

Thu. Jun 1, 2023

Room F

OS13 計算手法の数学解析と現実問題への適用

[F-06] OS13 計算手法の数学解析と現実問題への適用
(1)

座長:高石 武史(武蔵野大学)

9:00 AM - 10:15 AM Room F (2F Conference Room 202B)

[F-06-01] 直交選点有限要素法による擬似移動層クロマトの
物質収支の評価に関する考察*大久保 孝樹¹ (1. 函館工業高等専門学校)

9:00 AM - 9:15 AM

[F-06-02] 多点拘束法と重合メッシュ法の併用に関する基礎
検討*山東 篤¹、石原 尚¹、西川 周建¹ (1. 和歌山工業高等専
門学校)

9:15 AM - 9:30 AM

[F-06-03] CIP Runge-Kutta 法による非線形波動方程式の数
値解析*田中 大毅¹ (1. 株式会社NTTデータ数理システム)

9:30 AM - 9:45 AM

[F-06-04] 厚み方向垂直応力を考慮した拡張 Kirchhoff-
Loveシェルによる非圧縮薄肉構造のアイソジオメ
トリック解析*谷口 靖憲¹、滝沢 研二¹、乙黒 雄斗²、Tezduyar Tayfun
E.³ (1. 早稲田大学、2. 東京理科大学、3. Rice
University)

9:45 AM - 10:00 AM

[F-06-05] 相分離問題の粗視化のための particle dynamics
model*降旗 大介¹ (1. 大阪大学)

10:00 AM - 10:15 AM

OS13 計算手法の数学解析と現実問題への適用

[F-07] OS13 計算手法の数学解析と現実問題への適用
(2)

座長:田上 大助(九州大学)

10:30 AM - 11:30 AM Room F (2F Conference Room 202B)

[F-07-01] 境界接触条件と非貫入条件を反映したフェーズ
フィールドき裂進展シミュレーション*高石 武史¹、木村 正人² (1. 武蔵野大学、2. 金沢大
学)

10:30 AM - 10:45 AM

[F-07-02] ある細胞接着タンパクの分解酵素を考慮した角層
剥離モデル*奥村 真善美¹、長山 雅晴²、小林 康明²、後藤 真紀子³、宮井 雅史³、中西 忍³、菅原 美郷³ (1. 甲南大学、2.
北海道大学、3. 株式会社資生堂)

10:45 AM - 11:00 AM

[F-07-03] グルコース, インスリンと C-ペプチドのダイナミ
クスを記述するコンパートメント体循環モデルの
パラメータ推定*GAO YUEYUAN¹、水藤 寛²、千葉 逸人²、長山
雅晴¹、片桐 秀樹² (1. 北海道大学、2. 東北大学)

11:00 AM - 11:15 AM

[F-07-04] カーネル法によるハミルトン系の学習と乱択化に
よる高速化*植田 大晴¹、松原 崇²、谷口 隆晴¹ (1. 神戸大学、2.
大阪大学)

11:15 AM - 11:30 AM

OS13 計算手法の数学解析と現実問題への適用

[F-06] OS13 計算手法の数学解析と現実問題への適用 (1)

座長:高石 武史(武蔵野大学)

Thu. Jun 1, 2023 9:00 AM - 10:15 AM Room F (2F Conference Room 202B)

[F-06-01] 直交選点有限要素法による擬似移動層クロマトの物質収支の評価に関する考察

*大久保 孝樹¹ (1. 函館工業高等専門学校)

9:00 AM - 9:15 AM

[F-06-02] 多点拘束法と重合メッシュ法の併用に関する基礎検討

*山東 篤¹、石原 尚¹、西川 周建¹ (1. 和歌山工業高等専門学校)

9:15 AM - 9:30 AM

[F-06-03] CIP Runge-Kutta 法による非線形波動方程式の数値解析

*田中 大毅¹ (1. 株式会社NTTデータ数理システム)

9:30 AM - 9:45 AM

[F-06-04] 厚み方向垂直応力を考慮した拡張 Kirchhoff- Loveシェルによる非圧縮薄肉構造のアイソジオメトリック解析

*谷口 靖憲¹、滝沢 研二¹、乙黒 雄斗²、Tezduyar Tayfun E.³ (1. 早稲田大学、2. 東京理科大学、3. Rice University)

9:45 AM - 10:00 AM

[F-06-05] 相分離問題の粗視化のための particle dynamics model

*降旗 大介¹ (1. 大阪大学)

10:00 AM - 10:15 AM

直交選点有限要素法による擬似移動層クロマトの物質収支の評価に関する考察

Discussions on Evaluation of Material Balance in Simulated Moving Bed Chromatography by Orthogonal Collocation Finite Elements Method

大久保孝樹¹⁾

Takaki Ohkubo

1) 博(工) 函館高専名誉教授 (〒042-0935 北海道函館市駒場町13-2, E-mail: ohkubo@hakodate-ct.ac.jp)

This paper discuss on evaluation of material balance in simulated moving bed chromatography by using the advantage of orthogonal collocation finite elements method (OCFEM) in terms of accuracy of numerical calculation. The tool of OCFEM is differential operator represented by matrix in time and space to make it easy to translate PDEs to algebraic equations, which have high precision numerical calculation ability by high order collocation number. This study presents the dimensionless concentration profile through the total column, and calculates the yields and purity at raffinate and extract. In conclusion, this discussion showed that the total yield at raffinate and extract is not necessarily equal to 100%, but the mass balance in total columns for each duration of cyclic steady condition is zero.

Key Words : Simulated Moving Bed, Chromatography, Orthogonal Collocation Finite Elements Method, differential operator, time and space, high precision, mass balance, yield at raffinate and extract

1. はじめに

擬似移動層クロマトグラフィーは、食品、薬剤分野などで用いられており、連続操作によって精製分離することができる手法の一つである。擬似移動層の最適な操作設備、操作条件を決定するために、従来は実験の試行錯誤によって行わなければならない、PCによる信頼性の高い数値計算シミュレーション技術が望まれていた。しかし、差分などによる数値計算シミュレーションによる結果について、計算精度が原因とされる収率と物質収支の点で問題があることが指摘されていた。本研究では、高精度計算が可能な時空間の微分作用素（行列）を用いた直交選点有限要素法（OCFEM）によって数値解析を行った。擬似移動層の精製成分を取り出すラフィネートとエキストラクトの周期定常条件下における各周期間の全収率が必ずしも100%にならないこと、一方で各周期間における全カラムを通しての物質収支がサイクル数200でほぼゼロ（Total balance : $10^{-10} \sim 10^{-16}$ のオーダー）となり収支が取れていることが分かった。周期定常状態の周期サイクル数が50の場合より100, 200の場合の方がラフィネートとエキストラクトの全収率が100%に近くなる事がわかった。各カラムの周期定常状態の周期(ステップ)の物質収支(バランス)を求め全カラムの収支の合計を取った全バランス(Total balance)は200サイクルまで計算した場合、ほぼゼロとなったので、数値計算上の収支はとれていることになっている。数値計算上の収支はとれているのに、ラフィネートとエキストラクトの全収率が100%にならないのはどのような意味があるのか考察する必要があると考えら

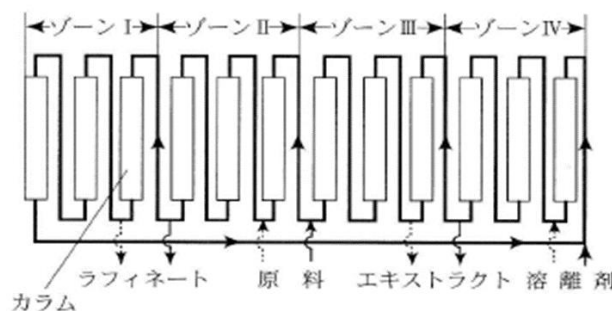


図-1 擬似移動層クロマト分離装置の操作原理

れる。この論文では、間歇移動層モデルの全カラムを通しての時間平均濃度プロファイルとラフィネートとエキストラクトの全収率の計算結果、ラフィネートとエキストラクトの周期定常状態の結果および周期定常条件下での各周期間での各カラムの物質収支の分布図とその合計である全カラムの物質収支(Total balance)を計算した結果を示すことによって、考察を行っている。

2. 擬似移動層クロマトの間歇移動層モデル

(1) 擬似移動層クロマトの間歇移動層モデル

擬似移動層クロマトの間歇移動層モデルは、実際のプラントおよび装置の操作挙動と同等のものである。コンピュータシミュレーションでは図-1においてR(ラフィネート), F(原料: フィード), E(エキストラクト), D(溶離剤: ディソバート)の境界条件の位置を固定し各カラムを間歇的に流れ方向に移動させ擬似的に吸着剤(固体相)が液相の流れとは逆方向に流れることを擬似している。

(2) 2成分競争吸着の移流拡散吸脱着の連立偏微分方程式 と R, F, E, D の境界条件式

【クロマトグラフィーモデル（基礎方程式）】

移流拡散吸脱着方程式（無次元）

$$\frac{u_s}{u_n} \frac{\partial C_1}{\partial t} + \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \frac{u_s}{u_n} \frac{\partial q_1}{\partial t} + \frac{\partial C_1}{\partial x} + \frac{1}{P_{en}} \frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} = 0$$

$$\frac{u_s}{u_n} \frac{\partial C_2}{\partial t} + \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \frac{u_s}{u_n} \frac{\partial q_2}{\partial t} + \frac{\partial C_2}{\partial x} + \frac{1}{P_{en}} \frac{\partial^2 C_2}{\partial x^2} = 0$$

LDF近似（無次元）

$$\frac{\partial q_1}{\partial t} = k_{d1} (q_1^* - q_1) \quad \frac{\partial q_2}{\partial t} = k_{d2} (q_2^* - q_1)$$

拡張 Langmuir 式（競争吸着モデル）（無次元）

$$q_1^* = \frac{Q_{sat1} B_1 C_1}{1 + B_1 C_1 + B_2 C_2} \quad q_2^* = \frac{Q_{sat2} B_2 C_2}{1 + B_1 C_1 + B_2 C_2}$$

【境界条件】（無次元）

- ① ラフィネート (R) の取り出し口位置でのカラム入口部での境界条件

$$C_{k(3nz+1)} \Big|_{x=0} - \frac{1}{P_{el}} \left(\frac{\partial C}{\partial x} \right)_{k(3nz+1)} \Big|_{x=0} = \left(-\frac{u_{0R}}{u_{0I}} + \frac{u_{0II}}{u_{0I}} \right) C_{k(3nz)} \Big|_{x=1}$$

1つ前のカラムの出口部での境界条件

$$\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right)_{k(3nz)} \Big|_{x=1} = 0$$

- ② 原料供給口 (F) の位置におけるカラム入口部での境界条件

$$C_{k(2nz+1)} \Big|_{x=0} - \frac{1}{P_{el}} \left(\frac{\partial C}{\partial x} \right)_{k(2nz+1)} \Big|_{x=0} = \frac{u_{0F}}{u_{0II}} C_{kF} + \frac{u_{0III}}{u_{0II}} C_{k(2nz)} \Big|_{x=1}$$

1つ前のカラムの出口部での境界条件

$$\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right)_{k(2nz)} \Big|_{x=1} = 0$$

- ③ エキストラクト (E) の位置におけるカラム入口部での境界条件

$$C_{k(nz+1)} \Big|_{x=0} - \frac{1}{P_{el}} \left(\frac{\partial C}{\partial x} \right)_{k(nz+1)} \Big|_{x=0} = \left(-\frac{u_{0E}}{u_{0III}} + \frac{u_{0IV}}{u_{0III}} \right) C_{k(nz)} \Big|_{x=1}$$

1つ前のカラムの出口部での境界条件

$$\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right)_{k(nz)} \Big|_{x=1} = 0$$

- ④ 溶離剤供給口 (D) の位置におけるカラム入口部での境界条件

$$C_{k(1)} \Big|_{x=0} - \frac{1}{P_{el}} \left(\frac{\partial C}{\partial x} \right)_{k(1)} \Big|_{x=0} = \frac{u_{0I}}{u_{0IV}} C_{k(4nz)} \Big|_{x=1} + \frac{u_{0D}}{u_{0IV}} C_{kD}$$

1つ前のカラムの出口部での境界条件

$$\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right)_{k(4nz)} \Big|_{x=1} = 0$$

- ⑤ R, F, E, D 以外のカラム入口部, 出口部の境界条件

$$C_{k(m)} \Big|_{x=0} - \frac{1}{P_{en}} \left(\frac{\partial C}{\partial x} \right)_{k(m)} \Big|_{x=0} = C_{k(m-1)} \Big|_{x=1}$$

1つ前のカラムの出口部での境界条件

$$\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right)_{k(m-1)} \Big|_{x=1} = 0$$

ここで,

 C_k : k 成分無次元濃度 $C_{k(m)}$: m カラムの k 成分無次元濃度 C_{kF} : k 成分の無次元供給濃度 C_{kD} : k 成分の無次元溶離剤濃度 q_k : k 成分無次元吸着濃度 q_k^* : k 成分無次元吸着平衡濃度 t : 無次元時間 x : 無次元距離 ε : 空隙率 P_{en} : n ゾーンのペクレ数 k_{dk} : k 成分の無次元総括物質移動容量係数 Q_{satk}, B_k : k 成分のLangmuir吸着平衡式の

無次元パラメータ

 u_n : n ゾーンの流速 u_s : 擬定の固定層移動速度 u_{0R} : ラフィネート(A成分引き抜き)の空塔流速 u_{0E} : エキストラクト(B成分引き抜き)の空塔流速 u_{0F} : フィード(流入混合基質)の空塔流速 u_{0D} : ディソルベント(希釈液)の空塔流速 u_{0n} : n ゾーンの空塔流速 nz : ゾーン内カラム数 ($nz=2$)

3. OCFEMの時空間の微分作用素による定式化

競争吸着・移流拡散モデル

 m カラム内の移流拡散吸脱着方程式:

$$\frac{u_s}{u_n} \mathbf{A}_{tis} \mathbf{C}_{1(m)qs}^{kl} + \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \frac{u_s}{u_n} \mathbf{A}_{tis} \mathbf{q}_{1(m)qs}^{kl} + \mathbf{A}_{xqp} \mathbf{C}_{1(m)pi}^{kl}$$

$$- \frac{1}{P_{en}} \mathbf{B}_{xqp} \mathbf{C}_{1(m)pi}^{kl} = 0$$

$$\frac{u_s}{u_n} \mathbf{A}_{tis} \mathbf{C}_{2(m)qs}^{kl} + \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \frac{u_s}{u_n} \mathbf{A}_{tis} \mathbf{q}_{2(m)qs}^{kl} + \mathbf{A}_{xqp} \mathbf{C}_{2(m)pi}^{kl}$$

$$- \frac{1}{P_{en}} \mathbf{B}_{xqp} \mathbf{C}_{2(m)pi}^{kl} = 0$$

LDF 近似・拡張 Langmuir 式（競争吸着モデル）:

$$\mathbf{A}_{tis} \mathbf{q}_{1(m)qs}^{kl} - k_{d1} \left[Q_{sat1} \frac{B_1 \mathbf{C}_{1(m)qi}^{kl}}{1 + B_1 \mathbf{C}_{1(m)qi}^{kl} + B_2 \mathbf{C}_{2(m)qi}^{kl}} - \mathbf{q}_{1(m)qi}^{kl} \right] = 0$$

$$\mathbf{A}_{tis} \mathbf{q}_{2(m)qs}^{kl} - k_{d2} \left[Q_{sat2} \frac{B_2 \mathbf{C}_{2(m)qi}^{kl}}{1 + B_1 \mathbf{C}_{1(m)qi}^{kl} + B_2 \mathbf{C}_{2(m)qi}^{kl}} - \mathbf{q}_{2(m)qi}^{kl} \right] = 0$$

要素境界条件：

$$\mathbf{A}_{xrp} \mathbf{C}_{1(m)pi}^{kl} - \mathbf{A}_{xhp} \mathbf{C}_{1(m)pi}^{(k+1)l} = 0$$

$$\mathbf{A}_{xrp} \mathbf{C}_{2(m)pi}^{kl} - \mathbf{A}_{xhp} \mathbf{C}_{2(m)pi}^{(k+1)l} = 0$$

$$\mathbf{A}_{xrp} \mathbf{q}_{1(m)pi}^{kl} - \mathbf{A}_{xhp} \mathbf{q}_{1(m)pi}^{(k+1)l} = 0$$

$$\mathbf{A}_{xrp} \mathbf{q}_{2(m)pi}^{kl} - \mathbf{A}_{xhp} \mathbf{q}_{2(m)pi}^{(k+1)l} = 0$$

R, F, E, D における境界条件：

- ① ラフィネート (R) の取り出し口位置でのカラム入口部での境界条件

$$\begin{aligned} & \mathbf{C}_{k(3nz+1)li}^{ll} - \frac{1}{P_{el}} \mathbf{A}_{x1p} \mathbf{C}_{k(3nz+1)pi}^{ll} \\ &= \left(-\frac{u_{0R}}{u_{0I}} + \frac{u_{0II}}{u_{0I}} \right) \mathbf{C}_{k(3nz)2i}^{KI} \end{aligned}$$

1 つ前のカラムの出口部での境界条件

$$\mathbf{B}_{x2p} \mathbf{C}_{k(3nz)pi}^{KI} = 0$$

- ② 原料供給口 (F) の位置におけるカラム入口部での境界条件

$$\begin{aligned} & \mathbf{C}_{k(2nz+1)li}^{ll} - \frac{1}{P_{eII}} \mathbf{A}_{x1p} \mathbf{C}_{k(2nz+1)pi}^{ll} \\ &= \frac{u_{0F}}{u_{0II}} \mathbf{C}_{kf}^{KI} + \frac{u_{0III}}{u_{0II}} \mathbf{C}_{k(2nz)2i}^{KI} \end{aligned}$$

1 つ前のカラムの出口部での境界条件

$$\mathbf{B}_{x2p} \mathbf{C}_{k(2nz)pi}^{KI} = 0$$

- ③ エキストラクト (E) の位置におけるカラム入口部での境界条件

$$\begin{aligned} & \mathbf{C}_{k(nz+1)li}^{ll} - \frac{1}{P_{eIII}} \mathbf{A}_{x1p} \mathbf{C}_{k(nz+1)pi}^{ll} \\ &= \left(-\frac{u_{0E}}{u_{0III}} + \frac{u_{0IV}}{u_{0III}} \right) \mathbf{C}_{k(nz)2i}^{KI} \end{aligned}$$

