error distribution. In addition, we obtained visualization results in which we can easily confirm key physical quantities and check the validity of the analysis. We also obtained evaluation results of errors in stochastic cellular automata model and relationship between local noise sensitivity and particle methods analysis.

研究分野：統計科学

キーワード：粒子法 データ同化 統計モデル

1. 研究開始当初の背景

流体のシミュレーションは多くの分野で必要とされ、実際多数のシミュレーション計算が行われている。その多くの場合には、「オイラー型離散化手法」が広く使われてきた。これは、挙動を再現する空間を格子状に分割して固定し、その固定された各格子における物理量を、流体の支配方程式を用いて計算することでシミュレートする方法である。オイラー型離散化手法は、流体解析の多くの分野で有効な手法である。その一方で、津波遡上などの現象や、孤立した流体群が発生するような複雑流体現象の再現には、オイラー型離散化手法には困難な部分がある。

粒子法は、このようなオイラー型離散化手法の欠点をカバーできる手法として使われてきた。流体現象をラグランジュ型離散化手法で再現する手法であり、流体を粒子で、流れを粒子の運動で近似しながら、物理量を粒子上で計算する手法である。オイラー型を凌ぐ定性的な現象再現が可能である。

一方で、粒子法は定性的には合うが数値誤差が大きいこと、特に圧力振動と呼ばれるオイラー型離散化手法にはない問題がありこれを解決する必要がある。誤差評価研究も近年進んできているものの、応用実績が少ないことなど、定量的な予測と発見の道具としては課題がある。

この問題の原因は、ある領域に含まれる粒子数が変動して誤差原因となること、その特性を精密に議論するのが難しいことにあり、粒子法がラグランジュ型離散化であることに由来する。その結果、誤差要因をノルムで確定的誤差として評価すると、他の誤差より大きくなってしまい、実用的でなくなってしまう。そこで、誤差を内在する確率ノイズとして統計モデル化し、予測誤差を分布で与える枠組みを構築することで、問題を克服・解決できるのではないかと着想し、そのための要素研究を進めることとした。

2. 研究の目的

本研究では、粒子法に現れる誤差について統計モデル化し、予測誤差を分布で与えられるような枠組みを構築して評価を行うという、粒子法では従来に無い視点を与えることを目指す。特に、実験計測・網羅的数値実験に基づくラグランジュ型離散化誤差のモデル化、さらにシミュレーションと計測を統合するデータ同化を進める。これらにより、粒子法を諸学問分野で実用可能な定量的予測の道具としていくことを目的とする。

3. 研究の方法

シミュレーションと計測を融合するデータ同化とそれに基づく予測誤差推定手法構築、水槽実験計測、シミュレーションの統計的誤差評価の3つを軸として研究を進めることとした。これらを総合することで、粒子法における定量的予測のための枠組みと原

理を構築する。

4. 研究成果

(1) 予測誤差推定手法構築

1次元粒子相互作用モデル

1次元円環上を流れる粒子が相互作用しながら移動するような多粒子系において、その系全体を制御するようなマクロパラメータを推定する手法について検討した。適用したモデルは最適速度(Optimal Velocity; OV)モデルである。OVモデルは、円環上を流れるように運動する粒子について、進行方向に対して前にある粒子との距離に依存して加速度が決まる数理モデルであり、その距離が短くなると、減速するようになっている。本モデルは、もともとは渋滞を表現するのに用いられたモデルであるが、1次元粒子の流体としての現象と同様の性質を持つことから、本検討におけるモデルとして適切と考えられ、採用した。このモデルでは、粒子間の相互作用の度合いを与えるパラメータが1次元のパラメータとして与えられる。

そこで、粒子間相互作用の度合いを与えるパラメータについて、初期状態で異なるパラメータが与えられた場合に適切に推定できるか、また、その後に変化した場合に、正しく追従できるかについて検討した。

さらに、パラメータの推定のために、自己組織化モデルを導入した。自己組織化モデルにおけるシステムノイズには、有限正規一樣混合(Bounded Gaussian and Uniform Mixture; BGUM)分布を使用した場合と、単純な正規分布を使用した場合を設定した。粒子法においても、相互作用パラメータなどのパラメータにおいては、可能な値の範囲を決まることから、有限な分布を使うことの一様性が示唆されるためである。

