

## Evaluation of numerical error of numerical results in pattern formation simulation by FEM

|       |  |
|-------|--|
| メタデータ | 言語: jpn<br>出版者:<br>公開日: 2019-08-22<br>キーワード (Ja):<br>キーワード (En):<br>作成者: 高石, 武史<br>メールアドレス:<br>所属: |
| URL   | <a href="https://mu.repo.nii.ac.jp/records/1088">https://mu.repo.nii.ac.jp/records/1088</a>        |

# パターン形成 FEM シミュレーションにおける数値解の誤差評価

## Evaluation of numerical error of numerical results in pattern formation simulation by FEM

高石 武史<sup>1</sup>

Takeshi Takaishi

### 1 数値シミュレーションと計算メッシュ

繊細なパターン形成を捉えようとする数値シミュレーションにおいて、計算メッシュの異方性はそのパターンを歪め、計算データから誤った解釈を引き出す可能性がある。多くのパターン形成問題では、パターンを形成する変数の値が急激に変化する領域 (内部遷移層) が存在し、この領域を境界としてパターンとして認識されている。そのため、数値シミュレーションにおいては、この領域において計算メッシュのサイズを十分小さく設定することが精度の高い数値解を得るために必要である。しかし、このサイズ設定を小さくしすぎると、有限要素法ではメッシュ数の増加から剛性マトリックスのサイズを大きくし、結果的に数値計算に必要な計算機のメモリーと計算時間が増大する。そのため、現実的な時間で解を得ようとするには、最適なサイズでの要素設定が必要となる。しかし、実際に数値計算を行うとメッシュの作り方でこの「最適なサイズ」が変わってくるのが知られており、通常は解析解との誤差を評価することで決められている。多次元の動的なパターン形成問題では解析解が存在しない場合が多いが、そのような場合でも十分高い精度を持つと予想される参照解を利用することで計算データの評価を行うことができる。

本研究では activator-inhibitor 型の 2 変数の反応拡散方程式による 2 つのパターン形成問題に対して、計算メッシュを 2 種類設定し、数値シミュレーションデータと参照解の差の評価を定量的に評価した。その結果、定常解へと向かうパラメータでのパターン形成問題では最適メッシュサイズの評価が可能でメッシュの異方性が及ぼす影響も評価できるが、パターンが生成され続けるパラメータでは精度の高い数値計算が難しいことを確認した。

---

<sup>1</sup> 武蔵野大学数理工学センター員 / 武蔵野大学工学部数理工学科教授

| Parameter     | 双安定型                         | 興奮型                          |
|---------------|------------------------------|------------------------------|
| $\varepsilon$ | 0.01                         | 0.015                        |
| $\tau$        | 0.1                          | 0.06                         |
| $d$           | 1.0                          | 0.4                          |
| $\alpha$      | 0.25                         | 0.125                        |
| $\gamma$      | 10.0                         | 2                            |
| $\Omega$      | $[0, 1] \times [0, 1]$       | $[0, 20] \times [0, 20]$     |
| $\Delta t$    | 0.001                        | 0.001                        |
| $t$           | $[0, 1]$                     | $[0, 2]$                     |
| 初期分布          | $\sqrt{x_1^2 + x_2^2} < 0.7$ | $x_1 < 10$ かつ $9 < x_2 < 11$ |

表 1 数値シミュレーションに利用したパラメータ.

## 2 数値計算結果

### 2.1 反応拡散方程式の離散化とメッシュの設定

ここで, 2次元領域  $\Omega \subset R^2$  において, 空間的に急激に値の変化する領域 (内部変位層) を持つ  $u$  と比較的緩やかに値の変化する  $v$  からなる activator-inhibitor 型の 2変数反応拡散方程式について考える [1].

$$\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon\tau \frac{\partial u}{\partial t} = \varepsilon^2 \Delta u + f(u, v) \\ \frac{\partial v}{\partial t} = d\Delta v + g(u, v) \\ \frac{\partial u}{\partial n} = 0 = \frac{\partial v}{\partial n} \\ \text{with initial condition} \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} t > 0, x \in \Omega \\ t > 0, x \in \Omega \\ t > 0, x \in \partial\Omega \end{array} \quad (1)$$

