

令和元年6月20日現在

機関番号：17102

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2015～2018

課題番号：15K05002

研究課題名(和文) 粒子法の数値解析へ向けた基盤技術の整備

研究課題名(英文) Developments of the Fundamental Technology for Numerical Analysis of Particle Methods

研究代表者

田上 大助 (TAGAMI, Daisuke)

九州大学・マス・フォア・インダストリ研究所・准教授

研究者番号：40315122

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)：粒子法を移流が卓越した流れ問題に適用した場合、時間の経過に伴い移流速度に応じて移動する粒子が、対象となる空間内で偏在し、計算手法の不安定化や計算精度の悪化を引き起こす。本研究課題は、粒子の偏在に伴う困難を解消するために、物質微分の近似に特性曲線法を適用した粒子法の提案と、その数値解析を行った。流れ問題に対する粒子法の時間積分各ステップに、特性曲線法を半陰的に導入した。これにより、各時刻ステップにおいて、粒子法で用いる補間作用素や近似微分作用素の打ち切り誤差評価に対する十分条件を満たすように粒子を再配置することが可能となり、提案した数値計算手法の誤差評価を得た。

研究成果の学術的意義や社会的意義

粒子法はその特徴から、対象となる流体領域が時間経過に伴い変化する移動境界問題の取扱いが容易なため、近年、産業における製品設計や、防災シミュレーションなどの場面で盛んに用いられている数値計算手法の一つである。しかしながら、有限差分法や有限要素法などの数値計算手法と比較すると、その数学的観点からの基盤理論の整備がなされているとは言い難い。そこで本研究課題の成果により、粒子法を用いた数値計算結果に対する信頼性や計算手法の効率性を高めることができれば、粒子法を適用する例えば津波遡上数値計算を基にしたより良い避難経路策定に繋がる可能性がある、などの社会的意義が将来的に期待できる。

研究成果の概要(英文)：Mathematical analysis of a characteristic generalized particle method for flow problems is considered. The particle methods approximate material derivative with the Lagrange coordinate, and move the particles by following flow fields. However, in general, the particle motion cause particle distributions unevenness and numerical schemes instability.

In this research, to overcome this difficulty, a semi-implicit characteristic method has been introduced into an approximation of the material derivative. By introducing the characteristic method, we can distribute particles at every time steps satisfying the regularity condition without following the motion of particles.

Moreover, when we are required to refer physical values at the previous time step, we just evaluate interpolants of physical values at the previous time step. Then, energy inequalities and error estimates of the semi-implicit characteristic generalized particle method for convection-diffusion problems are established.

研究分野：数値解析学

キーワード：粒子法 特性曲線法 流れ問題 誤差評価

1. 研究開始当初の背景

粒子法は偏微分方程式に対する数値計算手法の一つであり、近年では 1970 年代に Gingold–Monaghan [A] で提案された Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) 法や、1990 年代に Koshizuka ら [B] で提案された Moving Particle Semi-implicit (MPS) 法が頻繁に利用され、宇宙物理・土工学・機械工学などに現れる様々な問題へ、その適用範囲が広がられている。

粒子法では、考える領域内に粒子と呼ばれる点を複数配置し、それぞれの粒子に対応した有界な台を持つ参照関数の結合によって、考える問題の対象となる関数を近似する。近似に用いる粒子間の連結性は、粒子間の距離と参照関数の台を定める影響半径のみに依存するため、例えば差分法や有限要素法などの数値計算手法において必要となり、その作成に計算時間を要する格子やメッシュを予め準備しなくて良い、という特徴を持つ。この特徴は、時間に依存して領域形状が変化する移動境界問題の数値計算において大きな利点となることから、近年は津波遡上のような移動境界問題に対する数値計算が、粒子法を用いて行われている（例えば Rogers–Dalrymple [C] 参照）。