図1は、上記の設定のもとでの推定結果を表している。初期パラメータから推定パラメータまでは、BGUM分布を使用する方が正規分布を用いるよりも速く推定できていることがわかった。さらに、パラメータ値が変化したあとでも、BGUM分布を用いるほうが速いことがわかった。

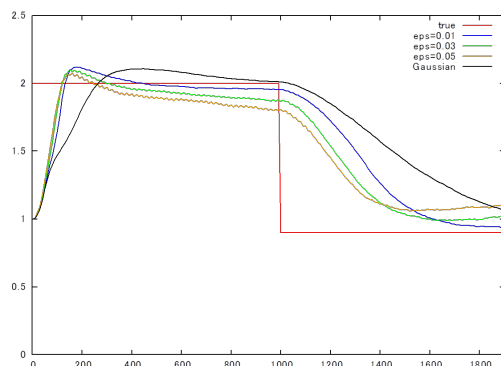


図1 マクロパラメータ推定結果。赤が真のパラメータ、黒が正規分布による推定、青・緑・橙がBGUM(混合比変動)による推定(雑誌論文より引用)

また表1に示す通り、正規分布を用いた場合に比べ、BGUM分布を用いる方が安定的かつ速く推定できていることが確認できた。さらに混合比を変更することで、到達までの速さと推定の安定性の間のトレードオフをコントロールできることがわかった。

表1 BGUMと正規分布の場合の比較。初期状態から真のパラメータまでに到達するまでの時間と、到達後のRMSE値を記載している。BGUM分布のカッコ内は混合比を表す（雑誌論文より引用）

分布	到達時間	RMSE
BGUM(0.01)	132	0.050
BGUM(0.03)	121	0.081
BGUM(0.05)	119	0.123
正規	264	0.071

以上のことから、粒子法流体解析におけるデータ同化実施に際して、パラメータ推定のための自己組織化システムノイズ設定を行う場合に、BGUM分布が有効と考えられることが確認できた。

3次元粒子法

既存の3次元粒子法の計算プログラムを用いて、3次元水塊の壁あり・なしの両プログラム設定における誤差の基礎データ収集を実施した。

また、このプログラムと組み合わせるための尤度計算プログラムを作成した。これにより、粒子法流体解析において、粒子位置の変更が難しいような状態修正が困難なシミュレーションであっても、粒子フィルタの一種であるSISフィルタによるデータ同化適用が可能となった。その一方で、実際のデータ同化適用に際しては、観測モデルの設定による結果への影響が大きく、この点に課題があることもわかった。今後さらに数値実験を進めていく。

(2)水槽実験計測

本科研における基礎的な水槽実験計測においては、PIV計測によるデータの取得、PIV解析、ならびに統計情報の集計を行った。データの取得においては、簡易的なダムブレイク実験計測装置を構築し、レーザー計測を実施した。また、得られたデータに対しては、PIV解析による流速ベクトルと、流速のばらつきを得た。得られた結果をもとに、前項の尤度計算における、誤差モデル構築につなげることができた。今後さらに、時空間統計の観点からさらに検討を進めていく。

(3)統計的誤差評価

誤差分布の理論的評価

誤差の生成構造に注目し、その分布に関する理論的検討を行った。粒子法においては、粒子間の相互作用について、距離の関数とするが、そのサポートを有限とするか、あるいは

一定以上の領域ではごく小さくなるような関数を用いる。また、その相互作用は距離が離れるほど弱くなるように設定される。

一方で、粒子法においては、粒子の体積排除効果がある。そのため、一定の領域内に存在する粒子数には限度がある。

以上のことを踏まえ、1粒子にかかる相互作用について有限独立サンプルの和であると仮定し、そのもとでの粒子法における物理量の変化がどのような分布に従うかについて検討した。その結果、変動の誤差分布が典型的な正規分布となる場合がある他、条件や物理量によっては、t分布のようなより裾の重い分布となる可能性も得た。今後、より精密な評価を進めていく。

3次元可視化プログラムの構築

誤差評価の結果も含む粒子法の結果を検討するうえで、結果可視化は重要な役割を持っている。そこで、3次元粒子法流体解析のデータ同化結果に対する新たな可視化プログラムを作成した。本プログラムでは、粒子を単に球で表現するのではなく、向き付きの錘や色による表現によって置き換えたり追加したりすることで、粒子の流速ベクトルやその他物理量について理解しやすい表現とした。これにより、3次元粒子法のデータ同化結果に対して、鍵となる流速ベクトルや粒子密度を理解しやすい形で確認し、結果の検証に役立てることができるようツールを新たに作成できた。