ここで,  $\varepsilon > 0, \tau > 0, x = (x_1, x_2), \Delta := \partial^2/\partial x_1^2 + \partial^2/\partial x_2^2$  は 2次元のラプラシアンである.  $d \gg \varepsilon^2$  で, この方程式の解においては, 変数  $u$  における内部遷移層の厚さは微小パラメータ  $\varepsilon > 0$  を用いて  $o(\varepsilon)$  として表すことができ,  $\tau > 0$  を小さく取ることによって時間的に振動する解を, 大きくすることで定常的な解を見出すことができる [1, 2, 3]. また, 反応項  $f(u, v), g(u, v)$  は,

$$\left\{ \begin{array}{l} f(u, v) = u(u - \alpha)(1 - u) \\ g(u, v) = u - \gamma v \end{array} \right. \quad (2)$$

ここで,  $0 < \alpha < 1, \gamma > 0$ . (1) の反応項において,  $f(u, v) = 0 = g(u, v)$  のヌルクラインの交差の仕方で双安定型と興奮型が切り替わる (表 1).

数値計算に当たり, (1) の拡散項のみ陰的 Euler 法で差分することで,  $t = k\Delta t$  ( $k =$

0, 1, 2, …) と時間的に離散化された次の式が得られる.

$$\begin{cases} \varepsilon\tau \frac{u^k - u^{k-1}}{\Delta t} = \varepsilon^2 \Delta u^k + f(u^{k-1}, v^{k-1}) \\ \frac{v^k - v^{k-1}}{\Delta t} = d\Delta v^k + g(u^{k-1}, v^{k-1}) \end{cases} \quad (3)$$

ここで,  $u^k, v^k$  は各々  $t = k\Delta t$  における (1), (2) の近似解である. (3) に試験関数  $\phi, \psi$  をかけ, 弱形式

$$\begin{cases} \int_{\Omega} \left( \varepsilon\tau \frac{u^k - u^{k-1}}{\Delta t} \phi + \varepsilon^2 \nabla u^k \cdot \nabla \phi - f(u^{k-1}, v^{k-1}) \phi \right) dx = 0 \\ \int_{\Omega} \left( \frac{v^k - v^{k-1}}{\Delta t} \psi + d \nabla v^k \cdot \nabla \psi - g(u^{k-1}, v^{k-1}) \psi \right) dx = 0 \end{cases} \quad (4)$$

を有限要素法で解くことでパターンの時間発展をたどる. 数値計算においては, 有限要素法数値計算ツールである FreeFem++ [4] を用いて数値計算を行った. メッシュの形成において, 弱い異方性を持つメッシュとしては `border()+buildmesh()` を利用したものを, 強い異方性を持つメッシュとしては `square()` 命令を利用したものをを用いた (図 1). 以下, 前者をメッシュ A, 後者をメッシュ B と呼ぶ. 表 2 は評価に使ったメッシュの情報で, 領域境界の各辺を  $n$

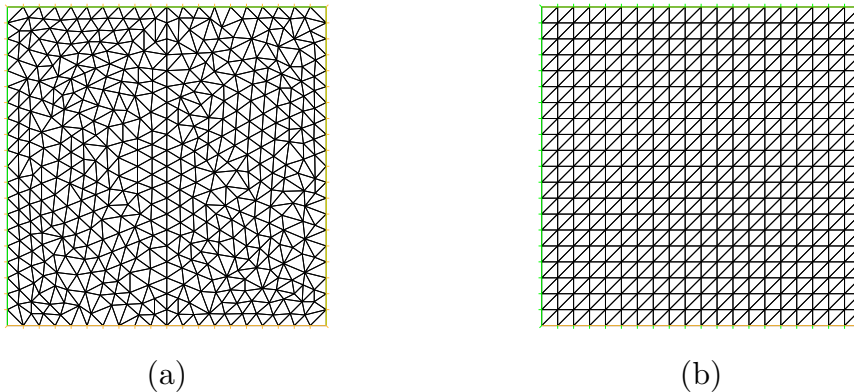


図 1 数値シミュレーションに用いた, (a) 異方性の弱いメッシュ  $A_{20}$  と, (b) 異方性の強いメッシュ  $B_{20}$ .

等分したメッシュを生成し,  $N_v$  は節点数,  $h_{min}$  は各要素の辺の長さのうち最小のものを表す.  $A_n$  と  $B_n$  は節点数がほぼ同じであるが,  $A_n$  はメッシュサイズのばらつきを多少含んでいる.