1 つ前のカラムの出口部での境界条件

$$\mathbf{B}_{x2p} \mathbf{C}_{k(nz)pi}^{KI} = 0$$

- ④ 溶離剤供給口 (D) の位置におけるカラム入口部での境界条件

$$\begin{aligned} & \mathbf{C}_{k(1)li}^{ll} - \frac{1}{P_{el}} \mathbf{A}_{x1p} \mathbf{C}_{k(1)pi}^{ll} \\ &= \frac{u_{0I}}{u_{0IV}} \mathbf{C}_{k(4nz)2i}^{KI} + \frac{u_{0D}}{u_{0IV}} \mathbf{C}_{kd} \end{aligned}$$

1 つ前のカラムの出口部での境界条件

$$\mathbf{B}_{x2p} \mathbf{C}_{k(4nz)pi}^{KI} = 0$$

ここで、

$\mathbf{C}_{k(m)qs}^{kl}$: k 成分の空間要素 k , 時間要素 l における,
空間内部選点 q , 時間選点 s の m カラムにおける
濃度 C の qs ベクトル

$\mathbf{C}_{k(m)pi}^{kl}$: k 成分の空間要素 k , 時間要素 l における,
空間選点 p , 時間選点 i の m カラムにおける
濃度 C の pi ベクトル

$\mathbf{q}_{k(m)qs}^{kl}$: k 成分の空間要素 k , 時間要素 l における,
空間内部選点 q , 時間選点 s の m カラムにおける
吸着濃度 q の qs ベクトル

$\mathbf{q}_{k(m)pi}^{kl}$: k 成分の空間要素 k , 時間要素 l における,
空間選点 p , 時間選点 i の m カラムにおける
吸着濃度 q の pi ベクトル

$\mathbf{A}_{tis}$: 時間選点 i 行 s 列の時間微分作用素 (行列)

$\mathbf{A}_{xqp}$: 空間内部選点 q 行, 空間選点 p 列の1階の
空間微分作用素 (行列)

$\mathbf{B}_{xqp}$: 空間内部選点 q 行, 空間選点 p 列の2階の
空間微分作用素 (行列)

$\mathbf{A}_{xrp}$: 空間外部選点 $r(h)$ 行, 空間選点 p 列の1階の
空間微分作用素 (行列)

K : 出口部の空間要素

なお、空間の局所番号付けは1が入り口、2が出口として
いる、内部選点は $3 \sim 2+na$ となる。naは、要素内の内部選
点数である。計算手順は、各カラムをOCFEMで定式化し
てラフィネート、原料供給口、エキストラクト、溶離剤供
給口の境界条件を用いて繋ぎ全体のマトリックスによっ
てその時間要素の結果を解き、時間要素(時間刻み)のマ
トリックスを更新していくことによって全体のカラム内の
濃度の時間変化が計算される。

4. 計算条件

以下に、間歇移動層モデルのOCFEMによる数値計算の
計算条件と各種パラメーターをそれぞれ表-1、表-2に
示す。但し、1つのカラムは10要素に分割し、要素内の内
部選点数は6で共通である。大久保・高村ら[6]の回分クロ
マト分離における精度を参考にすると、1カラム内の要素
数10、要素内内部選点数6では工学的に十分な精度(有効
数字3~4桁)であることが示されている。 $\Gamma(\text{II})$ (GMII
と同じ意味)は、ゾーンIIにおける流速に関連する操作線
の勾配である。拡散係数Dfは、 $3.1\text{cm}^2/\text{min}$ で計算したが、
この数値は、回分クロマトのペクレ数と同じオーダーに
なるものとし、仮定した拡散係数であり、吸着粒子の径や
カラム内流速、温度に依存するものとして実験的に計測
する必要がある。

図-2は、ゾーン内カラム数2におけるカラムとカラム
移動方向(数値計算上の)及び取り出し口(ラフィネート・
エキストラクト)・供給口(ディゾーベント・フィード)
の関係を表している。

なお、全カラムのTotal balance(全物質収支)は各カラム

の周期定常状態のステップ(1 サイクル)の収支を合計したものである。各ステップ(1 サイクル)の収支は、
(そのステップ終了時のカラム内成分量)－(そのステップ開始時のカラム内成分量)となる。カラム内成分量は、ステップ終了時の濃度をその1カラムの長さにより積分する。(液中量と吸着量の合計) ステップ開始時についても同様に積分する。各カラムで計算された物質収支を全カラムの合計としたものが、Total balanceである。

表－1 計算条件

ゾーン内カラム数	全カラム数	1カラム内の要素分割数	1要素内内部選点数	$\Gamma(\text{II})$
2	8	10	6	1.00
2	8	10	6	1.05
2	8	10	6	1.10

表－2 各種パラメーター

成分	Qsat(無次元)	B(無次元)	Df(cm ² /min)
1(A)	1.429	1.4335	3.1
2(B)	1.25	0.647	3.1

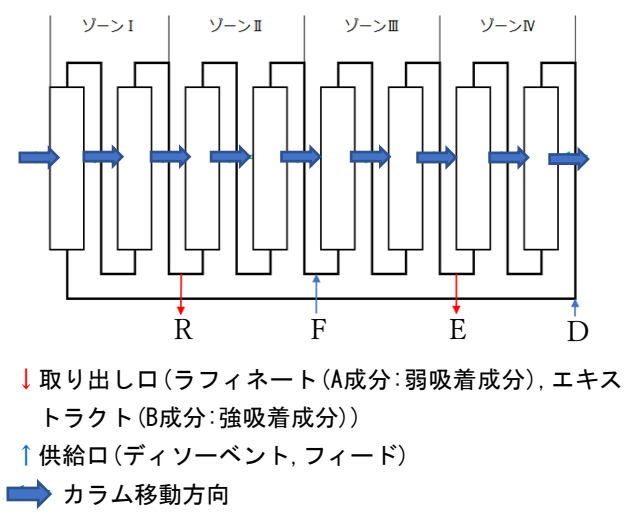


図-2 カラムとカラム移動方向及び
取り出し口・供給口の関係

表－3 周期サイクル 50 におけるラフィネートとエキストラクトの成分 A, B の収率と純度

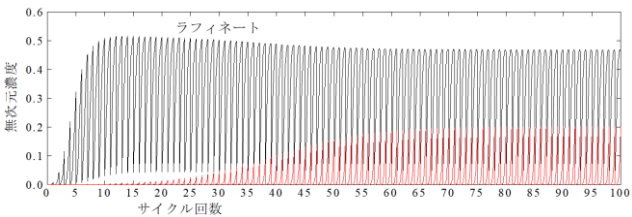
zcolu	GMII	成分	濃度C		収率		純度	
			R	E	R	E	R	E
2	1.00	A	0.000806	0.100143	0.2844%	98.3762%	0.28 %	99.45 %
		B	0.282332	0.000551	99.6465%	0.5411%	99.72 %	0.55 %
	1.05	A	0.028369	0.115551	8.3818%	87.7138%	7.67 %	99.79 %
		B	0.341296	0.000242	100.8376%	0.1840%	92.33 %	0.21 %
	1.10	A	0.107091	0.115880	27.7645%	71.6743%	21.75 %	99.77 %
		B	0.385246	0.000263	99.8788%	0.1628%	78.25 %	0.23 %

表－4 周期サイクル 100 におけるラフィネートとエキストラクトの成分 A, B の収率と純度

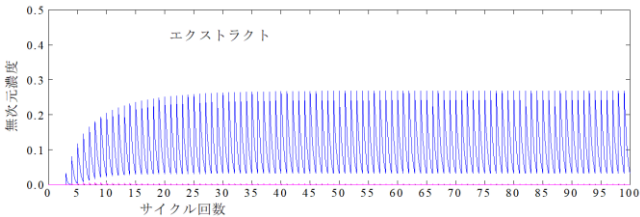
zcolu	GMII	成分	濃度C		収率		純度	
			R	E	R	E	R	E
2	1.00	A	0.000807	0.100199	0.2847%	98.4311%	0.28 %	99.45 %
		B	0.282285	0.000550	99.6298%	0.5398%	99.72 %	0.55 %
	1.05	A	0.038319	0.115756	11.3214%	87.8697%	10.18 %	99.79 %
		B	0.338031	0.000242	99.8729%	0.1839%	89.82 %	0.21 %
	1.10	A	0.107130	0.115883	27.7745%	71.6760%	21.76 %	99.77 %
		B	0.385232	0.000263	99.8752%	0.1628%	78.24 %	0.23 %

表－5 周期サイクル 50, 100, 200 における全収率と 200 サイクルにおける純度

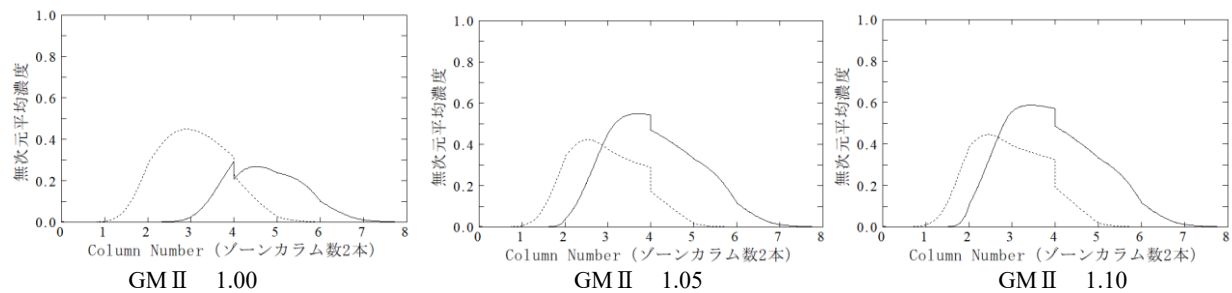
zcolu	GM II	成分	全収率			純度(200サイクル)	
			50サイクル	100サイクル	200サイクル	R	E
2	1.00	A	98.6606%	98.7158%	98.7158%	0.28%	99.45%
		B	100.1876%	100.1696%	100.1696%	99.72%	0.55%
	1.05	A	96.0956%	99.1911%	99.2032%	10.19%	99.79%
		B	101.0216%	100.0568%	100.0530%	89.81%	0.21%
	1.10	A	99.4388%	99.4505%	99.4505%	21.76%	99.77%
		B	100.0416%	100.0380%	100.0380%	78.24%	0.23%



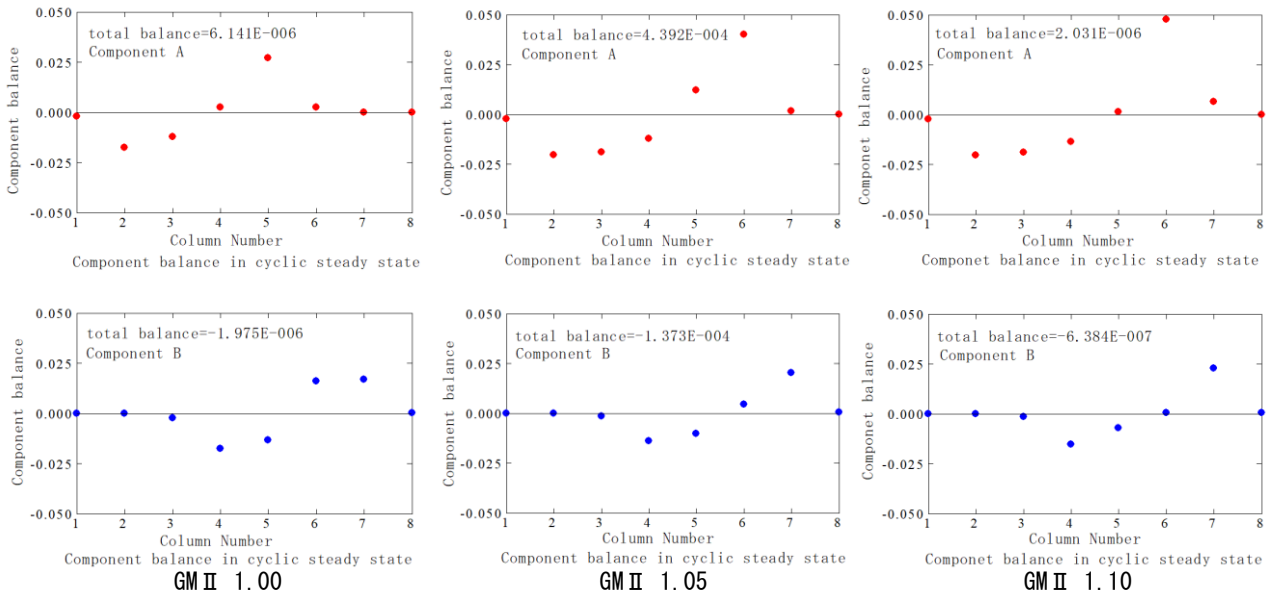
図－3 GM II 1.05 のラフィネートにおける周期振動



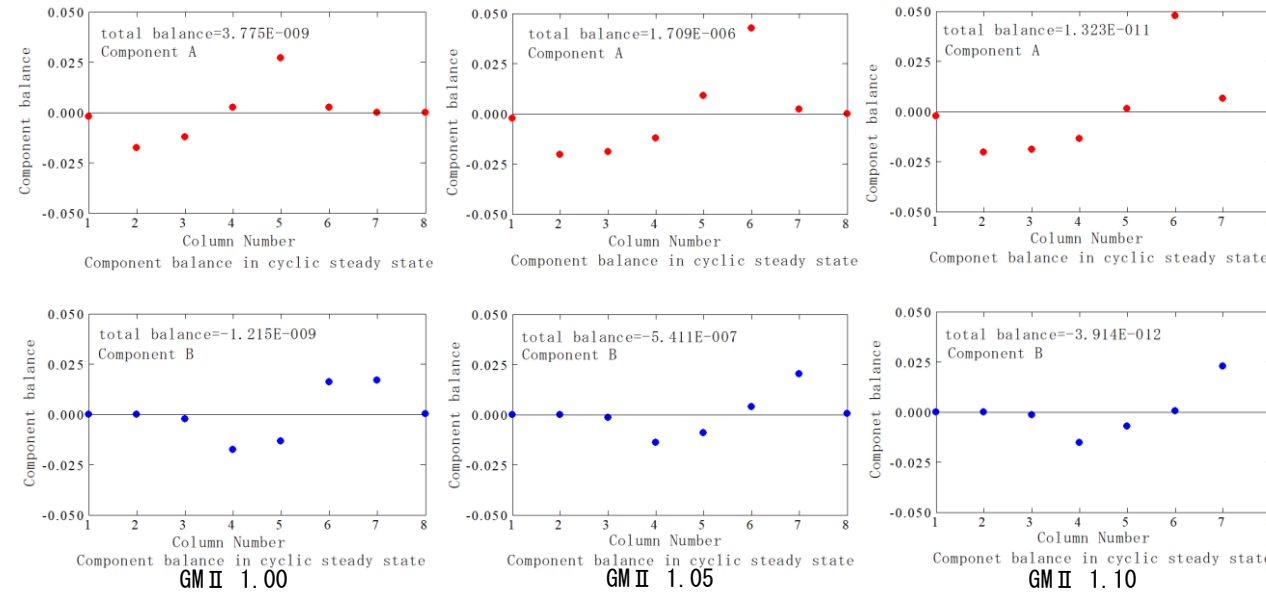
図－4 GM II 1.05 のエキストラクトにおける周期振動



図ー5 成分 A, B の時間平均無次元濃度分布



図ー6 サイクル 50 における各 GM II の成分 A, B の各カラムの収支分布とカラム全体の収支(Total balance)



図ー7 サイクル 100 における各 GM II の成分 A, B の各カラムの収支分布とカラム全体の収支(Total balance)

表ー6 各周期サイクルの Total balance(全物質収支)

	成分	Total balance(全物質収支)		
		50サイクル	100サイクル	200サイクル
GM II 1.00	A	6.141E-06	3.775E-09	1.655E-15
	B	-1.975E-06	-1.215E-09	-1.049E-15
GM II 1.05	A	4.392E-04	1.709E-06	1.562E-11
	B	-1.373E-04	-5.411E-07	-4.947E-12
GM II 1.10	A	2.031E-06	1.323E-11	-2.776E-16
	B	-6.384E-07	-3.914E-12	-1.457E-16

5. ラフィネートとエキストラクトにおける収率と純度

表－3、表－4は、周期サイクル数50、100におけるラフィネートとエキストラクトの収率と純度を表している。表－5の周期サイクル数とラフィネートとエキストラクトの全収率を見ると、GM II 1.05の場合の50サイクルでA成分の全収率が96.0956%と100%近くになっておらず100サイクル、200サイクルで99.1911%、99.2032%となり100%に近づいている。GM II 1.05の場合のサイクル数100までのラフィネートとエキストラクトの周期振動サイクルを図－3～図－4示す。GM II 1.05の場合のラフィネートの周期サイクル振動はサイクル数50では周期定常とは言えないことがわかる。今回の条件では、少なくとも周期サイクル数は100とすべきであることがわかる。

6. カラム全体における成分A、Bの時間平均無次元濃度分布

図－5に各GM II (1.00, 1.05, 1.10)における成分A、Bの周期定常状態(サイクル数200)の時間平均無次元濃度分布を示す。表－5の純度から言ってもGM II 1.00の操作条件の場合が良いと言える。

7. 周期状態の各カラムの成分A、Bの収支分布と全カラムの収支(Total balance)

図－6～図－7に50および100の周期状態の各カラムの成分A、Bの収支分布と全カラムの収支(Total balance)の数値を示す。表－6は、50、100、200サイクルにおけるTotal balanceをまとめたものである。

図－6、図－7、表－6の操作条件GM II は1.05では、Total balanceは周期サイクル(ncyc)が50の場合で 10^{-4} のオーダーになっており、ラフィネートエキストラクトのA成分の全収率も100%とならず、96.0956%となっている。ncyc=100におけるGM II 1.05の場合では、 $10^{-6} \sim 10^{-7}$ のオーダーになっているので、ncyc=100で十分であることがわかる。表－6の操作条件GM II が1.00では、ncyc=50でTotal balanceが 10^{-6} のオーダーで、GM II が1.10では、ncyc=50で $10^{-6} \sim 10^{-7}$ のオーダーであった。表－5、表－6を見る限り、Total balanceが 10^{-6} 以下のオーダーになっていれば、全収率が100%近くになっているので、十分と考えられる。