(4)その他

本科研での研究を進める中で、当初予定にはなかったが、粒子法の分析の基礎となる研究についての発展研究が2件進んだ。確率的セルオートマトンモデルにおけるモデルパラメータのセンシティブリティ評価について、ならびに粒子法データ同化と局所ノイズ鋭敏性の関係についての検討である。

確率的セルオートマトンモデルのパラメータセンシティブリティ評価

確率的セルオートマトンモデルにおけるパラメータ評価の有効性の評価では、1次元上の確率的セルオートマトンモデルを考え、移動確率と一定距離あたりセル数を変動させてながら、特定の移動パターンを真の結果としたときの誤差についての検討を行った。その結果、移動確率に対して2次ポテンシャルの形の誤差構造をもつこと、さらに、一定距離あたりセル数に対しても変動することが確認できた。

粒子法データ同化と局所ノイズ鋭敏性の関係

本研究の発展として、動的システムにおける不確かさと粒子法における誤差との関係、ならびにそれに基づくモデリング原理構築についての検討を行った。粒子法に現れる物理量の誤差は、固定点で評価した場合に、時

変分散の正規分布として表現できる場合があることが確認できている。これは、時間変動する状態に依存した不確かさとして表現できる例となっており、本来的にはシステムモデルに含まれる。一方、データ同化においては観測モデルとして表現される。このことから、粒子法のデータ同化においては、短時間の誤差の識別性が関係していること、さらに動的システム理解の方法である局所ノイズ鋭敏性と関係があるのではないかと、ということの示唆を得た。今後、さらに一般の場合も含めてデータ同化と局所ノイズ鋭敏性の関係について検討していく。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計3件)

Yutaka Kono, Kazuyuki Nakamura, Prediction System of Subway Traffic Flow and Appropriate Parameters Shifting, Proceedings of the 48th ISCTE International Symposium on Stochastic Systems Theory and Its Applications, 査読有, 2017, pp.168-173, DOI: 10.5687/sss.2017.168.

Kazuyuki Nakamura, Yutaka Kono, Fast and stable estimation of macroscopic parameters in particle systems by data Assimilation, Proceedings of the 47th ISCTE International Symposium on Stochastic Systems Theory and Its Applications, 査読有, 2016, pp.132-136, DOI: 10.5687/sss.2016.132.

Nina Sviridova, Kazuyuki Nakamura, Local noise sensitivity: Insight into the noise effect on chaotic dynamics, Chaos, 査読有, Vol. 26, 123102, DOI: 10.1063/1.4970322.

〔学会発表〕(計8件)

中村和幸, ベイズ型時系列・時空間解析による自然現象・社会現象の理解, 愛媛大学談話会, 2017.

中村和幸, 動的システムにおける不確かさとデータサイエンス, 日本行動計量学会第45回大会, 2017.

Kazuyuki Nakamura, Yutaka Kono, Noriho Fujioka, Application of data assimilation to particle simulation and point process, EcoSta2017, 2017.

中村和幸, データサイエンスにおける数理と実問題との関係ならびに応用, スーパーセンシングフォーラム(招待講演), 2017.

中村和幸, アンサンブル型データ同化におけるノイズ項モデリングとマクロパラメー

タ推定への応用, 第6回理研・京大合同データ同化研究会(招待講演), 2016.

中村和幸, 河野穰, 粒子系物理モデルのマクロパラメータ推定と統計モデリング, 2016年度統計関連学会連合大会, 2016.

中村和幸, 静的・動的システムにおける不確かさの定量化, 第22回信頼性設計技術WS & 第35回最適設計研究会(招待講演), 2015.

中村和幸, 粒子法流体解析における誤差統計モデルについて, 2015年度統計関連学会連合大会, 2015.

〔図書〕(計1件)

中村和幸, 東京図書, 基幹講座 数学 統計学, 2017, 224.

6. 研究組織

(1) 研究代表者

中村 和幸 (NAKAMURA, Kazuyuki)

明治大学・総合数理学部・専任准教授

研究者番号: 40462171