境界メッシュ数  $n \times n$  での数値シミュレーションにおいて, 各タイムステップでの計算結果  $u_n$  に対して, 参照データ  $u_0$  の有限要素メッシュへの補間データを  $\tilde{u}$  とするとき,  $\tilde{u}_n$  は  $u_n$  のメッシュから  $u_0$  のメッシュへの補間行列  $IV_n$  を用いて,

$$\tilde{u} = IV_n * u_n \quad (5)$$

と計算できる. 誤差については参照データとの差のノルムで評価し, その時間発展を調べることにする [5].

$$\begin{cases} ERR_{relative} = \|\tilde{u} - u_0\|_{L2} / \|u_0\|_{L2} \\ ERR_{max} = \max|\tilde{u} - u_0| \end{cases} \quad (6)$$

| メッシュ      | メッシュ生成               | $n$ | $N_v$  | $h_{min}$ |
|-----------|----------------------|-----|--------|-----------|
| $A_{15}$  | border()+buildmesh() | 15  | 299    | 0.0471    |
| $A_{20}$  | border()+buildmesh() | 20  | 517    | 0.0354    |
| $A_{50}$  | border()+buildmesh() | 50  | 3043   | 0.0141    |
| $A_{100}$ | border()+buildmesh() | 100 | 12139  | 0.00707   |
| $A_{200}$ | border()+buildmesh() | 200 | 47834  | 0.00354   |
| $A_{400}$ | border()+buildmesh() | 400 | 189794 | 0.00177   |
| $B_{15}$  | square()             | 15  | 256    | 0.0667    |
| $B_{20}$  | square()             | 20  | 441    | 0.05      |
| $B_{50}$  | square()             | 50  | 2601   | 0.02      |
| $B_{100}$ | square()             | 100 | 10201  | 0.01      |
| $B_{200}$ | square()             | 200 | 40401  | 0.00707   |

表2 数値シミュレーションに用いたメッシュと節点数  $N_v$ , 最小メッシュサイズ  $h_{min}$  ( $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ ) の場合).

$ERR_{relative}$  では領域全体での平均的な差を,  $ERR_{max}$  では局所的な差の最大値を評価する.

筆者は, き裂進展モデルの数値シミュレーションにおいては, 各変数でこのような参照解との差をとることで, き裂進展の違いの指標とできることを指摘している [6].

## 2.2 双安定型

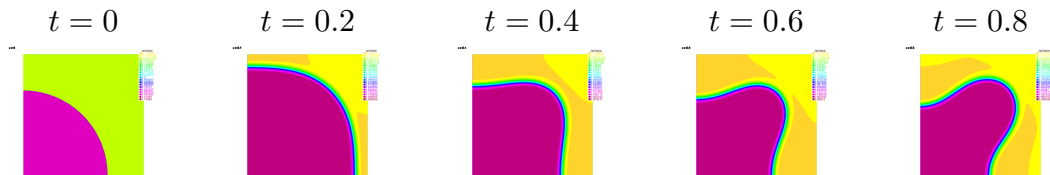


図2 メッシュ  $A_{100}$  を用いた双安定型反応拡散方程式の数値シミュレーション結果  $u$  の空間分布.

最初に, 定常解へと漸近していくパターン形成の数値シミュレーションについて評価を行う. ここでは, メッシュ  $A_{200}$  での数値シミュレーション結果を参照データ  $u_0$  として,  $A_{15}, A_{20}, A_{50}, A_{100}, B_{15}, B_{20}, B_{50}, B_{100}$  での数値シミュレーション結果を評価した.

参照解との差のノルム  $ERR_{relative}$  と  $ERR_{max}$  の時間発展において同等のメッシュサイズで比較すると, どちらにおいても,  $n = 15, 20, 50$  では異方性の弱いメッシュ A の方が誤差の小さな計算が行われていることがわかるが,  $n = 100$  では逆転しており, また, どのメッシュにおいても参照解との差は十分時間が経過しても解消していないことがわかる (図3). 全体で 1% 以下の差であることを数値計算の妥当性とするならば, A, B どちらのメッシュでも  $n = 50$  では  $ERR_{relative} < 0.01$  となり,  $n > 50$  に設定したメッシュを用いればこの問題の

