

ニューラルネットに基づく双曲型重み関数を用いた

粒子法シミュレーション

日大生産工 (学部) ○椎名秀昌 日大生産工(院) 林 侑希
日大生産工 角田和彦

1 はじめに

粒子法は連続体の挙動を有限個の粒子によって表し,粒子の運動によって連続体の挙動を計算するシミュレーション手法である.粒子法の一つであるMPS法¹⁾では重み関数が数値計算において重要な役割を持つ.

本論文では,提案する双曲型重み関数²⁾と従来の重み関数を用いたダム崩壊流れのシミュレーション結果と実験値との比較を行い,提案手法の妥当性及び適用性を検討することを目的とする.

ここで提案する双曲型重み関数は従来の重み関数とは異なり,粒子間距離が0になったとしても値が無限大にならない為,計算の安定性及び正確性が高められる期待があると考えられる.また,その双曲型重み関数は理工学の様々な分野に適応されている神経回路網のニューロンをモデル化したニューラルネット³⁾の入出力関係の特性関数として提案されたものをMPS法で用いる重み関数に適用させたものである.

2 MPS法

MPS法は発散や勾配などの微分演算子に対応する粒子間相互作用モデルを用いて連続体の支配方程式を離散化するものである.

重み関数は粒子間相互作用モデルで用いられ, $w(r)$ と定義されている¹⁾.

式(1)は勾配モデル,式(2)は発散モデルである.

$$\langle \nabla \varphi \rangle_i = \frac{d}{n^0} \sum_{j \neq i} \left[\frac{\varphi_j - \varphi_i}{|r_j - r_i|} (r_j - r_i) w(|r_j - r_i|) \right] \quad (1)$$

$$\langle \nabla \cdot u \rangle_i = \frac{2d}{n^0} \sum_{j \neq i} \left[\frac{u_{ij} \cdot (r_j - r_i)}{|r_j - r_i|} w(|r_j - r_i|) \right] \quad (2)$$

3 ニューラルネットに基づく重み関数の構成

神経回路網のニューロンは生命維持と情報処理を担う細胞体,情報が入力される樹状突起情報の出力部分である軸索,軸索の末端にあるシナプスで構成されている.シナプスは一つのニューロンから他のニューロンへ情報を伝達する学習能力と適応能力を備えた装置である.一般に神経回路網の素子がニューロンのモデルとして用いられる.ニューロンのモデルを図1に示す.

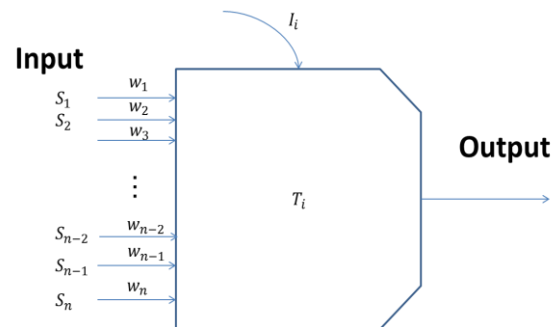


図1. ニューロンモデル

ニューラルネットワークで特性関数に与えられる出力は式(5)で与えられる。 S_{ij} はi番目の素子へのn個の出力値, w_{ij} はそれぞれの入力に対する重み, I_i はバイアス値, T_i は閾値を表す.

$$U_i = \sum_{j=1}^n S_{ij} w_{ij} + I_i - T_i \quad (5)$$

入出力関係は式(6)のように特性関数により与えられる.

$$V_i = h(U_i) \quad (6)$$

特に, 特性関数 h として一般に連続値モデルとして以下のシグモイド関数(7)が用いられる.

$$h(U_i) = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{U_i}{2} \right) \right) \quad (7)$$

ここで、シグモイド関数(7)を微分して得られた関数に粒子法で用いられるコンパクトサポータ性を考慮させることで、重み関数が得られる。

以下にシグモイド関数から得られた重み関数(8)を示す⁴⁾。

$$w = a_0 + \frac{\kappa a_1}{2r_e} \operatorname{sech}^2 \left(\frac{\kappa r}{r_e} \right) \quad (8)$$