このように粒子法はその特徴を活かして（本研究課題開始当初も、終了を迎えた現時点も）適用範囲を拡大しているにも関わらず、研究代表者も研究成果を挙げている差分法や有限要素法（例えば Tabata–Tagami [D]）など他の数値計算手法と比較すると、粒子法に対する数学的視点からの研究成果は我々の知る限り非常に少なかった；例えば、Mas–Gallic–Raviart [E] や Ben Moussa [F] で 1 階双曲型偏微分方程式に対する SPH 法の誤差評価が、石島–木村 [G] で MPS 法で用いる近似勾配作用素の打ち切り誤差評価が、それぞれ行われた。しかしこれらの誤差評価では、計算コストがかかり過ぎて現実的ではない設定が使われていたり、そもそも対象とする問題が限定されていたりして、その成果を現実問題の数値計算へ適用するには困難が多かった。

したがって、粒子法の数値解析を行い、現実問題でも適用が可能な数学理論の整備を行うことによって、粒子法を用いた数値計算結果の正当性を数学の視点から担保することは、非常に重要な課題であった。

2. 研究の目的

“研究開発当初の背景”欄で述べた通り、本研究課題では、他の数値計算手法 —有限差分法や有限要素法— と比較して遅れている、偏微分方程式に対する粒子法の数学的な基盤の整備を目的とした。その第一段階として、固定領域上における放物型偏微分方程式に対する粒子法の数学的正当化、および正当化した手法に基づくプログラムの開発・実装と現実問題への適用、の 2 点を、本研究課題の目的とした。なお、この目的は、粒子法を用いた数値計算の信頼性を数学の視点から高めていくという最終目的の第一歩でもある。

3. 研究の方法

(1) 粒子法で用いる、補間作用素や近似微分作用素の打ち切り誤差評価:

“研究開始当初の背景”欄でも述べたように、粒子法では、近似に用いる粒子間の連結性は、粒子間の距離と参照関数の台を定める影響半径のみに依存する。しかしながらこの特徴は離散化パラメータの選択の自由度を増やすため、精度の良い安定な数値計算を行うための適切な離散化パラメータの設定が困難になる、という欠点を生む。与えられた粒子配置に基づく Voronoi 分割を利用することで、研究代表者らはこの欠点の解決を図った。またこの結果により、次に行う半陰的な特性曲線一般化粒子法の導入を行う際、時間積分の各時刻ステップにおいて適切な粒子再配置が可能と

なった。

(2) 時間積分の進展に伴う粒子偏在を避けるための、半陰的な特性曲線法の導入:

粒子法の持つ特徴の一つに、近似に用いる粒子を流体粒子と見做し得られた近似流れ場に従って粒子を移動させることで、Lagrange 座標を用いて直接的に物質微分の近似を行う点がある。この特徴は、特に移流が支配的な流れ場の数値計算に粒子法を用いる場合に、時間積分の進展に伴って対象とする領域内部で粒子の偏在を招き、計算手法の数値的不安定や精度悪化を招くという欠点も併せ持っている。この欠点を解消するために、本研究課題では、半陰的に特性曲線法を導入した。空間方向の近似に有限要素法を適用した場合の誤差評価 (例えば Notsu-Tabata [H], Pironneau [I], and Pironneau-Tabata [J]などを参照) など既存の結果、および研究代表者が得ている熱対流方程式に対する有限要素法に関する知見 (Tabata-Tagami [D])などを基に、エネルギー不等式に基づく安定性評価、さらには誤差評価の導出を行った。

(3) 数値実験:

誤差評価など、数学的な視点からの理論解析の結果が得られた半陰的な特性曲線一般化粒子法を用いて、数値実験を行った。まず創成解問題を用いて収束次数を再現する数値実験を行い、数値解析で得られた誤差の収束次数が数値実験でも再現できることを確認した。次に Rotating Hill 問題など、移流拡散方程式に対する数値計算手法の検証に用いられる問題に、提案した半陰的な特性曲線一般化粒子法を適用し、その有効性を確認した。これらの数値実験は、提案した数値計算手法が、数値解析の観点から数学的に有効だけでなく、実用的にも有効であることを確認するために行った。

(4) 研究成果の発表および情報収集:

本研究課題に密接に関連した国際会議および国内会議に参加し、成果発表・最新情報の収集などを行なった。情報収集によって得られた知見は、本研究課題で実施した数値解析の改良や、粒子法の数学的基盤整備の次段階へ向けた検討にも活かされた。また、得られた成果を元に学術雑誌に論文を投稿し、あるいは投稿の準備を進めた。