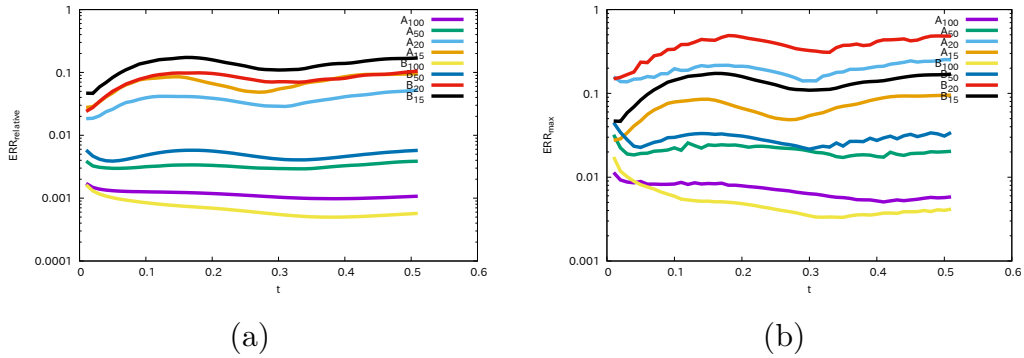


図3 メッシュ  $A_{15}, A_{20}, A_{50}, A_{100}, B_{15}, B_{20}, B_{50}, B_{100}$  を用いた双安定型反応拡散方程式の数値シミュレーションにおける参照解との差のノルム (a) $ERR_{relative}$  と (b) $ERR_{max}$  の時間発展.

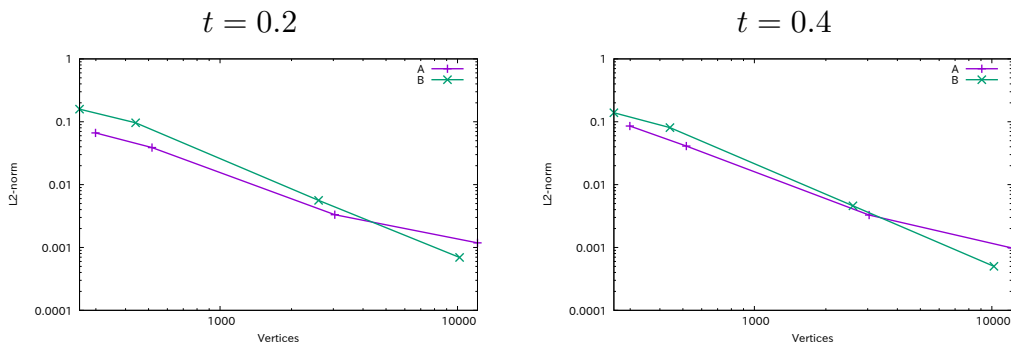


図4 メッシュ  $A_{15}, A_{20}, A_{50}, A_{100}, B_{15}, B_{20}, B_{50}, B_{100}$  を用いた双安定型の反応拡散方程式の数値シミュレーションにおいて、数値計算に用いた有限要素メッシュの節点数に対する  $ERR_{relative}$  の値.

数値計算には十分であることがわかる. また,  $t = 0.2, 0.4$  での節点数に対する  $ERR_{relative}$  を見ると, その差は小さくなっているものの, 傾向は変わらない (図4). メッシュの異方性の観点から見ると, 異方性の強いメッシュ B では, 節点数の少ない場合にメッシュ A よりも計算に必要なメッシュサイズの条件が厳しく,  $B_{20}$  はメッシュ数が不十分なために遷移領域で大きな誤差が生じていることがわかる (図5).

### 2.3 興奮型 (スパイラルパターン)

次に, 動的なパターンを形成する問題として, スパイラル波を発生する興奮型のパターンの数値シミュレーションについて評価を行う. ここでは, メッシュ  $A_{400}$  での数値シミュレーション結果を参照データ  $u_0$  として,  $A_{100}, A_{200}, B_{100}, B_{200}$  での数値シミュレーション結果を評価した. 図7に見られるように, メッシュ  $B_{100}$  においては明らかにパターンが変形していることがわかり, 参照解との差のノルムの時間発展 (図8) より, メッシュ B では, メッシュ A よりも計算に必要なメッシュサイズの条件が厳しいことがわかるが, 接点数で評価し直すと,  $t = 0.2$  では2種類のメッシュ間でほとんど差はないが,  $t = 1$  では  $A_{200}$  が  $B_{200}$  よりも

パターン形成 FEM シミュレーションにおける数値解の誤差評価 (高石)