MPS法で用いられる重み関数は影響半径 r_e と粒子同士の相対距離 r の比を変数とする。

a_0, a_1 はコンパクトサポータ性を得るための適当な定数である。また、 κ は特性値である。式(8)を変形しコンパクトサポータ性の性質を持たせた関数を以下に示す。

$$w = \frac{\{\operatorname{sech}^2(\frac{\kappa r}{r_e}) - \operatorname{sech}^2(\kappa)\}}{\{1 - \operatorname{sech}^2(\kappa)\}} \quad (9)$$

図2(a)は κ を変化させた時の式(9)の挙動を示し、図2(b)に重み関数の比較を示す。Present($\kappa=2.0$)が式(9)の関数のグラフである。

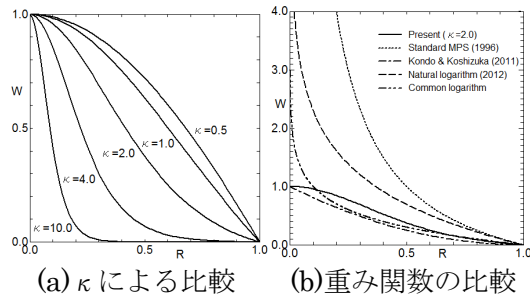


図2.重み関数

4 数値計算例

本解析手法を用いて解く問題は水柱崩壊と呼ばれ、自由表面流れの解析を行う上で代表的なベンチマークである。図3にシミュレーション内容を可視化したものを示す。

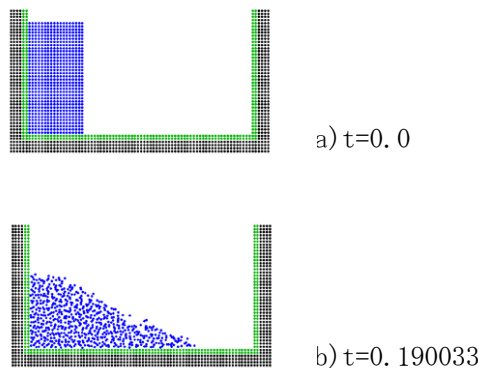


図3.水柱崩壊シミュレーション

図4に実験値と式(9)の重み関数及び他の重み関数を用いたシミュレーションの比較を示す。以前改良を行った3次元シミュレーションでは実験値に非常に近い結果が得られている。提案した2次元での重み関数では κ の値を変えることでシミュレーション結果も変化する。その中で $\kappa=4.0$ の場合は、時間の経過に伴い実験値に近い値になっている。

よって今回提案した関数は改良を行った3次元の重み関数ほど実験値に近い値は得られなかったが、2次元解析としては良好な結果が得られている。

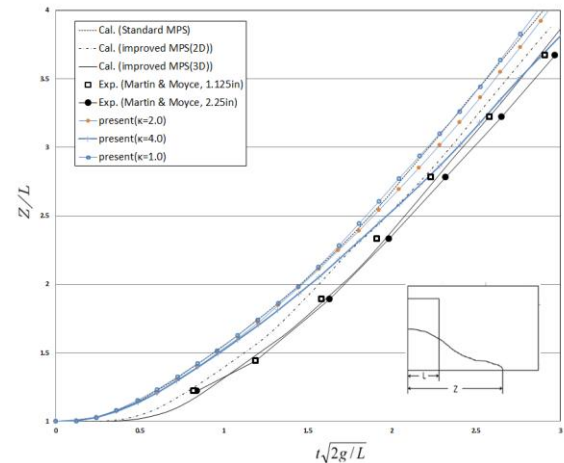


図4.実験値との比較

5 おわりに

本研究ではニューラルネットの特性関数に基づき双曲型重み関数(9)の構成を行い、提案した重み関数を用いた粒子法シミュレーションで特性値 $\kappa=4.0$ の値で最も実験結果に近づくことを確認した。今後は2次元であった流れ場を3次元に拡張することで、さらに解析の精度を高めることを目指す。

参考文献

- 1) 越塚誠一,「粒子法」丸善株式会社(2005)。
- 2) M.A.アービブ,訳金子隆芳,ニューラルネットと脳理論,サイエンス社,(1994)。
- 3) 角田和彦,「ニューラルネットの特性関数とその近似関数」情報処理学会第67回全国大会, 1-239~1-240。
- 4) E.V.Laitone, The Second Approximation to Cnoidal and Solitary Waves, Journal of Fluid Mechanics, November 1960, pp 430-444.