以上より、全カラムの収支(Total balance)が、 $10^{-6} \sim 10^{-7}$ 以下のオーダーになっていれば、RとEの全収率は100%近くになることが示された。他の条件にもよるが、周期サイクルncyc=100まで、繰り返し計算をするとよいことが分かった。

また、ここで未解決の問題は、なぜ、Total balanceが 10^{-16} のオーダーになるにもかかわらず、RとEの全収率が正確に100.00%にならないのか、ということである。簡単に、数値計算の精度が原因だということでのよいの

か？あるいは、100%には非常にゆっくりと収束していくと考えてよいのか？未解明のままである。

8. まとめ

擬似移動層クロマトグラフィーの設計のために、OCFEM（直交選点有限要素法）によって、間歇移動層モデルのプログラムを作成した。プログラムの信頼性は、計算プログラムで用いた数値計算手法の確実性と、2成分競争の間歇移動層モデルの確実性に依存している。

本論文では、数値計算手法であるOCFEMの精度上の問題を取り上げた。今回、問題となったことは、ラフィネートとエキストラクトの全収率が必ずしも100%とはなかったことが挙げられる。A、B成分の純度が最も良いGM II 1.00でラフィネートとエキストラクトをたした全収率はA成分98.7158%、B成分100.1696%となり100%とはなかったが。誤差として考えれば1.28%と0.17%であり、工学的に十分満足しているものと考えられる。一方で、各カラムにおける周期での収支（分布図にしてある：図－6～図－7）の全カラムを合計したTotal balance（表－6）は周期サイクル(ncyc)100で $10^{-6} \sim 10^{-12}$ であり、周期サイクル(ncyc)200では、 $10^{-11} \sim 10^{-16}$ のオーダーで、計算上の収支はとれていることになる。

ラフィネートとエキストラクトでの全収率が100%でないにもかかわらず、全カラムの収支がバランスを取っていることには疑問を感じるが、サイクル数を増やすことによって100%に近づいていることは確かであり、今回の間歇移動層モデルの計算では非常にゆっくり100%に収束しているものと考えられる。

謝辞：

この論文を書くにあたり、オルガノ株式会社岡田一夫氏にはいろいろなお意見をいただき参考になりました。ここに感謝申し上げます。

参考文献

- [1]橋本健治編著 クロマト分離工学 回分から疑似移動層操作へ、培風館
- [2]B.A.フィンレイソン：鷺津・山本・川井共訳：重み付き残差法と変分原理(1974)、培風館
- [3]大久保孝樹：移流拡散反応方程式の直交選点有限要素法による数学解析、計算工学講演会論文集 Vol.20 (2016年6月)
- [4]大久保孝樹：直交選点有限要素法(OCFEM)について－発展方向とポテンシャル－：計算工学講演会論文集 Vol.24(2019年5月)
- [5]大久保孝樹：クロマトグラフィーモデルの直交選点有限要素法による定式化と数値計算、2020年度応用数理学会講演集
- [6]大久保、岡田、高村、高村：回分クロマト分離モデルの直交選点有限要素法(OCFEM)による数値計算と精度の問題：計算工学講演会論文集 Vol.26 (2021年5月)

多点拘束法と重合メッシュ法の併用に関する基礎検討

Fundamental Study on Combined Use of Multi-Point Constrains and S-version Finite Element Method

山東 篤¹⁾, 石原 尚²⁾, 西川 周建²⁾,
Atsushi Sando, Nao Ishihara and Shuken Nishikawa

1) 博(工) 和歌山工業高等専門学校 知能機械工学科 教授
(〒644-0023 和歌山県御坊市名田野野島77, E-mail: sandou@wakayama-nct.ac.jp)
2) 和歌山工業高等専門学校 知能機械工学科

The purpose of this study is to propose s-version finite element mesh superposition method (s-FEM) using meshes bonded by the multi-point constraint (MPC) for improvement of the analytical accuracy. S-FEM is applied to improve the analytical accuracy of a nonconforming mesh modeled by MPC. A simple two-dimensional static analysis was performed by applying the proposed method. The analysis accuracy was improved by a superimposing mesh on the multi-point constraint mesh.

Key Words : S-version FEM, Multi-point constraint, Nonconforming mesh

1. はじめに

建築構造物と地盤の連成解析など、スケール差の大きい解析モデルのメッシュ生成は、構造要素間においてメッシュの整合性を保持する必要がある、モデル形状に合わせたその手作業は多大な手間となる。その解決方法の一つは不整合メッシュを使用できる計算理論を用いることであり、その一つに多点拘束法がある。多点拘束法は2つのメッシュを独立に生成し、両者の指定した辺（または面）に多点拘束条件を設定することでその辺と辺を結合し、結合境界で不整合な1つのメッシュとすることができる。ただし、結合境界のメッシュのサイズ比や物性値の差、多点拘束条件を定義する際に設定するマスター、スレーブの選び方が解析精度に悪影響を与える可能性が指摘されている^[1]。

著者らは、整合性を考慮することなく2つのメッシュを結合する方法として、はみ出しを有する重合メッシュ法を提案した^[2]。同手法はメッシュの重ね合わせる領域を十分に確保すれば、結合境界周辺の解析精度を高めつつ不整合メッシュを生成できる。一方、同手法による不整合メッシュ生成の手間は多点拘束法より多く、特に3次元問題ではそれが顕著に見られた。

本稿では、多点拘束法で結合したメッシュを用いた重合メッシュ法を試行し、多点拘束したメッシュにローカルメッシュを重ね合わせることによる解析精度の向上効果を調査する。

2. 多点拘束法と重合メッシュ法の併用

(1) 多点拘束法

本稿では文献^[3]で示された多点拘束法を2次元問題に用いる。分割数の異なる2つのメッシュ（マスター、スレー

ブ）を結合するにあたり、その結合境界に課される多点拘束条件式に含まれる係数行列は式(1)のようになる。

$$\mathbf{c} = \begin{bmatrix} \mathbf{c}_0 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{c}_0 \end{bmatrix} \quad (1)$$

$$\mathbf{c}_0 = \int_{\Gamma} \mathbf{N}_A^T(\mathbf{x}) \mathbf{N}_B(\mathbf{x}) d\Gamma \quad (2)$$

$\mathbf{N}_A(\mathbf{x})$ と $\mathbf{N}_B(\mathbf{x})$ は、式(3),(4)に示すように、それぞれスレーブ側の形状関数を格納した行ベクトルと、スレーブ側の形状関数と負符号のマスター側の形状関数を格納した行ベクトルである。

$$\mathbf{N}_A(\mathbf{x}) = [\mathbf{N}_S^1(\mathbf{x}) \quad \dots \quad \mathbf{N}_S^n(\mathbf{x})] \quad (3)$$

$$\mathbf{N}_B(\mathbf{x}) = [\mathbf{N}_S^1(\mathbf{x}) \quad \dots \quad \mathbf{N}_S^n(\mathbf{x}) \quad -\mathbf{N}_M^1(\mathbf{x}) \quad \dots \quad -\mathbf{N}_M^m(\mathbf{x})] \quad (4)$$

多点拘束問題の基礎方程式は、2つのメッシュの剛性マトリックス $\mathbf{K}$ とラグランジュ未定乗数 λ を含む式(5)のようになる。 $\mathbf{u}$, $\mathbf{f}$ はマスターおよびスレーブの節点変位ベクトルおよび荷重ベクトルである。

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{c}^T \\ \mathbf{c} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u} \\ \lambda \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{c}^T \\ \mathbf{c} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u} \\ \lambda \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{0} \end{Bmatrix} \quad (5)$$

(2) 重合メッシュ法

重合メッシュ法は解析モデル全体を表すグローバルモデルとその内部に重ね合わせたローカルモデルを定義し、重ね合わせた領域内の変位場を両モデルの変位の和で表す。これにより、重ね合わせた領域内のズームングによる解析精度の向上を図ることができる。重合メッシュ法の基礎方程式は式(6)のようになる。

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}^G & \mathbf{K}^{GL} \\ \mathbf{K}^{LG} & \mathbf{K}^L \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u}^G \\ \mathbf{u}^L \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{f}^G \\ \mathbf{f}^L \end{Bmatrix} \quad (6)$$

ここで、 $\mathbf{K}^G, \mathbf{K}^L$ は離散化されたグローバルメッシュと

ローカルメッシュの剛性マトリックス、 $\mathbf{K}^{GL}$ は両メッシュの相互作用を表す連成項である。各記号の上添字はグローバル、ローカルに関する諸量であることを意味する。

(3) 多点拘束法で結合したメッシュを用いた重合メッシュ法

本稿では、多点拘束法を適用したメッシュを重合メッシュ法のグローバルメッシュとする定式化を示す。この場合、(7)式のように(5)式の行列とベクトルをそれぞれ(6)式の $\mathbf{K}^G$ 、 $\mathbf{u}^G$ 、 $\mathbf{f}^G$ へ代入することになる。

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{C} & \mathbf{K}^{GL} \\ \mathbf{C} & \mathbf{O} & \mathbf{O} \\ \mathbf{K}^{LG} & \mathbf{O} & \mathbf{K}^L \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u} \\ \lambda \\ \mathbf{u}^L \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{f}^L \end{Bmatrix}$$

(7)

この方程式を解いて得られる多点拘束メッシュの節点変位 $\mathbf{u}$ を重合メッシュ法におけるグローバルメッシュの節点変位とみなし、位置を考慮してローカルメッシュの節点変位 $\mathbf{u}^L$ と足し合わせれば物理的な節点変位となる。

3. 数値解析例

図1のような1200mm×2400mmの2次元板のA上面へ均等に鉛直荷重60kNを作用させた静的解析を行い、多点拘束法、提案手法のFEM参照解に対するY方向節点変位のL2ノルムを比較する。この比較により、ローカルメッシュを重ね合わせることによる多点拘束モデルの解析精度への影響を調査する。

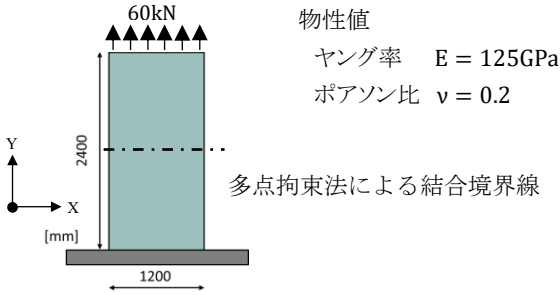


図1 解析モデル

提案手法による本解析モデルのモデリングには、図2(a)に示す3種類のメッシュを重ね合わせたモデルを用いる。板の下半分を表す2×2分割メッシュ(図2(b))と上半分を表す3×3分割メッシュ(図2(c))は多点拘束法を適用したグローバルメッシュのマスター、スレーブであり、ローカルメッシュは多点拘束した辺に沿って重ね合わせた微細メッシュ(図2(d))とする。多点拘束法は提案手法のグローバルメッシュを構成する2つのメッシュ(図2(b),(c))を結合して求めた解析結果とする。

比較対象のFEM参照解は、図3のように下半分を2×3分割して上半分を3×3分割した整合メッシュを用いた解析結果とする。

L2ノルムは板の左側面に沿った縦一列に並ぶ6節点と、結合境界線に沿った横一列に並ぶ4節点のY方向変位を用いて計算する。提案手法と多点拘束法で2つの節点が重な

っている結合境界線上では、スレーブ側の節点だけを用いることとする。

L2ノルムの一覧を表1に示す。左側面と結合境界線のいずれにおいても提案手法は多点拘束法よりL2ノルムの値が小さくなっている。このことから、多点拘束法で構築した不整合メッシュにローカルメッシュを重ね合わせることで解析精度の向上が期待できることが分かった。

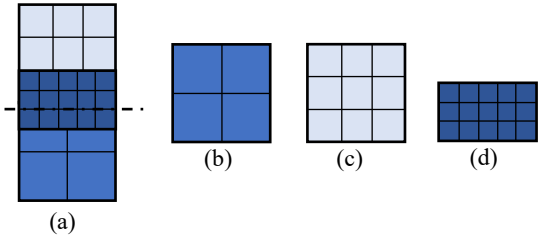


図2 提案手法、多点拘束法で用いたメッシュ

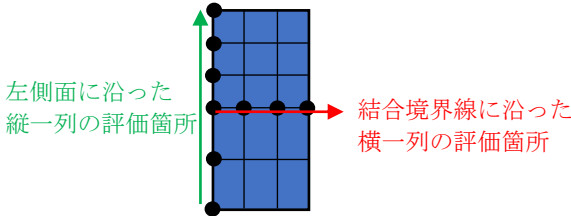


図3 FEM参照解のメッシュとL2ノルム評価箇所

表1 各評価箇所のL2ノルム

	多点拘束法	提案手法
左側面	1.4715E-03	1.1410E-03
結合境界線	2.4464E-04	1.4190E-04

4. まとめ

本稿では多点拘束法の解析精度向上のために多点拘束法と重合メッシュ法の併用を行うための定式化を示し、単純な解析例に適用した。その結果、多点拘束したグローバルメッシュにローカルメッシュを重ね合わせた解析モデルは、多点拘束法を単独で用いるより解析精度が向上することを確認した。

参考文献

[1] 坂敏秀, 山東篤, 高橋容之, 小磯利博, 山田和彦, 面
対面多点拘束問題における拘束力規定面の選択が応
力分布の精度に及ぼす影響, 第23回計算工学講演会
論文集, A-10-05, 2018.

[2] 山東篤, はみ出しを有する重合メッシュ法による構
造物・地盤一体モデルの効率的モデリング, 構造工学
論文集, Vol.68B, 2022.

[3] 山東篤, 坂敏秀, 高橋容之, 小磯利博, 三角形分割に
基づく数値積分を用いた三次元問題における面対面
の多点拘束法, 日本計算工学会論文集, 論文番号
20200016, 2020.

CIP Runge-Kutta 法による非線形波動方程式の数値解析

Numerical Analysis of Nonlinear Wave Equations by CIP Runge-Kutta Method

田中大毅¹⁾
Daiki TANAKA

¹⁾株式会社 NTT データ数理システム (〒160-0016 東京都新宿区信濃町 35 信濃町煉瓦館 1 階, E-mail: tanaka@msi.co.jp)

CIP scheme is a finite difference scheme for linear advection equations. Although it has higher-order accuracy, there are some difficulty to apply it to complicated equations. We will introduce a new finite difference scheme using the idea of CIP scheme. Our scheme has higher-order accuracy and is capable of wide application. We will apply the our scheme to nonlinear wave equations, the Burgers equation and KdV equation, and their numerical results will be shown.

Key Words : 差分法, CIP 法, Runge-Kutta 法, Burgers 方程式, KdV 方程式

1. はじめに

CIP 法とは, T. Yabe ら [1] によって考案された, 線形移流方程式 (linear advection equation)

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (1)$$

の初期値問題を解く高精度数値計算法の一つである. CIP 法は, 偏微分方程式 (1) の解が特性直線上では定数であることに着目し, 特性直線上の既知の時刻ステップでの未知関数 u の値を 3 次多項式で補間して求めることから, cubic interpolated pseudo-particle の頭文字をとって CIP と名づけられた [1]. しかしながら, その後の研究で補間に有理関数を用いるなど拡張が試みられ, 現在では constrained interpolation profile の頭文字であるとされている [2].

CIP 法は, 風上差分法や Lax-Wendroff スキームと比べて精度が高く, 不連続面において生じる振動が小さい上, 高精度でありながら風上差分法と同程度に依存領域を狭めることに成功している. しかしながら, 方程式 (1) の右辺が 0 でない場合や, 速度が定数でない場合にはそのまま適用することはできず, フラクショナルステップ法などの方法により移流項とそれ以外の項を個別に扱う必要があった. そこで, 本研究では CIP 法の定式化を見直してこれらの場合でも容易に適用できる数値計算法を考案し, 1 次元および多次元の線形移流方程式の初期値問題に対して従来の CIP 法と同程度の精度が得られることを確認した. 本講演では, 代表的な非線形波動方程式である Burgers 方程式, KdV 方程式の初期値問題に CIP Runge-Kutta 法を適用した数値計算結果を紹介する.

2. CIP 法

T. Yabe らの論文 [1] で提案されている 1 次元移流方程式に対する CIP 法について説明する. 方程式 (1) において, c は正の定数としておく. 方程式 (1) の両辺を x で微分すると, 次の式を得る.

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial u}{\partial x} + c \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (2)$$

ここで $v = \frac{\partial u}{\partial x}$ とおくと, v は u と同じ形の方程式を満たすことがわかる. CIP 法ではこの 2 つの方程式 (1)–(2) を連立させて解くこととなる.

$\Delta x, \Delta t$ をそれぞれ x 軸, t 軸方向の分割幅とし, $x_i = i\Delta x, t_n = n\Delta t$ により xt -平面上の格子点 (x_i, t_n) を定める. このとき, $\frac{c\Delta t}{\Delta x} \leq 1$ であれば, (x_i, t_{n+1}) を通る特性直線と直線 $t = t_n$ の交点 $(x_i - c\Delta t, t_n)$ は, (x_{i-1}, t_n) と (x_i, t_n) の間にある. 方程式 (1)–(2) の解は特性直線上で定数であるので, $(x_i - c\Delta t, t_n)$ における u, v の値を推定できれば, その値を (x_i, t_{n+1}) での u, v の推定値とすることができる. CIP 法では, u と v の (x_{i-1}, t_n) と (x_i, t_n) の値を用いてこの 2 点間を 3 次補間し, $(x_i - c\Delta t, t_n)$ での u, v の値を推定する.

補間多項式を $f(x) = a(x - x_{i-1})^3 + b(x - x_{i-1})^2 + v_{i-1}^n(x - x_{i-1}) + u_{i-1}^n$ とすると, 各係数は

$$a = \frac{(v_i^n + v_{i-1}^n)\Delta x - 2(u_i^n - u_{i-1}^n)}{\Delta x^3}$$

$$b = \frac{3(u_i^n - u_{i-1}^n) - (v_i^n + 2v_{i-1}^n)\Delta x}{\Delta x^2}$$

と求められる. ここで, $u_i^n = u(x_i, t_n)$ 等々である. この多項式 f を用いて, (x_i, t_{n+1}) での u の推定値を $f(x_i - c\Delta t)$, v の推定値を $f'(x_i - c\Delta t)$ とする.