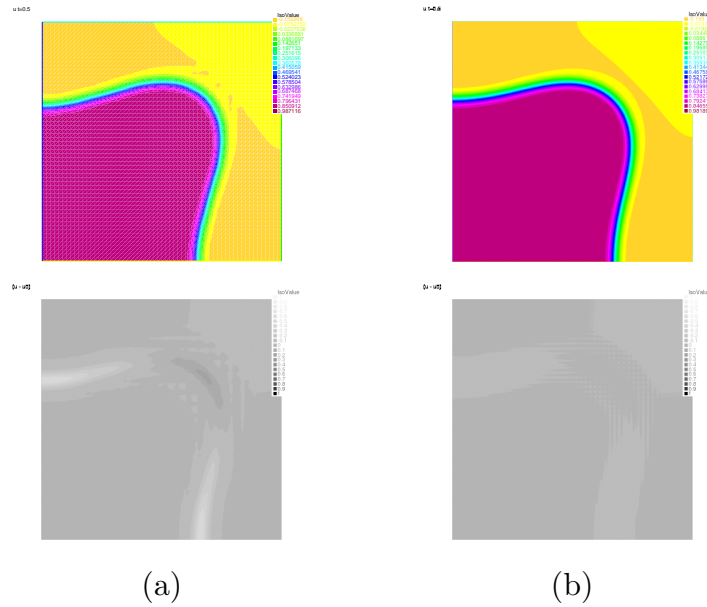


図 5 双安定型反応拡散方程式の数値シミュレーションにおいて, (a) $B_{20}$ , (b) $B_{50}$  メッシュで計算した結果の  $u$ (上) と  $u - u_0$ (下) の空間分布.

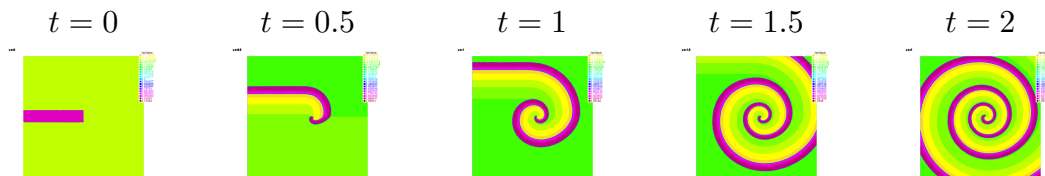


図 6 メッシュ  $A_{400}$  を用いた興奮型反応拡散方程式の数値シミュレーション結果  $u$  の空間分布.

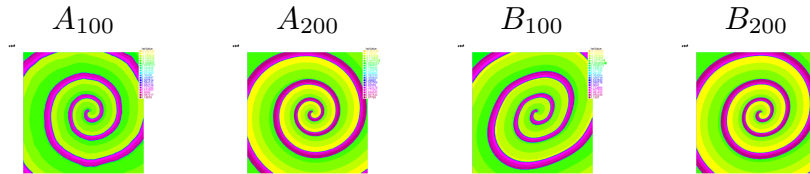


図 7 メッシュ  $A_{100}$ ,  $A_{200}$ ,  $B_{100}$ ,  $B_{200}$  を用いた興奮型反応拡散方程式の数値シミュレーション結果  $u$  の空間分布 ( $t = 2$ ).

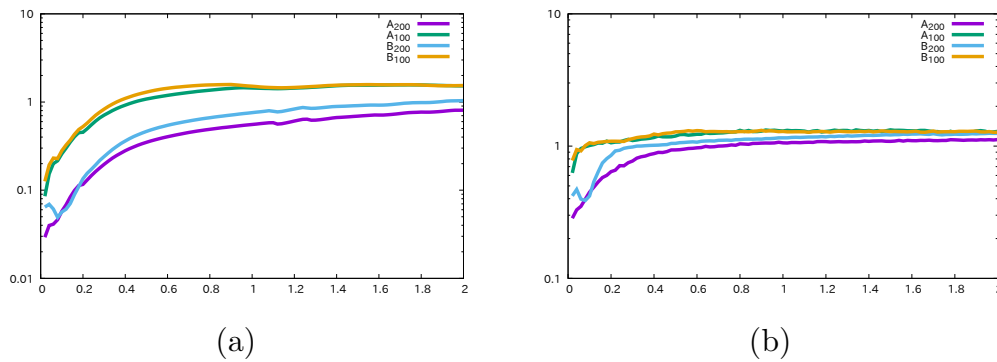


図 8 メッシュ  $A_{100}$ ,  $A_{200}$ ,  $B_{100}$ ,  $B_{200}$  を用いた興奮型反応拡散方程式の数値シミュレーションにおける参照解からの差のノルム (a) $ERR_{relative}$  と (b) $ERR_{max}$  の時間発展.