4. 研究成果

“研究開始当初の背景”欄でも述べた通り、粒子法は、有限差分法や有限要素法などと異なり、近似に用いる評価点の依存関係を定める格子や多面体分割を用意する必要がない。この特徴から粒子法は、移動境界を持つ問題に対する数値計算手法の一つとして盛んに用いられている。一方でメッシュが不要であるという粒子法の特徴は、離散化パラメータの自由度が増大する欠点を生む。このため、領域内に配置する粒子の数と粗密、選択する参照関数の滑らかさや影響半径の大きさ、参照関数の結合に用いる粒子体積の大きさなど、離散化パラメータの選択を適切に行う必要がある。研究代表者は、従来用いられてきた SPH や MPS などの手法を含んだある一般化粒子法を提案し、その補間作用素や近似微分作用素に対する打ち切り誤差評価に対する離散化パラメータの十分条件を導出することで、この問題を解決し、学会発表と学術雑誌投稿によって成果を公開した (“主な発表論文等”; “[雑誌論文]” [1], [2]; “[学会発表]” [2], [11], [12])。)

また粒子法の持つもう一つの特徴として、近似に用いる粒子を流体粒子と見做し得られた近似流れ場に

従って粒子を移動させることで, Lagrange 座標を用いて直接的に物質微分の近似を行う点がある. この特徴は, 特に移流が支配的な流れ場の数値計算に粒子法を用いる場合に, 時間積分の進展に伴って対象とする領域内部で粒子の偏在を招き, 計算手法の数値的不安定や精度悪化を招くという欠点も併せ持っている. この欠点を解消するために, 時間積分の各ステップにおいて, 粒子偏在を防ぐための何らかの粒子再配置手法が盛んに開発されている. しかしながら, 広く用いられている粒子再配置手法は, 実用的な検証問題における精度検証などが行われている似すぎず, その数学的正当化は行われていなかった. 本研究課題では, 半陰的に特性曲線法を導入することでこの欠点の解決を試みた. 特性曲線法は, 移流が支配的な流れ場の数値計算に有効な手法として提案され, 近年は, 空間方向の近似に有限要素法を適用した場合の誤差評価が得られるなど, 数学的な理論整備が十分に行われている手法である (例えば Notsu–Tabata [H], Pironneau [I], and Pironneau–Tabata [J]などを参照). これらの既存の結果, および研究代表者が得ている熱対流方程式に対する有限要素法に関する知見 (Tabata–Tagami [D])などを基に, 移流拡散方程式に対する特性曲線一般化粒子法を提案し, エネルギー不等式に基づく安定性評価, さらには誤差評価の導出を行った. また数学的な視点から誤差評価を導くだけでなく, 誤差評価が得られた特性曲線一般化粒子法を用いた数値実験も行い, 数学的に示された誤差の収束次数を数値的にも確認するなど, 提案手法の有効性を広い枠組みで確認もした. これらの成果は学会発表によって成果を公開し (“学会発表” [1], [3–10]), また学術雑誌編投稿の準備も進めている.

さらに, 補間作用素や近似微分作用素に対する打ち切り誤差評価を利用して, 弱形式で定式化された微分方程式に対する粒子法の誤差評価も行い, 学会発表によってその成果を公開した (“学会発表” [13], [14]).

最後に本研究課題で対象とした一般化粒子法を, 次に適用する問題として重要な, Navier–Stokes 方程式に対する特性曲線一般化粒子法の数値解析および数値計算の準備を行い, 新たな研究提案が可能となる知見を準備できた.

参考文献

- [A] Gingold, R.A. and Monaghan, J. J.: *Mon. Not. R. Astr. Soc.*, **181** (1977), 375–389.
- [B] Koshizuka, S., Tamako, H., and Oka, Y.: *Comput. Fluid Dyn. J.*, **4** (1995), 29–46.
- [C] Rogers, B.D. and Dalrymple, R.A.: *Adv. Coast. Ocean Engrg.*, **10** (2008), 75–100.
- [D] Tabata, M. and Tagami, D.: *Numer. Math.*, **100** (2005), 351–372.
- [E] Mas-Gallic, S. and Raviart, P.-A.: *Numer. Math.*, **51** (1987), 323–352.
- [F] Ben Moussa, B.: *Methods Appl. Anal.*, **13** (2006), 29–62.
- [G] 石島清宏, 木村正人: *日本応用数理学会論文誌*, **20** (2010), 165–182.
- [H] Notsu, H. and Tabata, M.: *ESAIM: M2AN*, **50** (2016), pp.361–380.
- [I] Pironneau, O.: *Numer. Math.*, **38** (1982), pp.309–332.
- [J] Pironneau, O. and Tabata, M.: *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, **64** (2010), pp.1240–1253.