このように, 特性直線法と多項式補間を用いた定式化により導入される点が, 従来の差分法とは異なる CIP 法の特徴である. しかしながら, 風上差分法は u の $(x_{i-1}, t_n), (x_i, t_n)$ の 2 点の値から線形補間により, Lax-Wendroff スキームは u の $(x_{i-1}, t_n), (x_i, t_n), (x_{i+1}, t_n)$ の 3 点の値から 2 次補間により $(x_i - c\Delta x, t_n)$ の値を推定する方法とみなすこともできる. 従って, CIP 法は風上差分法と Lax-Wendroff スキームの高精度化と見ることができる.

3. CIP Runge-Kutta 法

本節では提案手法である CIP Runge-Kutta 法について説明する.

まず, Taylor 法を用いた CIP 法の定式化を示す. Taylor

法は常微分方程式の数値解法の一つで、予め未知関数の高次の微分を計算しておき、Taylor 展開を用いて次のステップでの値を高精度に求める方法である。具体的には、

$$\frac{d}{dt}u = f(u)$$

という常微分方程式の両辺を t で繰り返し微分すると、

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dt^2}u &= f'(u)u' \\ \frac{d^3}{dt^3}u &= f''(u)u'u' + f'(u)u''\end{aligned}$$

となる。そこで、

$$u(t+\Delta t) = u(t) + \Delta t u'(t) + \frac{\Delta t^2}{2} u''(t) + \frac{\Delta t^3}{6} u'''(t) + o(\Delta t^4)$$

と Taylor 展開して u', u'', u''' に上で得られた値を代入すれば、 $u(t)$ から $u(t+\Delta t)$ を求めることができる。Taylor 法は次のステップでの値を計算するのに直前のステップでの値のみを用いる 1 段法であり、任意に精度を調節できるという利点があるが、一方で事前に方程式の高階の微分の計算しておかねばならず、その計算は方程式の形によっては煩雑になることがあり、実用上用いられることは少ない。

$f(x)$ を滑らかな関数、 $g(x) = f'(x)$ とする。このとき、 $f'(x), f''(x)$ と $f'''(x)$ は、 $f(x), f(x-\Delta x), g(x), g(x-\Delta x)$ を用いて

$$f'(x) = g(x) \quad (3)$$

$$\begin{aligned}f''(x) &= \frac{6}{\Delta x^2}(f(x-\Delta x) - f(x)) \\ &\quad + \frac{2}{\Delta x}(2g(x) + g(x-\Delta x)) + O(\Delta x^2)\end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned}f'''(x) &= \frac{12}{\Delta x^3}(f(x-\Delta x) - f(x)) \\ &\quad + \frac{6}{\Delta x^2}(g(x-\Delta x) - g(x)) + O(\Delta x)\end{aligned} \quad (5)$$

と近似できる。

(1)–(2) を t についての常微分方程式とみなして、(1) に 3 次、(2) に 2 次の Taylor 法を適用すれば、

$$\begin{aligned}u^{n+1} &= u^n - c\Delta x u_x^n + \frac{c^2\Delta x^2}{2}u_{xx}^n - \frac{c^3\Delta x^3}{6}u_{xxx}^n \\ v^{n+1} &= v^n - c\Delta x v_x^n + \frac{c^2\Delta x^2}{2}v_{xx}^n\end{aligned}$$

となる。計算の詳細は省略するが、CIP 法はこの式の空間微分を (3)–(5) の近似で置き換えたものになっている。先述のとおり、常微分方程式の数値解法として Taylor 法は使い勝手が悪く、解くべき方程式が (1)–(2) よりも複雑になった場合には高階の微分の計算はさらに煩雑になってしまう。

この煩雑さは、Taylor 法の代わりに Runge-Kutta 法を用いることで回避できる。そこで、CIP 法のアイデアと古典的 Runge-Kutta 法を組み合わせた CIP Runge-Kutta 法を提案する。(1)–(2) の空間微分を (3)–(4) の近似によ

り置き換えることで

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}u(t, x) &= -cv(t, x) \\ \frac{d}{dt}v(t, x) &= -c \left\{ \frac{6}{\Delta x^2}(u(t, x-\Delta x) - u(t, x)) \right. \\ &\quad \left. + \frac{2}{\Delta x}(2v(t, x) + v(t, x-\Delta x)) \right\}\end{aligned}$$

を得る。この式に古典的 Runge-Kutta 法を適用したものが CIP Runge-Kutta 法である。

4. 非線形波動方程式の数値計算結果

(1) Burgers 方程式

CIP Runge-Kutta 法を次の Burgers 方程式の初期値問題に適用する。

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (6)$$

Burgers 方程式 (6) の両辺を x で微分することで、次の式を得る。

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} = -v^2 + \nu \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \quad (7)$$

ここで、 $v = \frac{\partial u}{\partial x}$ である。

CIP Runge-Kutta 法を適用し、(6) と (7) を連立させて解くことを考える。左辺の x 微分の項は (3)–(4) により離散化し、右辺の 2 階微分の項については次の中心差分を適用する。

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x) = \frac{f(x+\Delta x) - 2f(x) + f(x-\Delta x))}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)$$

(7) の右辺にある $-v^2$ の項は、そのまま v_i^2 で置き換えると計算が不安定となるため、次のような近似を行う。

$$f(x)^2 = \frac{f(x+\Delta x) + f(x-\Delta x))}{2}f(x) + O(\Delta x^2)$$

このようにして x 微分を離散化すると、次の常微分方程式系が得られる。なお、この式は速度 u_i が正の場合の離散化であり、 $u_i < 0$ の場合には移流項の差分の向きを修正する必要があることに注意する。

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}u_i &= -u_i v_i + \nu \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} \\ \frac{d}{dt}v_i &= -u_i \left\{ \frac{6}{\Delta x^2}(u_{i-1} - u_i) + \frac{2}{\Delta x}(2v_i + v_{i-1}) \right\} \\ &\quad - \frac{v_{i+1} + v_{i-1}}{2}v_i + \nu \frac{v_{i+1} - 2v_i + v_{i-1}}{\Delta x^2}\end{aligned}$$

この連立常微分方程式に古典的 Runge-Kutta 法を適用したものが CIP Runge-Kutta 法である。

周期境界条件を課した閉区間 $[0, 1]$ 上で、初期値 $u(x, 0) = \sin(2\pi x)$ として解いた結果が図 1 である。

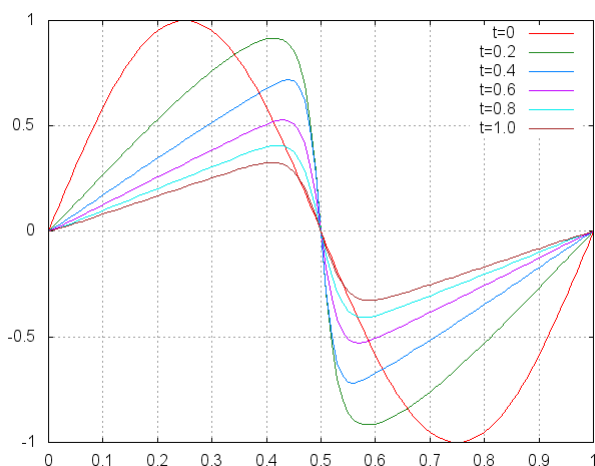


図-1 Burgers 方程式の数値計算結果

(2) 非粘性 Burgers 方程式の衝撃波解

(6) において $\nu = 0$ とした非粘性 Burgers 方程式は、不連続点において衝撃波と呼ばれる現象が起こることが知られている。 $\mathbb{R}$ 上で次の初期条件のもとに Burgers 方程式 (6) の初期値問題を考える。

$$u(0, x) = \begin{cases} u^- & (x < 0) \\ u^+ & (x \geq 0) \end{cases}$$

ただし、 $u^- > u^+ > 0$ とする。このとき、初期値問題には古典的な意味での解は存在しないが、弱い意味での解は存在して

$$u(t, x) = \begin{cases} u^- & \left(\frac{u^- + u^+}{2}t > x\right) \\ u^+ & \left(\frac{u^- + u^+}{2}t < x\right) \end{cases}$$

となる。すなわち、不連続点はその両側の平均の速度で伝播する。これは Rankine-Hugoniot 条件と呼ばれる。CIP Runge-Kutta 法による数値解においても、この条件が満たされているかを確認する。

$[0, 1]$ 上で、次の非粘性 Burgers 方程式の初期値境界値問題を考える。

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad t > 0, x \in (0, 1)$$

$$u(0, x) = \begin{cases} 0.8 & x < 0.2 \\ 0.2 & x \geq 0.2 \end{cases}$$

$$u(t, 0) = 0.8, \quad t > 0$$

この問題の厳密解は、

$$u(t, x) = \begin{cases} 0.8 & x < 0.2 + 0.5t \\ 0.2 & x > 0.2 + 0.5t \end{cases}$$

である。

Burgers 方程式の数値計算法としては Murman-Cole 法が知られている [3]。Murman-Cole 法は、Burgers 方程式が

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{u^2}{2} \right) = 0$$

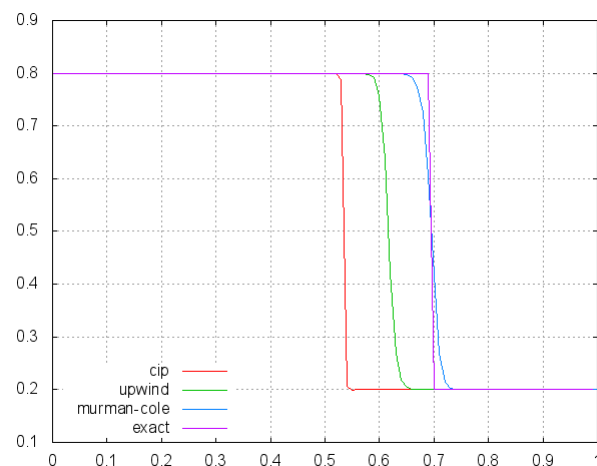


図-2 Burgers 方程式の衝撃波解の数値計算結果

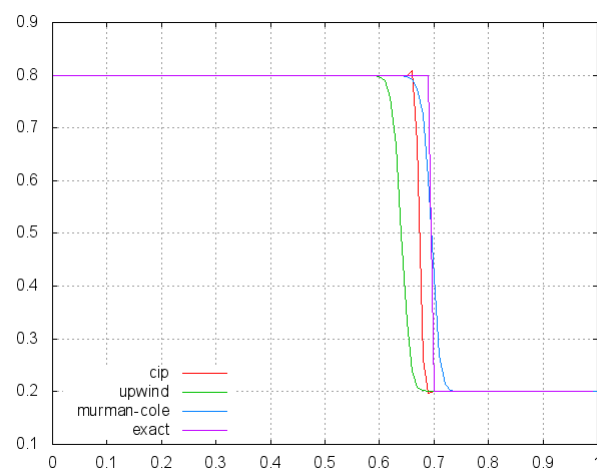


図-3 Burgers 方程式の衝撃波解の数値計算結果

と変形できることに着目し、この式を離散化する計算手法である。

図 2 は、風上差分法、CIP Runge-Kutta 法、Murman-Cole 法の数値計算結果である。Murman-Cole 法は衝撃波の伝播速度が厳密解にほぼ一致しているものの、風上差分法では伝播に遅れが生じており、CIP Runge-Kutta 法ではその遅れが拡大している。このような遅れは、伝播速度として $u(t, x)$ を参照していることにより引き起こされていると考えられる。Rankine-Hugoniot 条件を考慮すると、衝撃波の前後での速度は $\frac{1}{2}(u(t, x + \Delta x) + u(t, x - \Delta x))$ とすべきである。そこで、解くべき方程式を次のように修正して CIP Runge-Kutta 法を適用する。

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{u(t, x + \Delta x) + u(t, x - \Delta x)}{2} \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (8)$$

図 3 はこのような修正を行った場合の数値計算結果である。風上差分法では依然として衝撃波に大きな遅れが見られるが、CIP Runge-Kutta 法では遅れが小さくなっていることがわかる。また、風上差分法や Murman-Cole 法では衝撃波の形が崩れてしまっているが、CIP Runge-Kutta 法では衝撃波の形を保つことができています。

(3) KdV 方程式

最後に, KdV 方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \delta^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0 \quad (9)$$

の初期値問題に CIP Runge-Kutta 法を適用した結果を示す. KdV 方程式を x で微分すると,

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v^2 + \delta^2 \frac{\partial^3 v}{\partial x^3} = 0 \quad (10)$$

となる. ここで, $v = \frac{\partial u}{\partial x}$ である. u, v の三階微分の項については, 次の差分近似を用いる.

$$\begin{aligned} \frac{\partial^3 f}{\partial x^3}(x) = & \frac{1}{2\Delta x^3} \left(f(x+2\Delta x) - 2f(x+\Delta x) \right. \\ & \left. + 2f(x-\Delta x) - f(x-2\Delta x) \right) + O(\Delta x^2) \end{aligned}$$

この差分近似と移流項の CIP 差分を適用し, 時間方向に古典的 Runge-Kutta 法を適用する.

KdV 方程式の数値計算法としては, Zabusky-Kruskal[4] による差分スキームがよく知られている.

$$\begin{aligned} u_i^{n+1} = & u_i^{n-1} - \frac{\Delta t}{3\Delta x} (u_{i+1}^n + u_i^n + u_{i-1}^n)(u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) \\ & - \delta^2 \frac{\Delta t}{\Delta x^3} (u_{i+1}^n - 2u_{i+1}^n + 2u_{i-1}^n - u_{i-2}^n) \end{aligned} \quad (11)$$

ここでは, Zabusky-Kruskal の差分スキームと CIP Runge-Kutta 法の数値計算結果を比較する. [4] にならい, $\delta = 0.022$ とし, $[0, 2]$ 上で周期境界条件を課し, 初期条件は $u(0, x) = \cos \pi x$ とした. 図 4 は $t = 0.5$ の, 図 5 は $t = 1.0$ の Zabusky-Kruskal スキームと CIP Runge-Kutta 法の数値計算結果である. いずれの時刻においても, CIP Runge-Kutta 法は Zabusky-Kruskal スキームとほぼ一致した結果となっている.

参考文献

[1] H. Takewaki, A. Nishiguchi and T. Yabe, Cubin interpolated pseudo-particle method (CIP) for solving hyperbolic-type equations, J. Comput. Phys., **61** (1985), 261–268.

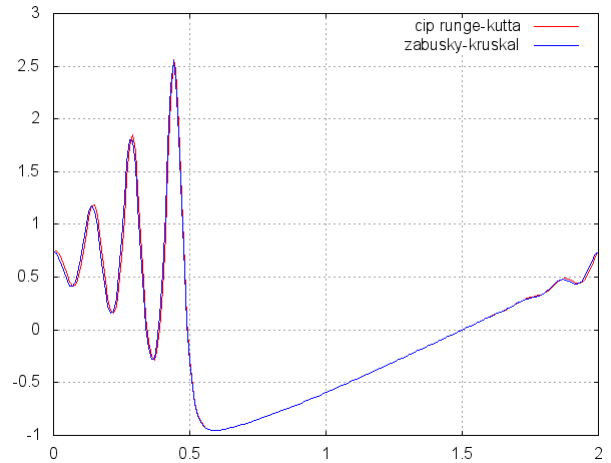


図-4 KdV 方程式の数値計算結果 $t = 0.5$

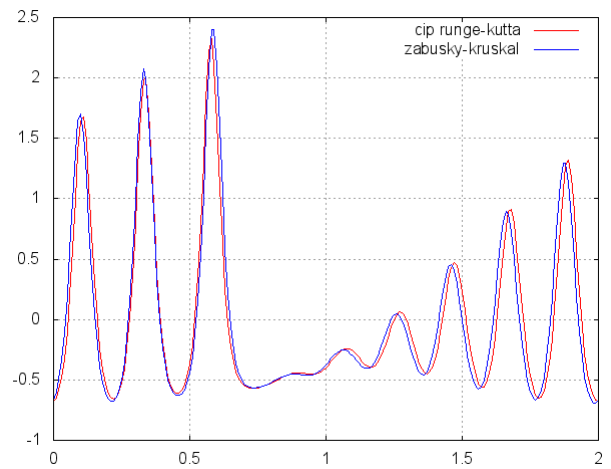


図-5 KdV 方程式の数値計算結果 $t = 1.0$

[2] T. Yabe, F. Xiao and T. Utsumi, Constrained interpolation profile method for multiphase analysis, J. Comput. Phys., **169** (2001), 556–593.
 [3] E. M. Murman, J. D. Cole, Calculation of plane steady transonic flows, AIAA Journal, **9** (1971), 114–121.
 [4] N. J. Zabusky, M. D. Kruskal, Interactions of “solitons” in a collisionless plasma and the recurrence of initial states, Phys. Rev. Lett., **15** (1965), 240–243.

9:45 AM - 10:00 AM (Thu. Jun 1, 2023 9:00 AM - 10:15 AM Room F)

[F-06-04] 厚み方向垂直応力を考慮した拡張 Kirchhoff–Love シェルによる
非圧縮薄肉構造のアイソジオメトリック解析

*谷口 靖憲¹、滝沢 研二¹、乙黒 雄斗²、Tezduyar Tayfun E.³ (1. 早稲田大学、2. 東京理科大学、3. Rice University)

相分離問題の粗視化のための particle dynamics model

A particle dynamics model for coarse-grained phase separation problems

降簾 大介¹⁾

Daisuke Furihata

¹⁾博 (工) 大阪大学 サイバーメディアセンター 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)

The Cahn-Hilliard equation describing phase separation phenomena is a nonlinear partial differential equation with a wide range of applications and is in high demand for numerical calculations, but stable and fast numerical calculations are somewhat difficult. It has been proven that this solution converges to the solution of the Hele-Shaw problem in the limit of one coefficient parameter to zero, which is mathematically very satisfactory as an order-reduction problem of the Cahn-Hilliard equation. However, the numerical computation of the Hele-Shaw problem is also difficult. Therefore, we observed the coarsening process of phase separation phenomena produced by the Cahn-Hilliard equation and subsequently considered a particle dynamics model that roughly reproduces the process.