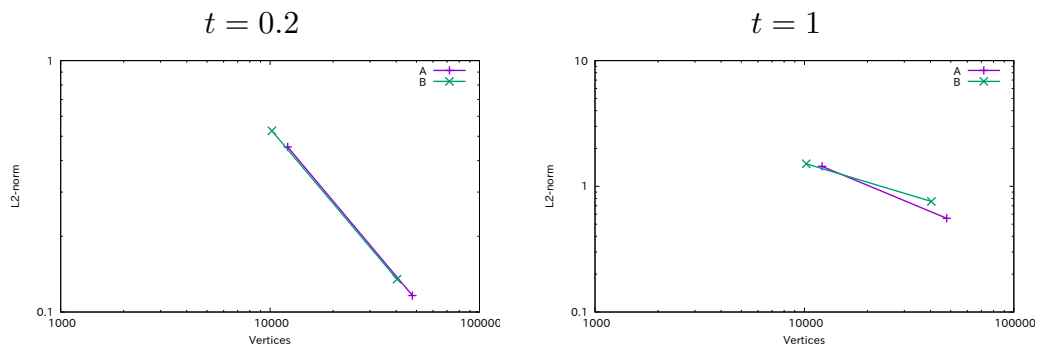


図9 メッシュ  $A_{100}, A_{200}, B_{100}, B_{200}$  を用いた興奮型の反応拡散方程式の数値シミュレーションにおいて、数値計算に用いた有限要素メッシュの接点数に対する  $ERR_{relative}$  の値.

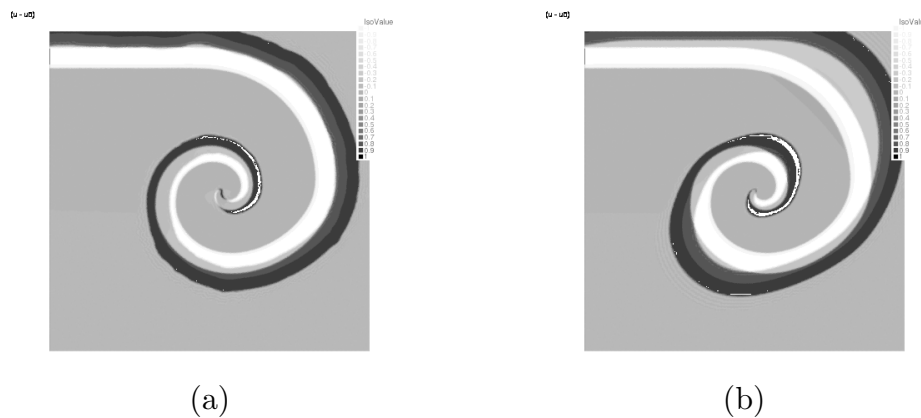


図10 興奮型の反応拡散方程式の数値シミュレーション結果から求めた、(a) メッシュ  $A_{100}$  と (b) メッシュ  $B_{100}$  における  $u - u_0$  の分布 ( $t = 1$ ).

僅かに良い結果を与えていることがわかる (図9). 参照解との差  $u - u_0$  の分布からも、 $B_{100}$  の結果は  $A_{100}$  の結果に比べ形成されたパターンのズレが大きく見えるが (図10), どちらも元のパターンの幅より大きくずれているため、ノルムから差が見いだせないものと考えられる.