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 2 件)

- [1] IMOTO, Yusuke and TAGAMI, Daisuke: Truncation error estimates of approximate differen-

tial operators of a particle method based on the Voronoi decomposition, *JSIAM Letters*, **9**, 2017, pp. 69–72, DOI: 10. 14495/jsiaml. 9. 69, 査読有

- [2] IMOTO, Yusuke and TAGAMI, Daisuke: A truncation error estimate of the interpolant of a particle method based on the Voronoi decomposition, *JSIAM Letters*, **8**, 2016, pp. 29–32, DOI: 10. 14495/jsiaml. 8. 29, 査読有

[学会発表] (計 14 件)

- [1] TAGAMI, Daisuke: Numerical Analysis of a Generalized Particle Method for the Convection-Diffusion Equation, International Congress of Mathematicians 2018 (ICM2018), Aug. 2018
- [2] 田上 大助: 流れ問題に対する計算手法の数値解析 —有限要素法と粒子法—, RIMS 共同研究 (グループ型) “数理農学の基盤づくりに向けて”, 2018 年 1 月
- [3] TAGAMI, Daisuke: Numerical Analysis of a Generalized Particle-Based Method for Convection-Diffusion Equations and its Application, European Conference on Numerical Mathematics and Advanced Applications (ENUMATH 2017), Sep. 2017
- [4] TAGAMI, Daisuke: Mathematical Analysis of Characteristic Generalized Particle Methods for Convection-Diffusion Equations, SPHERIC 2017, Jun. 2017
- [5] 田上 大助: 移流拡散方程式に対する特性曲線法一般化粒子法の誤差評価, 研究集会 “数値解析の理論と実践”, 2017 年 3 月
- [6] TAGAMI, Daisuke: Error Estimates of a Characteristic Particle Method for Convection-Diffusion Equations, A3 Workshop on Computational Fluid Dynamics and Numerical Analysis, Feb. 2017
- [7] TAGAMI, Daisuke: Numerical Analysis of a Characteristic Particle Method for Convection-Diffusion Equations, IMI-La Trobe Joint Conference “Geometric Numerical Integration and its Applications”, Dec. 2016
- [8] TAGAMI, Daisuke: An Application of Characteristic Methods into a Generalized Particle Method for Convection-Diffusion Equations, Mathematical Analysis of Continuum Mechanics and Industrial Applications, Oct. 2016
- [9] TAGAMI, Daisuke: Error Estimates of a Generalized Particle Method for Convection-Diffusion Equations, Czech–Japanese–Polish Seminar in Applied Mathematics 2016, Sep. 2016
- [10] TAGAMI, Daisuke: A Generalized Particle Method for Convection-Diffusion Equations, The 11th East Asia Section of SIAM Conference (EASIAM 2016), Jun. 2016
- [11] 田上 大助: 数値流体力学における数値解析学の基盤技術, 化学工学会 第 81 年会, 2016 年 3 月
- [12] 田上 大助: 数値解析学から見た計算手法の高精度化・高効率化の取り組み, および物質・材料との連携展開, MI² (情報統合型質・材料開発) と数学連携による新展開ワークショップ, 2016 年 2 月
- [13] TAGAMI, Daisuke: Error Estimates of a Particle Based Method Based on a Weak Formulation, The Fourth International Conference on Particle-Based Methods. Fundamentals and Applications (PARTICLES 2015), Sep. 2015
- [14] TAGAMI, Daisuke: Error Estimates of a Generalized Particle-Based Method for Elliptic

Boundary Value Problems, European Conference on Numerical Mathematics and Advanced Applications (ENUMATH 2015), Sep. 2015

6. 研究組織

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。