Key Words : *phase separation problem, Cahn-Hilliard equation, Hele-Shaw problem, order-reduction problem, coarsening process*

1. はじめに

Cahn-Hilliard 方程式系統の問題 (相分離現象などのモデル方程式) の数値解析を考えたい。この問題は質量保存やエネルギー減少性といった大域的な性質を持っており、こうした性質を持つ問題は多い。これらの性質を保存する数値解析法である構造保存数値解法 (structure-preserving method) は、国内外で一定程度の発展を遂げており、例えば SciCADE という国際研究集会ではこのトピックに関するセッションが毎回開催される。structure-preserving method は、数値解の性能が優れていることが多く、ODE ではハミルトン系をベースに取り扱うことが一般的だが、PDE では変分構造を介して考えることができ、日本発の離散変分導関数法などがその例である。これらの手法は、微積分など「連続極限で定義されるオペレーター」を離散的に定義し一貫性を保証するアプローチであり、数学的に厳密であるが、計算量の大きさが難点である。

これらの現行の枠組みによる研究はすぐれて進展しているが、計算量によって対象問題の規模に制約がかかってしまう現状の打破は難しい。そのため、根本的に異なるアプローチも検討すべき段階と考える。そこで、Cahn-Hilliard 方程式による記述が代表的な相分離問題に対し、その時間発展の様相が初期状態 (局所性が強い、変化が高速) と中後期状態 (大域的効果がある、変化は大変に緩慢) とに大きく分かれることを鑑みて、この後者 (以降、粗視化過程 (coarsening process) とよぶ) を別モデル (particle dynamics model) にてシミュレーションすることを考える。

2. 相分離問題のモデル方程式 Cahn-Hilliard 方程式の既存の数値解法

Cahn-Hilliard 方程式に対する数値解法としては、まずは通常の解法である method of line がある。これは時間方向の離散化幅 Δt を小さくすれば一応使えるが、質量保存性、エネルギー減少性はときおり破れ、物理的にみてもおかしい数値解になりがちである。とくに長時間発展には不適である。構造保存数値解法としての離散変分導関数法 (差分法、有限要素法等いろいろあり、なかには線形スキームもある) は、長時間発展も考えると現在の本命といえる。とくに細かいパラメータ調整等もなくきちんと動作し、数値解の様子が物理的におかしいということもあまり無い。数値解の一意存在性や安定性が証明できるケースもある。ただし、多くの場合数値スキームが時間方向に陰的で、計算量は大きめとなる。多段化により線形スキームを設計する方法論もあるが、問題の非線形性が多項式の形状でないと使えず、また、次数が 4 次を越えると数値的な不安定性が強くなることなどの制限がある。このように、Cahn-Hilliard 方程式に対して妥当な数値解を高速に得るという方法論については充実しているとはまだ言い難い。

3. Cahn-Hilliard 方程式の order reduction

Cahn-Hilliard 方程式のようなモデル方程式の数値計算量を低減するための一つのアプローチに、問題の order reduction がある。つまり、解がなんらかの意味でほぼ同等であるが、問題の難易度が異なる別の問題に (数学的に) 置き換えることを考えるのである。

これについては、Alikakos らが Cahn-Hilliard 方程式中の係数である ϵ について $\epsilon \rightarrow 0$ のとき、この粗視化過程の相の境界面の挙動が領域境界面の挙動問題である Hele-Shaw 問題の解に収束することを証明してい

る [1]. Hele-Shaw 問題は領域境界の挙動を記述する方程式であるから、これは Cahn-Hilliard 方程式に対して数学的に問題対象の次元が 1 低く、文字通りの order reduction となっており、数学的にはほぼ完璧な成果である。しかし Hele-Shaw 問題の数値解析はトポロジー変化も含む厄介な問題であり、むしろ「Hele-Shaw 問題の数値解法として Cahn-Hilliard 方程式を解く方法」が提案される状態であるため、Alikakos らの成果を持って Cahn-Hilliard 方程式の数値計算の計算量の低減下をはかることはできないのが現状である。

4. 相分離問題の粗視化過程の荒いモデリングへ

数学的な order reduction の成果が計算量低減に寄与しないため、他のアプローチを取る必要がある。そこで、アプローチの原点として、Cahn-Hilliard 方程式を数学的な手法で order reduction するのはいったん止め、もともとの相分離現象における粗視化過程のみを再現する素朴なモデルを考えることにする。ただし、その際、少なくとも質量保存性を再現するように考えたい。というのも、そうしないと物理的にかなり奇妙な結果になりうるからである。

そして、Cahn-Hilliard 方程式によって得られる数値解によりこの粗視化過程を観察すると、まず、全体に「流体」現象のような挙動であることに気づく。また、分離した小さな領域同士に、主に距離に依存した引力的な相互作用がありそうなことも観察される。ただし、全体が流体的挙動であることを考慮すると、領域間に他の領域があるときにその挟まった領域を越えて力が働くモデルをたててしまうと物理的な意味で違和感がある。そこで、領域間に働く力は、間に領域が挟まっているかいないかによってきちんと変わるようなモデルが望ましい。観察と考察により上記のような知見を得られることから、粗視化過程に対して 以下のような particle モデルを考えることができる。

- $u \cong 1$ で半径が一定の球 (particle) の位置移動のみを記述する。
- particle は増減しないし、大きさも変わらないし、重ならない (後述する退席排除効果による)。これによって質量保存性を確保する。
- particle 同士は、互いの距離に応じて引き合うものとする。とりあえず逆二乗則に近いもの考える。
- ただし、particle が重ならないように、非常に近い場合は体積排除効果的な力が働くものとする。
- また、近くの particle を何重にも越えての力はあまり働かない (流体的挙動を考慮した緩和隣接関係)

これは例えば下記のようにしてモデル化する。

1. 空間上の particle をそれぞれ母点として空間を Voronoi 分割し、Voronoi 領域の隣接関係から作られる隣接行列を M_{ad} とする。
 2. モデルパラメータ p (正整数) に対し、緩和隣接行列を $M_p \stackrel{\text{def}}{=} (M_{ad})^p$ とし、 M_p によって隣接していると判断される particle 間でのみ力が発生するとする。
- 力と速度の関係については、Newton 力学ではなく、化学物質の易動度の概念にもとづいて particle に働

く力 $\propto$ particle の速度 とする。

- 流体抵抗を鑑みて、particle の速度には上限があるものとする (tanh 関数などを用いて実現)。

このモデリングを数式にすると以下のようなものになる。

$$\frac{d\mathbf{x}_i(t)}{dt} = V_c \left(\frac{\tanh(C_3 \tilde{\mathbf{v}}_i(t))}{C_3 \|\tilde{\mathbf{v}}_i(t)\|} \right) \tilde{\mathbf{v}}_i(t),$$

$$\tilde{\mathbf{v}}_i(t) = \sum_j \mathbf{f}_{ij}(t),$$

$$\mathbf{f}_{ij}(t) = \begin{cases} C_1 \frac{\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i}{\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|^3} & : \text{(条件 i)}, \\ -2C_1 \frac{\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i}{\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|^3} & : \text{(条件 ii)}, \\ 0 & : (M_p)_{ij} \text{ が偽}, \end{cases}$$

ただし V_c, C_1, C_3 は定数で、条件 i は $(M_p)_{ij}$ が真かつ $\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\| \geq r_{\text{cri}}$ であること、条件 ii は $(M_p)_{ij}$ が真かつ $\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\| < r_{\text{cri}}$ であることである。また、 $\mathbf{x}_i(t)$ は i -番目の particle, $M_p = (M_{ad})^p$ で p は正整数である。そして、 M_p の定義に含まれる計算には bool 代数を用いる。つまり、 $a \cdot b = a \text{ and } b, a + b = a \text{ or } b$ とする。 M_{ad} は Voronoi 領域の隣接関係に基づく隣接行列である。つまり、母点 $\mathbf{x}_i$ による Voronoi 領域 V_i と母点 $\mathbf{x}_j$ による Voronoi 領域 V_j とが隣接関係にあるときに $(M_{ad})_{ij}$ は真 (true) で、そうでないときは偽とする。

5. 数値計算例

図-1 に本モデルによる数値計算結果の例と、同等の初期値から計算を進めた Cahn-Hilliard 方程式の数値計算例を並べて図示する。あくまで観察による主観的な評価にはなるが、一定のモデリングはできているように思われる。講演時にはこの数値計算例のより詳細な解説も行いたい。

6. 現状と問題点

数値計算例などから、次のことが言えるように思われる。まず、良い点として、いくつかの「非常に遅いダイナミクス」が実際に particle モデルで再現されることが挙げられる。この挙動の遅さは、領域の移動や形状変化過程の重要な特徴の一つなので、この事実は大きな意味をもつと考えられる。また、領域の移動速度がそのサイズに依存することも、もとの問題の特徴をよく再現している。この particle モデルにはこうした効果を直接的には組み込んでいないため、この再現性は正直意外に感じるところである。また、これはこの particle モデルでは当然であるが、質量保存則が保たれていることも良い性質と言って良い。

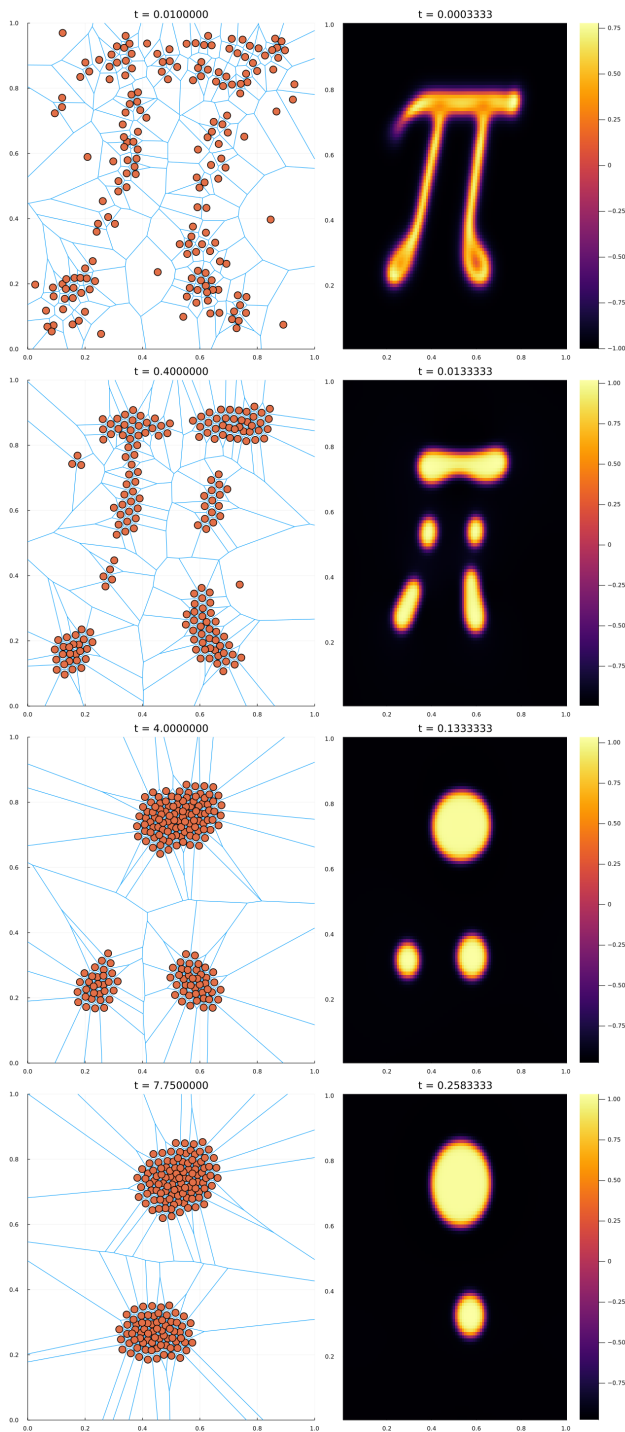


図-1 左: particle モデルによる数値解(青線は particle を母点とする Voronoi 領域の境界), 右: Cahn-Hilliard 方程式による数値解 (method of line による)

当然、問題も多く残っており、例えば、具体的なモデルを実装するために複数ある未知パラメータの値を決定しないといけない状況について、現状ではどのように決定すべきか、知見が得られていないという問題がある。これは今後の課題である。また、これはこのモデルでは当然であるが、領域の誕生・消滅を陽に見ることができない点が問題となりうることも考えられる。ただしこれは、領域の形状を考えなくて良い、すなわち、トポロジーの変化を追わなくて良いということであり、そうした意味ではむしろ利点と捉えるべきである。また、質量保存性は自然に再現できているが、Cahn-Hilliard 方程式の解がもつエネルギー減少性についてはこのモデルはどのような性質を持つのかが不明である。これについては particle の集合から領域境界を定義・計算するといったトポロジーの計算が必要になると思われるため容易ではない。また、この particle モデルは計算過程に Voronoi 分割を含むため 3 次元問題での計算量増大が懸念されるかもしれないが、これについては Dwyer らなどにより精力的に高速な計算方法の研究が進んでおり [2]、本質的に大きな懸念ではないと期待して良いと思われる。

参考文献

- [1] N. D. Alikakos, P. W. Bates and X. Chen, Convergence of the Cahn-Hilliard equation to the Hele-Shaw model, Arch. Rat. Mech. Anal. 128 (1994), 165–205.
- [2] R. A. Dwyer, A faster divide-and-conquer algorithm for constructing delaunay triangulations, Algorithmica 2 (1987), 137–151.
<https://doi.org/10.1007/BF01840356>

OS13 計算手法の数学解析と現実問題への適用

[F-07] OS13 計算手法の数学解析と現実問題への適用 (2)

座長:田上 大助(九州大学)

Thu. Jun 1, 2023 10:30 AM - 11:30 AM Room F (2F Conference Room 202B)

[F-07-01] 境界接触条件と非貫入条件を反映したフェーズフィールドき裂進展シミュレーション

*高石 武史¹、木村 正人² (1. 武蔵野大学、2. 金沢大学)

10:30 AM - 10:45 AM

[F-07-02] ある細胞接着タンパクの分解酵素を考慮した角層剥離モデル

*奥村 真善美¹、長山 雅晴²、小林 康明²、後藤 真紀子³、宮井 雅史³、中西 忍³、菅原 美郷³ (1. 甲南大学、2. 北海道大学、3. 株式会社資生堂)

10:45 AM - 11:00 AM

[F-07-03] グルコース, インスリンと C-ペプチドのダイナミクスを記述するコンパートメント体循環モデルのパラメータ推定

*GAO YUEYUAN¹、水藤 寛²、千葉 逸人²、長山 雅晴¹、片桐 秀樹² (1. 北海道大学、2. 東北大学)

11:00 AM - 11:15 AM

[F-07-04] カーネル法によるハミルトン系の学習と乱択化による高速化

*植田 大晴¹、松原 崇²、谷口 隆晴¹ (1. 神戸大学、2. 大阪大学)

11:15 AM - 11:30 AM

境界接触条件と非貫入条件を反映したフェーズフィールド どき裂進展シミュレーション

Phase-field crack growth simulation reflecting boundary contact and non-penetration conditions

高石武史¹⁾ 木村正人²⁾
Takeshi Takaishi and Masato Kimura

¹⁾博 (理) 武蔵野大学 工学部 教授 (〒 135-8181 東京都江東区有明三丁目 3 番 3 号, E-mail: taketaka@musashino-u.ac.jp)

²⁾博 (理) 金沢大学 理工研究域 教授 (〒 920-1192 石川県金沢市角間町, E-mail: mkimura@se.kanazawa-u.ac.jp)

A new model that can treat crack surface with non-penetration condition using phase field is proposed. The unilateral contact condition proposed by [4] can be easily included in our gradient flow type phase field model. This model can treat the contact condition of crack surface also crack growth in material.

Key Words : crack growth, contact surface, phase field, FEM

1. はじめに

筆者らはフェーズフィールドモデルを用いたエネルギー勾配流型のき裂進展モデルを導出し [1], このモデルを拡張することで熱膨張を伴うき裂進展や粘弾性体におけるき裂進展などさまざまな現象を表現できることを示してきた [1,2]. このモデルは Bourdin-Francfort-Marigo による材料の弾性とき裂表面エネルギーの近似式に基づいている [3]. フェーズフィールドを用いたき裂進展モデルは、き裂の形状が自動的に計算される、複雑なき裂形状を扱える、き裂進展に伴う計算領域の変更を伴わないなど、数値計算上の多くの利点を持っているが、き裂領域の弾性応力を除外することから、そのままではき裂面が再度近づいた場合には通り抜けてしまう。そこで、き裂面が再接触した場合でも現実に近いき裂進展を再現するために、Chamble-Conti-Francfort によって提案された unilateral contact condition [4] を筆者らのモデルに組み込んだ [2]. ここでは、裁断機やハサミでの裁断におけるき裂進展の様子を再現するために、非貫入モデルを用いることでどのようなき裂形状の変化が見られるか、またいくつかの境界条件におけるき裂形状の違いを FreeFEM [5] を用いた数値シミュレーションで調べた。

2. モデル方程式

ここでは、 d -次元弾性体におけるき裂進展について考える。弾性体をき裂を含む有界な領域 $\Omega \subset \mathbf{R}^d$ として考え、物体の変位を $u \in \mathbf{R}^d$ とする。ここで、き裂を表現するフェーズフィールドとして、き裂領域で 1 き裂のない領域で 0 となるような連続関数 $z \in [0, 1]$ を考える。B-F-M の近似エネルギーの勾配流として筆者ら

の導出したき裂進展モデルは次のように書ける [1,2]:

$$\begin{cases} -\operatorname{div}((1-z)^2 \sigma[u]) = f(x, t) \\ \alpha_z \frac{\partial z}{\partial t} = \left(\epsilon \operatorname{div}(\gamma(x) \nabla z) - \frac{\gamma(x)}{\epsilon} z + \sigma[u] : e[u](1-z) \right)_+ \end{cases} \quad (1)$$

ここで、 $(a)_+ = \max(a, 0)$ で、 $e[u] = (\nabla u + \nabla u^T)/2$ は歪みテンソル、 $\sigma[u]$ は応力テンソルである。また、第 1 式において、計算領域の外部境界 $\gamma = \partial\Omega$ において、ディリクレ境界 Γ_D の変位は $g(x, t)$ で与えられ、計算領域におけるそれ以外の外部境界はノイマン境界 $\Gamma_N = \Gamma \setminus \Gamma_D$ とする。

このモデルでは、フェーズフィールドを設定することで系全体の弾性エネルギーからき裂領域の寄与を除外しているため、開口き裂の場合には効率よくき裂進展を再現できるが、変形によりき裂面が再度接触する場合には対向面の材料に応力無しで貫入してしまう。そこで、Chamble-Conti-Francfort によって提案された unilateral contact condition [4] をこのモデルに組み込み、き裂面の非貫入条件を満たす解を求めるようにした。 $\bar{e}[u] := e[u] - \frac{1}{d}(\operatorname{div} u)I$ とすると、非貫入の条件を用いた応力は unilateral contact condition から $\sigma[u] = \beta(\operatorname{div} u)_+ I - \beta(\operatorname{div} u)_- I + 2\mu \bar{e}[u]$ と表すことができる ($(\operatorname{div} u)_- = -(\operatorname{div} u)_+$, $\beta := \lambda + 2\mu/d$)。従って、非貫入条件を満たす勾配流モデルは次のように書くことができる [2]:

$$\begin{cases} -\operatorname{div}((1-z)^2 \bar{\sigma}^+[u]) = f(x, t) \\ \alpha_z \frac{\partial z}{\partial t} = \left(\epsilon \operatorname{div}(\gamma(x) \nabla z) - \frac{\gamma(x)}{\epsilon} z + (\beta(\operatorname{div} u)_+^2 + 2\mu \bar{e}[u]^2)(1-z) \right)_+ \end{cases} \quad (2)$$

3. シミュレーション結果

初期き裂を持つ 2 次元弾性材料に対して、上下からせん断破壊を誘発する外部接触面が移動する際のき裂進展

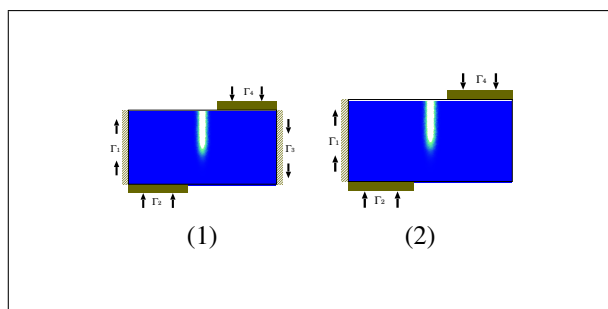


図-1 (1) 左右 ($\Gamma_{1,3}$) をディリクレ境界とした場合と (2) 左のみ (Γ_1) ディリクレ境界とした場合. 上下の境界 $\Gamma_{2,4}$ は外部接触境界とする.