### 3 結果と考察

パターン形成問題の数値シミュレーションにおいて、数値計算に適したメッシュサイズとメッシュの異方性の影響を、参照解との差のノルムの時間発展を用いた定量的な評価方法を検討した。パターンのズレに対して十分大きな幅を持つ双安定型のパターンではこのノルムで数値計算に適した計算メッシュの設定が評価が可能であることがわかった。この場合には、あるパラメータにおいて計算メッシュの設定の評価を行うことで、近いパラメータでの数値シミュレーションにおける計算メッシュ設定の指針とすることが可能となる。一方で、持続的に幅の細かいパターンが生成される興奮型の場合には、各時間ステップにおける参照解との差が大きいため評価が難しく、そこで生じるパターンの変形については別の方法で評価する必要があることがわかった。

また、空間的に規則性を持ち生成されたメッシュ B は、比較的生成が容易であるものの、計算メッシュの節点数が少ない場合にメッシュの異方性が数値計算結果に影響を及ぼす場合があるために、異方性の弱いメッシュで計算する場合と比較して、数値計算に適したメッシュサイズを小さめにする必要があることが示された。さらに、定常解へと漸近していく問題であっても、参照解との差は時間発展とともに大きく変化はせず残るため、計算結果の評価には注意が必要であることもわかった。

本論文では計算領域内でメッシュサイズがほぼ均一な場合について評価を行った。有限要素法では、予め小さなサイズのメッシュが必要な領域がわかっている場合には、該当する領域のみ小さなメッシュサイズを設定することで効率的な数値計算が可能であるが、本論文で取り扱った動的パターンの数値シミュレーションにおいてはタイムステップごとに最適なメッシュ配置を行うことが必要となる。このような場合にはアダプティブメッシュ法 (Adaptive Mesh Refinement Method) が利用され、特に 3 次元の数値シミュレーションにおいて剛性マトリクスを肥大化させずに適切な計算機負荷での計算を行えるが [7]、メッシュ更新に対する適切な設定が明確で無い場合が多い。本論文の方法を用いることで、アダプティブメッシュ法を用いた数値シミュレーション結果の誤差を評価し、実計算時間と比較することでアダプティブメッシュ法においてどのような設定が効果的であるかを評価することで、同様な指針を見いだせる可能性がある。

一方で、パターン形成に関わる実験的研究に関わる研究者からは、生成されるパターンを大きく捉え、そのパターンの種類を分類するという意見も聞かれ、数値シミュレーションにおいてもパターンに現れる特徴的な性質を近似的に捉える「おおらかなノルム」を導入することで、メッシュサイズが粗くてもパターン形成の数値シミュレーション結果が現象としての確かなパターンを表しているかどうかの評価をする方法も提案されている [8]。本論文で取り扱っている不安定で動的なパターン形成に類する問題の数値シミュレーションの結果において、そこで得られる知見を保証する手段としてこのような評価方法も有効であると考えられ、本論文の誤差評価結果と合わせて検討することで、数値シミュレーションにおける的確な指針を見いだ

せるのではないかと期待している.

## 謝辞

本研究は JSPS 科研費 JP16K05285 の支援により実施された. 一部の数値シミュレーションでは, 明治大学先端数理科学インスティテュート現象数理学研究拠点コンピュータシステムを利用した.

## 参考文献

- [1] H. Fujii, M. Mimura, and Y. Nishiura, A picture of the global bifurcation diagram in ecologically interacting and diffusing systems, *Physica D*, Vol.5, No.1 (1982), 1-42.
- [2] Y. Nishiura and M. Mimura, Layer oscillations in reaction-diffusion systems, *SIAM J. Appl. Math.*, Vol.49, No.2 (1989), 481-514.
- [3] T. Ohta and H. Nakazawa, Self-organization in an excitable reaction-diffusion system. ii. reduction to a coupled oscillator, *Physical Review A*, Vol.45 (1992), 5504-5511.
- [4] F. Hecht, New development in FreeFem++, *J. Numer. Math.* 20 (2012), 251-265.
- [5] 大塚 厚二, 高石 武史, 日本応用数理学会 (監修), 有限要素法で学ぶ現象と数理 - FreeFem++ 数理思考プログラミング- (シリーズ応用数理 4), 共立出版, 2014 年 2 月.
- [6] 高石武史, 複合材料でのき裂進展とき裂形状の評価, 日本応用数理学会 2015 年度年会, 1922.
- [7] M. Kimura, H. Komura, M. Mimura, H. Miyoshi, T. Takaishi, and D. Ueyama, Adaptive mesh finite element method for pattern dynamics in reaction-diffusion systems, *Proceedings of the Czech-Japanese Seminar in Applied Mathematics 2005, COE Lecture Note Vol.3, Faculty of Mathematics, Kyushu University ISSN 1881-4042 (2006) pp.56-68.*
- [8] M. Mimura, *private communication*, (2019).

(原稿提出: 2018 年 12 月 25 日; 修正稿提出: 2019 年 2 月 9 日)