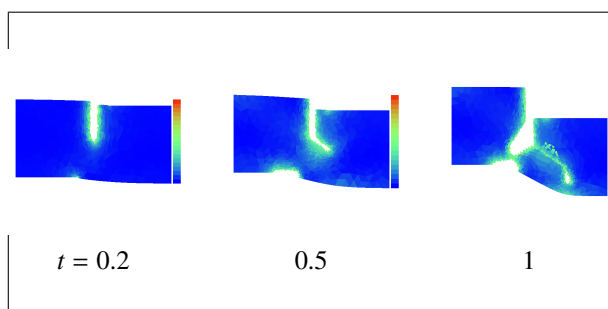


図-2 勾配流型モデル (1) での裁断シミュレーション結果

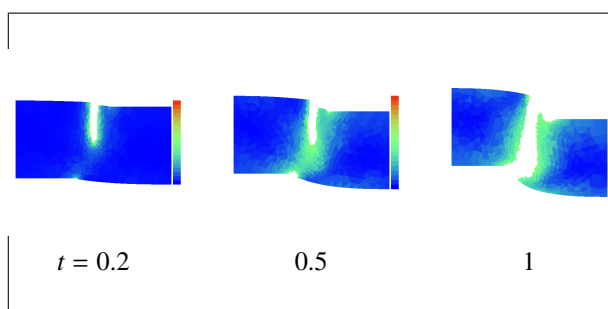


図-3 非貫入勾配流型モデル (2) での裁断シミュレーション結果

について調べた. 外部接触条件を用いた数値シミュレーションでは FreeFEM の IPOPT パッケージを用いた.

最初に, 外部接触境界 Γ_2, Γ_4 と, ディリクレ境界 Γ_1, Γ_3 を持ち (図-1(1)), $\Gamma_{1,2}, \Gamma_{3,4}$ はそれぞれ $u = 0.2t, u = -0.2t$ で変化させ, 非貫入条件を持たないモデル (1) と非貫入条件を持つモデル 2 での数値シミュレーションを行った. 非貫入条件を持たないモデルでは, き裂が進展する過程で, 材料の変形によりき裂面が再度接触し, き裂面の左右の材料が入れ替わるという非物理的な結果が起きてしまう (図-2). 一方, 非貫入条件を持つモデルでは, 非物理的な結果は生じず, 滑らかなき裂形状となっていることがわかる (図-3).

次に, 非貫入条件を持つモデルを用いて, 左側のみをディリクレ境界, 右側を自由境界として数値シミュ

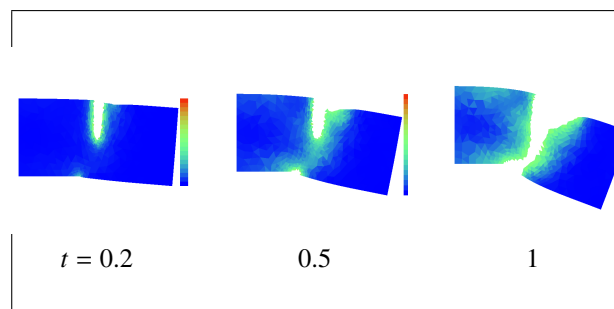


図-4 右側を自由境界とした場合の, 非貫入勾配流型モデル (2) での裁断シミュレーション結果

レーションを行った (図-1(2)). 材料の右側半分が大きく変形することで, やや傾いたき裂となることがわかる (図-4).

4. まとめ

破壊を伴う現象では, 複雑な外部境界条件や, き裂面の接触により, き裂形状が決まる場合が多く見られる. 非貫入条件を持つモデルで数値シミュレーションを行うことで, ハサミのように上下から押された断裂する場合において, き裂進展の過程で変形によりき裂面が接触することでき裂形状が決まっていることがわかった.

き裂の表現にフェーズフィールドを用いることで非貫入条件を設定したシミュレーションが行えることから, 複雑な接触面を持つ材料の変形をフェーズフィールドで表現できることも期待される. また, 接触面での摩擦がモデル化できると, より現実的な数値シミュレーションが可能となると考えられる.

謝辞: 本研究は JSPS 科研費 JP21K03356 の助成を受けて行われた.

参考文献

- [1] Takaishi, T. and Kimura, M.: Phase field model for mode III crack growth, *Kybernetika*, Vol.45, pp.605-614, 2009.
- [2] Kimura, M., Takaishi, T., Alfat, S. et al.: Irreversible phase field models for crack growth in industrial applications: thermal stress, viscoelasticity, hydrogen embrittlement, *SN Appl. Sci.*, Vol.3, 781, 2021.
- [3] Bourdin, B., Francfort, G. A. and Marigo, J.-J.: Numerical experiments in revisited brittle fracture, *J. Mech. Phys. Solids*, Vol.48, pp.97-826, 2000.
- [4] Chambolle, A., Conti, S. and Francfort, G. A.: Approximation of a brittle fracture energy with a constraint of non-interpenetration, *Arch. Ration. Mech. Anal.*, Vol.228, pp.867-889, 2018.
- [5] Hecht, F.: New development in freefem++, *J. Numer. Math.*, Vol.20, pp.251-265, 2012.

10:45 AM - 11:00 AM (Thu. Jun 1, 2023 10:30 AM - 11:30 AM Room F)

[F-07-02] ある細胞接着タンパクの分解酵素を考慮した角層剥離モデル

*奥村 真善美¹、長山 雅晴²、小林 康明²、後藤 真紀子³、宮井 雅史³、中西 忍³、菅原 美郷³ (1. 甲南大学、2. 北海道大学、3. 株式会社資生堂)

グルコース、インスリンとC-ペプチドのダイナミクスを記述する コンパートメント体循環モデルのパラメータ推定

Yueyuan Gao ¹⁾, Hiroshi Suito ²⁾, Hayato Chiba ³⁾, Masaharu Nagayama ⁴⁾
and Hideki Katagiri ⁵⁾

¹⁾ Specially appointed assistant professor (Hokkaido University, RIES, Kita 12, Nishi 7, Kita-ku, Sapporo Hokkaido 060-0812, Japan,
E-mail: yueyuan.gao@es.hokudai.ac.jp)

²⁾ Professor (Tohoku University, AIMR, 2-1-1 Katahira, Aoba-ku, Sendai, 980-8577 Japan, E-mail: hiroshi.suito@tohoku.ac.jp)

³⁾ Professor (Tohoku University, AIMR, 2-1-1 Katahira, Aoba-ku, Sendai, 980-8577 Japan, E-mail: hchiba@tohoku.ac.jp)

⁴⁾ Professor (Hokkaido University, RIES, Kita 12, Nishi 7, Kita-ku, Sapporo Hokkaido 060-0812, Japan,
E-mail: nagayama@es.hokudai.ac.jp)

⁵⁾ Professor (Tohoku University, Graduate School of Medicine, 2-1 Seiryō-machi, Aoba-ku, Sendai, Miyagi 980-8574 Japan,
E-mail: katagiri@med.tohoku.ac.jp)

In recent years, the number of diabetic patients has been rapidly increasing along with changes in lifestyle and social environment. Once the diabetes is developed, it is difficult to return back to the healthy state, and thus the establishment of a mathematical understanding of human glucose metabolism, so as to prevent the diabetes from developing, has become an important and urgent issue. In this study, we aim at constructing mathematical modeling for the human glucose metabolism system to attain a mathematical understanding of the mechanism of blood glucose homeostasis.

In this presentation, we first present the construction of a compartmental model of systemic circulation describing Glucose, Insulin, and C-peptide dynamics. Then, by using Oral Glucose Tolerance Test (OGTT) data from healthy subjects, and the Markov Chain Monte-Carlo method we perform the parameter estimation for this compartmental model. The results obtained from the model are validated by the medical facts, such as the half-life times and the insulin hepatic rate. And we finally discuss some future directions, such as using the data of the mouse of different diets.

Key Words : Glucose metabolism, Mathematical modeling, Parameter estimation

1. INTRODUCTION

Many mathematical models have been developed to better understand the mechanisms of the glucose-insulin regulatory system. [1] gives an overview of some of the mathematical models for the glucose-insulin regulatory system in relation to diabetes. In 2021, Kurata [2] proposed the most comprehensive, largest, and highly predictive model of the whole-body metabolism. The model consists of 202 ordinary differential equations with 217 reaction rates and 1140 kinetic parameter constants which makes it laborious for parameter estimation. [3] presents Bayesian analysis of a model for glucose insulin dynamics during OGTT, however the model does not consider the detail functions of different organs nor contain the dynamic of C-peptide and they have not considered the medical validations such as insulin and C-peptide's half-life times.

In our work, we consider the blood circulation among 9 organs: Heart, Hepatic, Pancreas, Mesentery, Renal, Upper arm, Lower limbs, Brain and Stomach. And we use the letters T, H, P, M, R, U, L, B and S to represent them respectively. The blood flux goes out from the heart and

transport glucose, insulin and C-peptide into hepatic, pancreas, mesentery, renal, upper arm, lower limbs, brain and stomach through artery. The blood then flows out of each organ and transport the 3 substances back towards the heart through the vein. The blood flows out of renal, upper arms, lower limbs and brain will flow back directly to the heart; meanwhile the blood flowing out of pancreas, mesentery and stomach will first gather together at the portal vein, then flow into the hepatic, and flow out of hepatic to go back to the heart.

In each organ, we apply the following conservation principle for the moles of Glucose, Insulin and C-peptide respectively:

$$\begin{aligned} & \text{change of the moles per unit time} \\ &= \text{the moles taken in by inflow} \\ & \quad - \text{the moles taken away by outflow} \quad (1) \\ & \quad + \text{secretion or digestion} \\ & \quad - \text{consumption or excretion.} \end{aligned}$$

The secretion/digestion and consumption/excretion are based on the following facts.

1. The C-peptide is excreted from the renal.
2. The insulin is cleared in hepatic and in the upper and lower limbs.
3. The secretion of C-peptide and of insulin is at the ratio 1:1 with respect to the moles in pancreas; and is intrigued by the nerves and by the increment of the glucose in pancreas.
4. The glucose is taken from the mouth, absorbed from the mesentery and consumed in hepatic, pancreas and brain.
5. When the concentration of glucose in blood vessels is high, the glucose will be stored in the hepatocyte in the form of glycogen; and when the concentration is low in blood vessels of the hepatic, the hepatocyte will transfer glycogen to glucose into the blood vessels.
6. In upper arms and lower limbs, the consumed insulin stimulates the protein GLUT4 who transports glucose across the plasma membrane, which results in the decrease of the concentration of the glucose in the blood.

2. The mathematical model

Based on the blood circulation and the upper facts, we construct the mathematical model. We denote by C_i , the concentration of the C-peptide in the blood vessels of the organ i , where $i \in \{T, H, P, M, R, U, L, B, S\}$, and we denote by I_i and G_i for the concentrations of insulin and glucose respectively. Let $|V_i|$ to be the volume of the blood vessels and Q_i to be flux through the organ i , we denote by C_{PV} the concentration of the C-peptide at the portal vein. We then compute the concentration of C-peptide at the heart at the portal vein by the following formula

$$C_T = \frac{(Q_P + Q_M + Q_S + Q_H)C_H + \sum_{i=\{U,B,L,R\}} Q_i C_i}{Q_U + Q_B + Q_L + Q_R + Q_P + Q_M + Q_S + Q_H}$$

and

$$C_{PV} = \frac{Q_P C_P + Q_M C_M + Q_S C_S}{Q_P + Q_M + Q_S}.$$

I_T , G_T and I_{PV} , G_{PV} are computed in a similar way.

$$I_T = \frac{(Q_P + Q_M + Q_S + Q_H)I_H + \sum_{i=\{U,B,L,R\}} Q_i I_i}{Q_U + Q_B + Q_L + Q_R + Q_P + Q_M + Q_S + Q_H}$$

and

$$I_{PV} = \frac{Q_P I_P + Q_M I_M + Q_S I_S}{Q_P + Q_M + Q_S}.$$

And

$$G_T = \frac{(Q_P + Q_M + Q_S + Q_H)G_H + \sum_{i=\{U,B,L,R\}} Q_i G_i}{Q_U + Q_B + Q_L + Q_R + Q_P + Q_M + Q_S + Q_H}$$

and

$$G_{PV} = \frac{Q_P G_P + Q_M G_M + Q_S G_S}{Q_P + Q_M + Q_S}.$$

I_T , G_T and I_{PV} We present the model on the dynamics of

C-peptide.

$$\left\{ \begin{array}{l} |V_H| \frac{dC_H}{dt} = Q_H C_T + Q_{PV} C_{PV} - Q_V C_H \\ |V_P| \frac{dC_P}{dt} = Q_P C_T - Q_P C_P + |V_P| F_{\text{Insulin}}(S_{\text{in}}, G_P) C_{PC} \\ |V_M| \frac{dC_M}{dt} = Q_M C_T - Q_M C_M \\ |V_R| \frac{dC_R}{dt} = Q_R C_T - Q_R C_R - |V_R| k_{CR3} \frac{C_R^{m_{c1}}}{\gamma_{c1}^{m_{c1}} + C_R^{m_{c1}}} \\ |V_U| \frac{dC_U}{dt} = Q_U C_T - Q_U C_U \\ |V_L| \frac{dC_L}{dt} = Q_L C_T - Q_L C_L \\ |V_B| \frac{dC_B}{dt} = Q_B C_T - Q_B C_B \\ |V_S| \frac{dC_S}{dt} = Q_S C_T - Q_S C_S. \end{array} \right. \quad (2)$$

where, the secretion of C peptide is given as

$$\frac{d}{dt} C_{PC} = -F_{\text{Insulin}}(S_{\text{in}}, G_P) C_{PC} + k_{\beta} C_{PC}^0, \quad (3)$$

where $F_{\text{Insulin}}(S_{\text{in}}, G_P) = k_E \frac{S_{\text{in}}}{(\gamma_S) + S_{\text{in}}} + k_{\text{GIP}} \frac{G_P}{\gamma_G + G_P} + k_{\text{out}}$. The first term represents the secretion rate stimulated when the absorptive epithelial cell of mesentery sense the intake of glucose; the second term represents the secretion rate stimulated by the increasement of glucose concentration in pancreas' blood vessels; and the third term is the basic secretion rate. Using the same idea, we construct the model on the dynamics of insulin

$$\left\{ \begin{array}{l} |V_H| \frac{dI_H}{dt} = Q_H I_T + Q_{PV} I_{PV} - Q_V I_H \\ \quad - |V_H| k_{IH1} \frac{I_H^{m_{i1}}}{\gamma_{i1}^{m_{i1}} + I_H^{m_{i1}}} \\ |V_P| \frac{dI_P}{dt} = Q_P I_T - Q_P I_P + |V_P| F_{\text{Insulin}}(S_{\text{in}}, G_P) I_{PC} \\ |V_M| \frac{dI_M}{dt} = Q_M I_T - Q_M I_M \\ |V_R| \frac{dI_R}{dt} = Q_R I_T - Q_R I_R \\ |V_U| \frac{dI_U}{dt} = Q_U I_T - Q_U I_U - |V_U| k_{IU} \frac{I_U^{m_{i2}}}{\gamma_{i2}^{m_{i2}} + I_U^{m_{i2}}} \\ |V_L| \frac{dI_L}{dt} = Q_L I_T - Q_L I_L - |V_L| k_{IL} \frac{I_L^{m_{i3}}}{\gamma_{i3}^{m_{i3}} + I_L^{m_{i3}}} \\ |V_B| \frac{dI_B}{dt} = Q_B I_T - Q_B I_B \\ |V_S| \frac{dI_S}{dt} = Q_S I_T - Q_S I_S. \end{array} \right. \quad (4)$$

We remark that following the fact 3, we have $C_{PC} = I_{PC}$.

Next, we present the model for the glucose

$$\left\{ \begin{array}{l} |V_H| \frac{dG_H}{dt} = Q_H G_T + Q_{PV} G_{PV} - Q_V G_H \\ - |V_H| k_{GH1} \frac{G_H^{m_{g1}}}{\gamma_{g1} + G_H^{m_{g1}}} + |V_H| k_{GH2} \frac{G_{HC}^{m_{hc1}}}{\gamma_{hc1} + G_{HC}^{m_{hc1}}} \\ |V_P| \frac{dG_P}{dt} = Q_P G_T - Q_P G_P - |V_P| k_{GLUT2} \frac{G_P}{\gamma_{GP} + G_P} \\ |V_M| \frac{dG_M}{dt} = Q_M G_T - Q_M G_M + k_{gm} |V_M| \frac{g_m^2}{\gamma_g^2 + g_m^2} \\ |V_R| \frac{dG_R}{dt} = Q_R G_T - Q_R G_R \\ |V_U| \frac{dG_U}{dt} = Q_U G_T - Q_U G_U - k_{GU} G_{4U} |V_U| G_U \\ |V_L| \frac{dG_L}{dt} = Q_L G_T - Q_L G_L - k_{GL} G_{4L} |V_L| G_L \\ |V_B| \frac{dG_B}{dt} = Q_B G_T - Q_B G_B - k_{GB} |V_B| G_B \\ |V_S| \frac{dG_S}{dt} = Q_S G_T - Q_S G_S. \end{array} \right. \quad (5)$$

We then present the model describing the glucose digestion, fact 4, which is given as follows,

$$\left\{ \begin{array}{l} f(t) = \frac{1}{1 + \exp\left(-2\frac{t-T_1}{\delta}\right)} \frac{1}{1 + \exp\left(-2\frac{T_2-t}{\delta}\right)} \\ S(t) = f(t) \times \frac{\text{Mass of glucose[g]}}{\text{Water volume[dL]}} \times 55.5 [\text{mmol/L}] \\ |V_{in}| \frac{d}{dt} S_{in} = Q_{in} S(t) - Q_{SM} S_{in} \\ |V_M| \frac{d}{dt} g_m = Q_{SM} S_{in} - k_{gm} |V_M| \frac{g_m^2}{\gamma_g^2 + g_m^2}, \end{array} \right. \quad (6)$$

where T_1 is the time moment the testee starts to drink the water, which will be set to 0, and T_2 is the time finish drinking. Q_{in} is the water flux from mouth to the mesentery, $S(t)$ is the concentration of glucose at time t in to the mouth; S_{in} is the concentration of glucose absorbed by the absorptive epithelial cell; g_m is the glucose in the blood vessels of the mesentery and $k_{gm} |V_M| \frac{g_m^2}{\gamma_g^2 + g_m^2}$ is the glucose in the blood vessel of the mesentery which participated in the circulation.

The glucose dynamics in the hepatocyte considering the phosphorylation and the tricarboxylic acid cycle are given

by

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dG_{HC}}{dt} = k_{GH1} \frac{G_H^{m_{g1}}}{\gamma_{g1} + G_H^{m_{g1}}} - k_{GH2} \frac{G_{HC}^{m_{hc1}}}{\gamma_{hc1} + G_{HC}^{m_{hc1}}} \\ - k_{HC1} \frac{G_{HC}}{\gamma_{hc2} + G_{HC}} I_{HC} \\ + k_{HC2} \frac{G_{6P}}{\gamma_{hc3} + G_{6P}} \frac{\gamma_{he2}^2}{\gamma_{he2}^2 + G_H^2} \\ \frac{dG_{6P}}{dt} = k_{HC1} \frac{G_{HC}}{\gamma_{hc2} + G_{HC}} I_{HC} \\ - k_{HC2} \frac{G_{6P}}{\gamma_{hc3} + G_{6P}} \frac{\gamma_{he2}^2}{\gamma_{he2}^2 + G_H^2} \\ - k_{TCA} \frac{G_{6P}}{\gamma_{TCA} + G_{6P}} + k_{gly} (G_{LY}^* - G_{6P}), \end{array} \right. \quad (7)$$

where I_{HC} satisfies

$$\frac{dI_{HC}}{dt} = k_{IH1} \frac{I_H^{m_{i1}}}{\gamma_{m_{i1}} + I_H^{m_{i1}}} - k_{h3} I_{HC}. \quad (8)$$

The glucose and insulin dynamics, including the glucose transporter 4, in the upper and lower limbs for the fact 6 are given as

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dG_{4U}}{dt} = k_{G4U} (G_{4U}^{\max} - G_{4U}) I_{UC} - k_{dU} G_{4U} \\ \frac{dG_{4L}}{dt} = k_{G4L} (G_{4L}^{\max} - G_{4L}) I_{LC} - k_{dL} G_{4L} \end{array} \right. \quad (9)$$

where I_{UC} and I_{LC} satisfy

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt} I_{UC} = k_{IU} \frac{I_U^2}{\gamma_{u2}^2 + I_U^2} - k_{u2} I_{UC} \\ \frac{d}{dt} I_{LC} = k_{IL} \frac{I_L^2}{\gamma_{l2}^2 + I_L^2} - k_{l2} I_{LC}. \end{array} \right. \quad (10)$$

(1) The parameter estimation

We apply clinical data of the oral glucose tolerance test (OGTT) to perform the parameter estimation for the total system consists of the models (2) – (10).

In the OGTT, the healthy testee is asked to take 15.1 grams of glucose dissolved in 100 mL water within 3 minutes; and the concentration of glucose, insulin, and C-peptide concentrations in blood vessel of upper arm vein for every 15 minutes till time length of two hours will be taken as data.

The model contains 34 equations and about 40 parameters, and we apply Markov Chain Monte-Carlo (MCMC) method [5] to search for the parameters which minimize the error between the simulation results and the data.

(2) The medical validations

Once we obtained the estimated values parameters, we will computed the half-life time of insulin and of C-peptide and the hepatic insulin clearance rate to give the validation of the model in the medical sense.

The half-life time

We compute the total moles of insulin and of C-peptide respectively, such that

$$I_{\text{all}}(t) = \sum_i |V_i| I_i(t), \text{ and } C_{\text{all}}(t) = \sum_i |V_i| C_i(t),$$

where $i \in \{H, P, M, R, U, L, B, S\}$, and $I_{\text{all}}(0)$ and $C_{\text{all}}(0)$ is the value of insulin and C-peptide data at time $t = 0$ respectively. The half-life time $t_{1/2}$ of insulin is the time that $I_{\text{all}}(t_{1/2}) = 0.5 \times I_{\text{all}}(0)$ under the assumption that there is no secretion of insulin. And we define the half-life time of C-peptide correspondingly. We recall that as a medical fact, $t_{1/2}$ is about 4 to 10 minutes for insulin and $t_{1/2} \approx 30$ minutes for C-peptide.

The insulin hepatic clearance

While circulating in the body, the insulin will be cleared by hepatic and also by the upper arm and lower limbs. The ratio of the hepatic clearance is an important index of reflecting the hepatic function.

Insulin Hepatic Clearance rate (%)

$$= \frac{\text{Insulin cleared by hepatic}}{\text{Insulin cleared by hepatic and by upper and lower limbs}}$$

$$= \frac{k_{IH1} \frac{I_H^{m_{11}}}{\gamma_{i1}^{m_{11}} + I_H^{m_{h1}}} + k_{IU} \frac{I_U^{m_{12}}}{\gamma_{i2}^{m_{12}} + I_U^{m_{12}}} + k_{IL} \frac{I_L^{m_{13}}}{\gamma_{i3}^{m_{13}} + I_L^{m_{13}}}}{k_{IH1} \frac{I_H^{m_{11}}}{\gamma_{i1}^{m_{11}} + I_H^{m_{h1}}} + k_{IU} \frac{I_U^{m_{12}}}{\gamma_{i2}^{m_{12}} + I_U^{m_{12}}} + k_{IL} \frac{I_L^{m_{13}}}{\gamma_{i3}^{m_{13}} + I_L^{m_{13}}}}.$$

As a medical fact, this rate shall be within 30% ~ 80%.

3. Numerical results

We present the volume size of the blood vessels and the flux of blood through each organ. We apply the values in Table 1 [4].

Table 1 Values concerning the blood flux

Organ	Volume of blood vessels	Flux ratio
Hepatic	$ V_H = 1.14$	$\alpha_H = 0.05$
Pancreas	$ V_P = 1.14$	$\alpha_P = 0.05$
Mesentery	$ V_M = 0.94 \times \frac{\alpha_S}{\alpha_M + \alpha_S}$	$\alpha_M = 0.1$
Renal	$ V_R = 0.51$	$\alpha_R = 0.2$
Upper arm	$ V_U = 0.74 \times \frac{\alpha_U}{\alpha_U + \alpha_L}$	$\alpha_U = 0.15$
Lower limbs	$ V_L = 0.74 \times \frac{\alpha_L}{\alpha_U + \alpha_L}$	$\alpha_L = 0.25$
Brain	$ V_B = 0.26$	$\alpha_B = 0.15$
Stomach	$ V_S = 0.94 \times \frac{\alpha_S}{\alpha_M + \alpha_S}$	$\alpha_S = 0.05$

And there holds

$$Q_T = \sum_i Q_i \quad (11)$$

$$Q_i = \alpha_i Q_T,$$

where $i \in \{H, P, M, R, U, L, B, S\}$, $Q_T = 3.6$ [L/min], which is the total flux goes in and out of the heart. We set all the power in the Hill's function to be 2 and we perform estimation and present one estimated results as follows in Jupyter widgets.

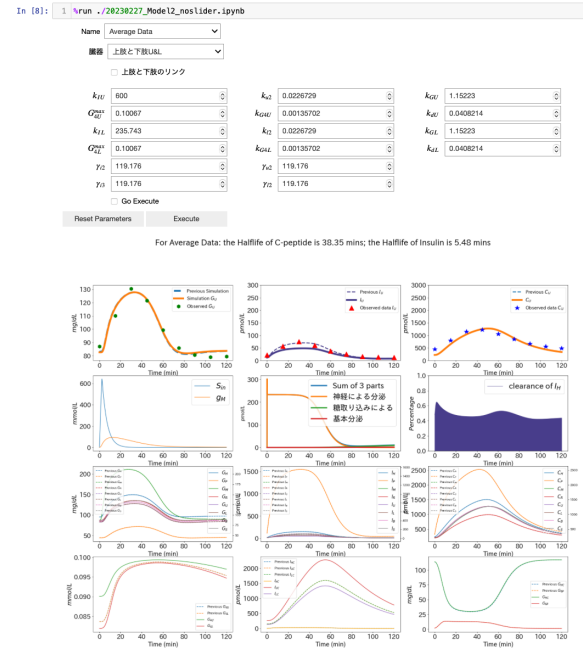


Fig. 1 Numerical results

From the simulation results, we observe that the insulin hepatic clearance varies within the region from 30% to 80%. With the estimated parameters, we simulate the total moles of insulin I_{all} and of C-peptide C_{all} , and compute the half-life times which turn out to be 6.07 minutes for insulin and 38.35 minutes for C-peptide.

4. Conclusion

In this work, we present a compartmental model of systemic circulation which describes the glucose, insulin and C-peptide dynamics. The model is constructed based on the principle of conservation of moles, and has taken the blood circulation and the dynamics of all the organs concerning with glucose, insulin and C-peptide into account. We apply Markov Chain Monte-Carlo method to estimate the parameters' values which minimize the error between the model results and the data. We apply the estimated parameters and compute the half-life times of insulin and of C-peptide, as well as the insulin hepatic clearance, and the results are validated by the medical facts.

Our results obtained the medical validation for the model. As the aim of this research is to find the early signals of the diabetes so to prevent the diabetes from developing, and the data we have used in this presentation is from the healthy people, a next step is to use the data of the mouse with different diet. High fat diet treated mouse is widely used as experimental animal model for hyperglycemia study. We plan to determine the parameters which are different between the healthy mouse and the hyperglycemia mouse, and we expect the results to lead to the clarification of healthy and unhealthy mouse, and then to the definition of healthy, pre-disease, and disease states

of diabetes by the mathematical model.

ACKNOWLEDGMENT :This work was supported by JST Moonshot R&D (Grant Number JPMJMS2023).

APPENDIX : The parameters to be estimated.

Table 2 Parameters to be estimated	
Parameters	Explanation
k_{CR3}, γ_{c1}	Excretion of C-petide
k_{IU}, γ_{i2}	Insulin upper arm clearance
k_{IH}, γ_{i1}	Insulin hepatic clearance
k_{IL}, γ_{i3}	Insulin lower limbs clearance
k_{β}, I_{PC}^0	Insulin basic production
k_E, γ_S	Insulin secretion (intake of glucose)
k_{GIP}, γ_G	Insulin secretion (increasement of G_P)
k_{out}	Basic Insulin secretion
k_{GH2}, γ_{hc1}	Glucose from hepatocyte to blood
k_{GH1}, γ_{g1}	Glucose from blood to hepatocyte
Q_{sm}, T_2	Glucose intake
k_{gm}, γ_g	Glucose absorption
k_{GLUT}, γ_{GP}	Glucose in pancreas
k_{HC1}, k_{HC2}	Dynamics in hepatocyte
$\gamma_{hc2}, \gamma_{hc3}$	Dynamics in hepatocyte
γ_{he2}, k_{h3}	Dynamics in hepatocyte
k_{TCA}, γ_{TCA}	Dynamics in hepatocyte
k_{gly}, G_{LY}^*	Dynamics in hepatocyte
k_{G4U}, G_{4U}^{max}	GLUT4 dynamics
k_{dU}	GLUT4 dynamics
k_{u2}, γ_{u2}	Insulin dynamics in upper arms
k_{l2}, γ_{l2}	Insulin dynamics in lower limbs

REFERENCES

[1] A. Makroglou, J. Li, and Y. Kuang, Mathematical models and software tools for the glucose-insulin regulatory system and diabetes: an overview, *Applied Numerical Mathematics*, Vol. 45(4), pp. 605-614, 2009.

[2] H. Kurata, Virtual metabolic human dynamic model for pathological analysis and therapy design for diabetes, *iScience*, Vol. 24, 102101, February 19, 2021.

[3] H.A.F. Arguedas, *Bayesian analysis of a model for glucose-insulin dynamics during the oral glucose tolerance test (OGTT)*, Ph.D. thesis, Centro de Investigación en Matemáticas, AC. (CIMAT A.C.), 2016

[4] J.T. Sorensen, *A physiologic model of Glucose metabolism in man and its use to design and assess improved insulin therapies for Diabetes*, B.S., University of California, Berkeley, (1978).

[5] M. Nagayama and S. Matsunaga, *Parameter estimation for mathematical models*, CREST Mathematical Model and Machine Learning Tutorial, TOKYO ELECTRON House of Creativity, Dec. 20 - Dec. 22, 2019. Presentation in Japanese.

カーネル法によるハミルトン系の学習と 乱択化による高速化

Learning Hamiltonian systems by the kernel method and
its acceleration by randomization

植田大晴¹⁾ 松原崇²⁾ 谷口隆晴³⁾

Taisei Ueda, Takashi Matsubara and Takaharu Yaguchi

¹⁾神戸大学大学院システム情報学研究科システム情報学専攻 (E-mail: 1985025t@stu.kobe-u.ac.jp)

²⁾大阪大学大学院基礎工学研究科システム創成専攻

³⁾神戸大学大学院理学研究科数学専攻

In recent years, particularly since the Hamiltonian neural network was proposed, there has been much research on modeling physical phenomena using neural networks. However, due to the nature of neural networks, the accuracy may not be good when the number of data is small. In this study, we address this problem by using the kernel method for learning Hamiltonian systems. We also propose an accelerated method by using the random Fourier features.

Key Words : Hamiltonian system, kernel method, random Fourier features

1. はじめに

近年、観測されたデータから物理現象をモデル化する研究が盛んに行われている。この分野の研究としては、2019年に Greydanus, Dzamba, Yosinski らによって提案されたハミルトニアンニューラルネットワークが代表的である [1]。ハミルトニアンニューラルネットワークはニューラルネットワークを用いて運動方程式であるハミルトン方程式を推定するものである。しかし、ニューラルネットワークはデータ数が少ないと過学習が起こりやすくなり精度が悪くなることや、局所最適解に陥る可能性があるといった問題をもつ。

そこで、本研究では、ハミルトン系の学習にニューラルネットワークではなくカーネル法 [2,3] を用いた手法を考える。カーネル法とは 1990 年代の半ばから急速に発展した、非線形性や高次モーメントを扱うことができるデータ解析の方法論である。主なアイデアは、データを高次元空間に写像し、その空間内で線形の解析手法を用いることである。カーネル法はデータ数が増えるとメモリ量、計算量が爆発的に増加する問題があるが、線形的な方法で近似を行うため比較的最適化が容易であり、また、ニューラルネットワークと同様に万能近似性をもつ。

本研究ではカーネル法を用いたハミルトン方程式の学習手法を考案し、それをニューラルネットワークによる学習手法と比較した。また、カーネル法の高速度手法である乱択化フーリエ特徴 [4] を適用し、同様の数値実験を行った。

2. ハミルトニアンニューラルネットワーク

ハミルトニアンニューラルネットワークは、ニューラルネットワークを用いてデータから運動方程式を推定する手法である。この手法では、運動方程式として

ハミルトン方程式

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial q} \\ \frac{\partial H}{\partial p} \end{pmatrix} \quad S = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix}$$

を仮定する。ここで、 q は系の状態を表す量であり、 p は一般化運動量を表す。 H は系の全エネルギーであり、ハミルトニアンと呼ばれる。ハミルトニアンニューラルネットワークでは、 q, p を入力とし、 H を出力させるようなニューラルネットワークを組み、出力されたハミルトニアンを状態変数で微分したものと、状態変数を時間で微分したものが等しくなるようにニューラルネットワークで学習を行う。ここで、ハミルトニアンが時間に陽に依らない場合には、保存量となることが知られている。ハミルトニアンニューラルネットワークでは、物理系をニューラルネットワークで学習する際にエネルギー保存則を満たすモデルを利用することで、元の物理現象の挙動を適切に表現しようとする。

3. カーネル法によるハミルトン方程式のモデル化

前節のハミルトニアンニューラルネットワークはデータ数が少ないと精度が悪化する場合がある。そこで、ニューラルネットワークではなくカーネル法によってハミルトン系の学習を行うことを考える。本節では、カーネル法を回帰問題に適用したカーネルリッジ回帰という手法とそれをハミルトン方程式に応用したモデルについて述べる。

まず、学習用のデータとして x と y の組が n 個与えられると仮定して、入力 x から y を出力する関数を推定する問題を考える。カーネル法では、目的となる関数をデータからモデル化する際、まず、データを高次元の特徴空間に写像し、その空間上での線形近似を行

う。特徴空間への写像を ϕ , 重みを ω として y を

$$y(x) \approx \omega^T \phi(x) = \sum_{m=1}^d \omega_m \phi_m(x)$$

とモデル化する。ここで、実際のサンプルデータ y との誤差を二乗誤差で計算すると

$$R = \sum_{i=1}^n \left\| y^{(i)} - \omega^T \phi(x^{(i)}) \right\|^2 + \lambda \omega^T \omega$$

となり、これを最小化するようにモデルの重み ω を定める。ここで、 $\lambda \omega^T \omega$ は正則化項である。正則化は一般的に過学習を防ぐために用いられるが、カーネル法においては、Representer 定理が使えるという点でも重要である：

定理 1 (Representer 定理). 損失関数が $\omega^T \phi(x)$ の関数として表現できるとする。この損失関数に正則化項を加え最適化する問題において、その正則化項が $\lambda \omega^T \omega$ という形をしていれば、その最適解 ω は適当な定数 $a_i \in \mathbb{R}$ を用いて

$$\omega = \sum_i a_i \phi(x^{(i)})$$

と表すことができる。ただし、各 $x^{(i)}$ は与えられたデータである。

この定理を用いると、最適化結果の関数が

$$y(x) = \sum_i a_i \phi(x^{(i)})^T \phi(x) \quad (1)$$

という形になることが示される。ここで、特徴ベクトルの内積を用いてカーネル関数を以下のように定義する：

定義 1 (カーネル関数). χ の二つの要素 x, x' に対し、カーネル関数 $k(x, x')$ を、 x, x' それぞれの特徴ベクトルどうしの内積

$$k(x, x') = \phi(x)^T \phi(x') = \sum_{m=1}^d \phi_m(x) \phi_m(x')$$

として定義する。

このように定義したカーネル関数を用いると式 (1) は

$$y(x) = \sum_i a_i k(x^{(i)}, x) \quad (2)$$

のようにカーネル関数の線形和で表現することができる。カーネル法では、通常、特徴量を与える代わりにカーネルを与えることで実装される。このようにすると特徴ベクトルの内積という高次元の計算を、データ数に依存した計算量に落とすことができる。式 (2) がカーネル法のモデルとなり、この式を用いて、正則化項付きの二乗誤差の総和を表すと $R = \sum_{i=1}^n \|y^{(i)} - \sum_{j=1}^n a_j k(x^{(j)}, x^{(i)})\|^2 + \lambda \omega^T \omega$ となる。データ数が n であることを考慮して

$$y = \begin{pmatrix} y^{(1)} \\ y^{(2)} \\ \vdots \\ y^{(n)} \end{pmatrix} \quad K = \begin{pmatrix} k(x^{(1)}, x^{(1)}) & \dots & k(x^{(n)}, x^{(1)}) \\ k(x^{(1)}, x^{(2)}) & \dots & k(x^{(n)}, x^{(2)}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ k(x^{(1)}, x^{(n)}) & \dots & k(x^{(n)}, x^{(n)}) \end{pmatrix} \quad \alpha = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$$

とおくと

$$R = \|Y - K\alpha\|^2 + \lambda \alpha^T K \alpha$$

となり、これを微分して最小になるパラメータ α を計算すると

$$\alpha = (K + \lambda I_N)^{-1} y$$

と求められる。

次にカーネル法を用いたハミルトン方程式のモデル化について説明する。ハミルトン方程式のハミルトニアン H をカーネル法で回帰する場合、カーネルリッジ回帰と違う点は変数が q, p の二つあるということ、微分が含まれるということである。そこで $u = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$ としてパラメータを ω , 特徴ベクトルを $\phi(u)$ において H を

$$H \approx \omega^T \phi(u)$$

とモデル化すると、これについてのハミルトン方程式は

$$\frac{du}{dt} = S \frac{\partial}{\partial u} (\omega^T \phi(u))$$

というように記述できる。この式の左辺の u の時間微分はデータとして与えられており、このデータとの誤差を最小にするようにパラメータ ω を求めていく。具体的には、損失関数を二乗誤差として、正則化項を加えた

$$R = \sum_{i=1}^n \left\| \frac{du^{(i)}}{dt} - S \nabla \omega^T \phi(u^{(i)}) \right\|^2 + \lambda \omega^T \omega \quad (3)$$

を最小化する。微分が含まれているが、この形は概ね定理 1 の仮定を満たしており、以下の定理が成り立つ。

定理 2 (微分が含まれる場合の Representer 定理). 損失関数が $\nabla \omega^T \phi(x)$ の関数として表現できるとする。この損失関数に正則化項を加え最適化する問題においてその正則化項が $\lambda \omega^T \omega$ という形をしていれば、その最適解 ω は適当な定数 $a_i \in \mathbb{R}$ を用いて

$$\omega = \sum_i a_i \phi(x^{(i)})$$

と表すことができる。ただし、各 x_i は与えられたデータである。

(証明) 最適解が $\omega = \sum_i a_i \phi(x^{(i)})$ でない場合、 ω を以下のようにおく：

$$\omega = \omega_0 + \epsilon, \quad \omega_0 = \sum_i a_i \phi(x^{(i)}).$$

ここで ϵ は全ての $\phi(x_i)$ に直交するとする。このとき、損失関数は

$$\begin{aligned} R &= \sum_i \|y_i - \nabla \omega^T \phi(x^{(i)})\|^2 + \lambda \omega^T \omega \\ &= \sum_i \|y_i - \nabla (\omega_0 + \epsilon)^T \phi(x^{(i)})\|^2 + \lambda (\omega_0 + \epsilon)^T (\omega_0 + \epsilon) \\ &= \sum_i \|y_i - \nabla \omega_0^T \phi(x^{(i)})\|^2 + \lambda (\|\omega_0\|^2 + \|\epsilon\|^2) \end{aligned}$$

となり、損失関数が最小となるのは $\epsilon = 0$ のときである。よって、 $\omega = \sum_i a_i \phi(x^{(i)})$ が示される。□

定理2より損失関数(3)の最適解は $\omega = \sum_i a_i \phi(u^{(i)})$ となる。また、 $\frac{du^{(i)}}{dt} = \left[\begin{array}{c} \frac{dq^{(i)}}{dt} \\ \frac{dp^{(i)}}{dt} \end{array} \right]$ であり、行列 S の掛け算を実際に計算すると、式(3)は

$$\begin{aligned} R &= \sum_{i=1}^n \left\| \left[\begin{array}{c} \frac{dq^{(i)}}{dt} \\ \frac{dp^{(i)}}{dt} \end{array} \right] - \omega^T \left[\begin{array}{c} \nabla_p \phi(u^{(i)}) \\ -\nabla_q \phi(u^{(i)}) \end{array} \right] \right\|^2 + \lambda \omega^T \omega \\ &= \sum_{i=1}^n \left\| \left[\begin{array}{c} \frac{dq^{(i)}}{dt} \\ \frac{dp^{(i)}}{dt} \end{array} \right] - \sum_j a_j \phi(u^{(j)}) \left[\begin{array}{c} \nabla_p \phi(u^{(i)}) \\ -\nabla_q \phi(u^{(i)}) \end{array} \right] \right\|^2 \\ &\quad + \lambda \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_i a_j \phi(u^{(j)})^T \phi(u^{(i)}) \\ &= \sum_{i=1}^n \left\| \left[\begin{array}{c} \frac{dq^{(i)}}{dt} \\ \frac{dp^{(i)}}{dt} \end{array} \right] - \sum_j a_j \left[\begin{array}{c} \nabla_p k(u^{(j)}, u^{(i)}) \\ -\nabla_q k(u^{(j)}, u^{(i)}) \end{array} \right] \right\|^2 \\ &\quad + \lambda \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_i a_j k(u^{(j)}, u^{(i)}) \end{aligned}$$

となる。ここで、ベクトル ω, ϕ の次元を d 、カーネル関数を $k(x, y) = \phi(x) \cdot \phi(y)$ として

$$u_t = \left[\begin{array}{c} \frac{dq^{(1)}}{dt} \\ \frac{dp^{(1)}}{dt} \\ \vdots \\ \frac{dq^{(n)}}{dt} \\ \frac{dp^{(n)}}{dt} \end{array} \right], \quad K = \left[\begin{array}{ccc} k(u^{(1)}, u^{(1)}) & \cdots & k(u^{(n)}, u^{(1)}) \\ \vdots & & \vdots \\ k(u^{(1)}, u^{(n)}) & \cdots & k(u^{(n)}, u^{(n)}) \end{array} \right]$$

$$K' = \left[\begin{array}{ccc} \nabla_{p_1} k(u^{(1)}, u^{(1)}) & \cdots & \nabla_{p_1} k(u^{(n)}, u^{(1)}) \\ -\nabla_{q_1} k(u^{(1)}, u^{(1)}) & \cdots & -\nabla_{q_1} k(u^{(n)}, u^{(1)}) \\ \vdots & & \vdots \\ \nabla_{p_n} k(u^{(1)}, u^{(n)}) & \cdots & \nabla_{p_n} k(u^{(n)}, u^{(n)}) \\ -\nabla_{q_n} k(u^{(1)}, u^{(n)}) & \cdots & -\nabla_{q_n} k(u^{(n)}, u^{(n)}) \end{array} \right], \quad \alpha = \left[\begin{array}{c} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{array} \right]$$

とおく。 u_t, α はそれぞれ $2n, n$ 次元のベクトルで、 K' はカーネル関数を q, p で微分したものが交互に並んだようなものとなる。ただし、 S の影響で q 微分のものはマイナスがつく。 K の方は普通のカーネル行列となっている。この二つの行列を用いると

$$R = \|u_t - K' \alpha\|^2 + \lambda \alpha^T K \alpha$$

となる。 R を微分して最小となるパラメータ α を求めると

$$\alpha = (K'^T K' + \lambda K)^{-1} K'^T u_t$$

を得る。この求めたパラメータ α を使うと u_t とエネルギー関数 H は以下の式でモデル化される：

$$u_t \approx K' \alpha,$$

$$H(u) \approx \omega^T \phi(u) = \sum_{i=1}^n a_i \phi(u^{(i)}) \phi(u) = K \alpha.$$

4. 乱択化フーリエ特徴によるモデル化

カーネル法にはデータ数が多くなると計算量が爆発的に増加するという問題があった。この問題を解決する手法として、2007年に Ali Rahimi と Ben Recht らに

よって Random Fourier Features(乱択化フーリエ特徴)が提案された[4]。この方法では、特徴ベクトルの内積をランダムな写像で近似することで高速化が行われている。カーネル関数が $k(x, y) = \phi(x - y)$ のように差で表現される場合、カーネル関数がある確率密度関数 $p(\omega)$ のフーリエ変換で表せることを利用すると

$$\begin{aligned} k(x, y) &= k(x - y) \\ &= \int p(\omega) \exp(i\omega^T (x - y)) d\omega \\ &= E_\omega [\exp(i\omega^T (x - y))] \\ &= E_\omega [\cos(\omega^T (x - y))] \\ &= E_\omega [\sqrt{2} \cos(\omega^T x + b) \sqrt{2} \cos(\omega^T y + b)] \\ &\approx \frac{1}{R} \sum_{r=1}^R \sqrt{2} \cos(\omega^T x + b) \sqrt{2} \cos(\omega^T y + b) \end{aligned} \quad (4)$$

となる。ここで、 $\omega \sim p(\omega), b \in [0, 2\pi]$ である。また、式(4)の最後の行はモンテカルロ近似を行っており、ここで、次元が D から R へと変わっている。この式より、 $z_\omega(x) = \sqrt{2} \cos(\omega^T x + b)$ として、 $z(x) = \frac{1}{\sqrt{R}} (z_1(x), \dots, z_R(x))^T$ とおくとカーネル関数は

$$k(x, y) = \langle \phi(x), \phi(y) \rangle \approx z(x)^T z(y)$$

と近似できる。このときの次元 R は、比較的小さい数で近似出来ることが理論的および実験的に示されている[5,6]。また、データ数 N の学習データ X に対する z の集合を $Z = (z(x_1)^T, \dots, z(x_N)^T)^T \in \mathbb{R}^{N \times R}$ とすると

$$\begin{aligned} y &= \sum_{n=1}^N a_n k(x, x_n) \\ &\approx \sum_{n=1}^N a_n z(x)^T z(x_n) \\ &= z(x)^T Z^T \alpha \\ &= z(x)^T Z^T (K + \lambda I_N)^{-1} y \\ &= z(x)^T Z^T (ZZ^T + \lambda I_N)^{-1} y \\ &= z(x)^T (Z^T Z + \lambda I_R)^{-1} Z^T y \end{aligned}$$

と表すことができ、逆行列のサイズが $R \times R$ となることから、 R を小さい値として無視すると計算量を $O(N)$ に抑えることができる。

次に、実際に、乱択化フーリエ特徴をハミルトン方程式に応用したモデルについて述べる。前節で用いた二つの行列 K, K' を、低次元の特徴ベクトルの内積で以下のように近似する：

$$\begin{aligned} K &= \left[\begin{array}{ccc} k(u_1, u_1) & \cdots & k(u_n, u_1) \\ \vdots & & \vdots \\ k(u_1, u_n) & \cdots & k(u_n, u_n) \end{array} \right] \\ &\approx \left[\begin{array}{ccc} z_1(u_1) & \cdots & z_d(u_1) \\ \vdots & & \vdots \\ z_1(u_n) & \cdots & z_d(u_n) \end{array} \right] \left[\begin{array}{ccc} z_1(u_1) & \cdots & z_1(u_n) \\ \vdots & & \vdots \\ z_d(u_1) & \cdots & z_d(u_n) \end{array} \right] \\ &= ZZ^T, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
K' &= \begin{bmatrix} \nabla_{p_1} k(u_1, u_1) & \cdots & \nabla_{p_1} k(u_n, u_1) \\ -\nabla_{q_1} k(u_1, u_1) & \cdots & -\nabla_{q_1} k(u_n, u_1) \\ \vdots & & \vdots \\ \nabla_{p_n} k(u_1, u_n) & \cdots & \nabla_{p_n} k(u_n, u_n) \\ -\nabla_{q_n} k(u_1, u_n) & \cdots & -\nabla_{q_n} k(u_n, u_n) \end{bmatrix} \\
&\approx \begin{bmatrix} \nabla_{p_1} z_1(u_1) & \cdots & \nabla_{p_1} z_d(u_1) \\ -\nabla_{q_1} z_1(u_1) & \cdots & -\nabla_{q_1} z_d(u_1) \\ \vdots & & \vdots \\ \nabla_{p_n} z_1(u_n) & \cdots & \nabla_{p_n} z_d(u_n) \\ -\nabla_{q_n} z_1(u_n) & \cdots & -\nabla_{q_n} z_d(u_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_1(u_1) & \cdots & z_1(u_n) \\ \vdots & & \vdots \\ z_d(u_1) & \cdots & z_d(u_n) \end{bmatrix} \\
&= Z' Z^T.
\end{aligned}$$

ここで、行列 K, K' を $Z = (z(u_1)^T, \dots, z(u_n)^T) \in \mathbb{R}^{n \times d}$ と $Z' = (\nabla_{q_1} z(u_1)^T, \nabla_{p_1} z(u_1)^T, \dots, \nabla_{q_n} z(u_n)^T, \nabla_{p_n} z(u_n)^T) \in \mathbb{R}^{2n \times d}$ を用いて、 $K = ZZ^T, K' = Z'Z^T$ というように、微分は含まれているが特徴ベクトルを要素として持つ二つの行列で表すことにする。そうすると $u_t \approx Z'Z^T \alpha, H \approx ZZ^T \alpha$ となるが、前節と同様に α を求めると $\alpha = (Z(Z')^T Z'Z^T + \lambda ZZ^T)^{-1} u_t$ となり、計算が困難であるため $Z^T \alpha$ を求めることを考える。誤差を最小にするときの $Z^T \alpha$ は

$$Z^T \alpha = \{(Z')^T Z' + \lambda I_d\}^{-1} (Z')^T u_t$$

と求められ、これは逆行列のサイズが $d \times d$ となっている。よって、 u_t, H は以下の式でモデル化される：

$$u_t = Z'Z^T \alpha = Z' \{(Z')^T Z' + \lambda I_d\}^{-1} (Z')^T u_t,$$

$$H = ZZ^T \alpha = Z \{(Z')^T Z' + \lambda I_d\}^{-1} (Z')^T u_t.$$

5. 数値実験

3, 4 節で説明したカーネル法、乱択化フーリエ特徴によるハミルトン方程式のモデルを利用して、ハミルトニアンを学習し、その精度をニューラルネットワークによって学習したものと比較する数値実験を行った。また、学習したモデルからシミュレーションを行い、実際の物体の運動を表す軌道とのずれを確認した。乱択化フーリエ特徴の方では、カーネル法と比べてどれほど計算時間を削減できたかを調べた。詳細な実験結果については当日報告する。

謝辞： 本研究は JST CREST JPMJCR1914, JST さきがけ JPMJPR21C7, JSPS 科研費 20K11693 の助成を受けたものである。

参考文献

- [1] Sam Greydanus, Misko Dzamba, and Jason Yosinski, “*Hamiltonian Neural Networks*,” Advances in Neural Information Processing Systems, pp. 15379-15389 (2019).
- [2] 赤穂昭太郎, “カーネル多変量解析,” 岩波書店 (2008).
- [3] 福永健次, “カーネル法入門-正定値カーネルによるデータ解析,” 朝倉書店 (2010).
- [4] Ali Rahimi and Ben Recht, “*Random Features for Large-Scale Kernel Machines*,” Advances in Neural Information Processing Systems, 20, 2007.
- [5] Bharath K. Sriperumbudur, and Zoltán Szabó, “*Optimal Rates for Random Fourier Transform*,” Advances in Neural Information Processing Systems, 28, 2015.
- [6] Quoc Le, Tamas Sarlos, and Alex Smola, “*Fastfood - Approximating Kernel Expansion in Loglinear Time*,” ICML 2013.