修士論文 要旨

モデル縮減に基づく散逸型微分方程式の数値計算に関する研究

数理情報学専攻 48166230　柳澤 広大
指導教員　松尾 宇泰 教授

1　はじめに

近年，モデル縮減に基づく時間発展型高次元微分方程式系の解析が数値解析の分野で注目されている．モデル縮減とは，「多くの問題では現象を低次元で捉えられる」という経験則をヒントに，解析の対象である元の問題の挙動を捉える部分空間を実験から得られる観測データに基づいて「適切に」構築し，それを用いて元の問題を近似する低次元系を新たに作り出す手法の総称である．このような手続きを経ることで問題の解析が低次元系によって可能となり，計算コストの削減が期待されている．

モデル縮減手法で一般的なものは，Proper Orthogonal Decomposition による大域的な部分空間の構築 [6] と Galerkin projection による縮減の組み合わせであるが，研究分野としては黎明期にある故に近年様々な手法が提案されており，とりわけ，Petrov-Galerkin projection による縮減に関する研究 [3, 2] や，複数の部分空間を構築し元の問題の局所的な挙動を低次元でより正確に近似することを試みる研究 [1] が盛んである．

一方で，これらについて実際のパフォーマンスは実験例に乏しいため不明な点が多いのが現状であり，本研究ではこれら 2 つの拡張について散逸型微分方程式を対象とする数値実験によって性能を評価した．

2　既存のモデル縮減手法

2.1　対象とする方程式系とその離散化

対象とする方程式系として，次のものを考える：

$$\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t} = f(U), \quad U(0) = U_0 \tag{1}$$

ここで，$U : [0, T] \to \mathbb{R}^N$ であり，$U_0 \in \mathbb{R}^N$ は初期条件，$f : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N$ とする．また，その離散化によって得られるスキームとして，

$$r^{(n)}(U^{(n)}) = 0, \quad U^{(0)} = U_0 \tag{2}$$

を考える．ここで，$U^{(n)} \in \mathbb{R}^N$，$r^{(n)} : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N$ である．

2.2　Galerkin projection

Galerkin projection では，$V^\top V = I_{n_s}$ を満たす部分空間 $V \in \mathbb{R}^{N\times n_s}$ を用いて

$$U(t) \approx U_0 + Vz(t)$$

という近似を行い，(1) 式に代入した後両辺左から $V^\top$ をかけて，

$$\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}t} = V^\top f(U_0 + Vz), \quad z(0) = 0 \tag{3}$$

として，$z(t)$ に関する方程式系を構築する．

Galerkin projection は，次に示す最適性を持つ．

定理 2.1 (Carlberg et al. (2017))**.** V が正規直交条件 $V^\top V = I_{n_s}$ を満たすとき，Galerkin projection による縮減は，$\tilde{U}(t) := U_0 + Vz(t)$ とすると次を満たす：

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{U}}{\mathrm{d}t} = \underset{v\in\mathrm{range}(V)}{\arg\min} \, ||v - f(U_0 + Vz)||_2^2.$$

2.3　Proper Orthogonal Decomposition

Proper Orthogonal Decomposition では，元の問題の数値解に基づき，部分空間 V を決定する [6]．具体的には，元の問題の数値解から初期値を除算したベクトル（以下，スナップショット）を並べた行列が $Y \in \mathbb{R}^{N\times N_{snaps}}$ の形で与えられた時，Y の特異値分解を行って得られる左特異ベクトルのうち，対応する特異値が大きい n_s 本を並べたものを V として採用する．

2.4　拡張 1： Petrov-Galerkin projection

Carlberg らは，Galerkin projection に対する拡張として，定理 2.1 に示したような最小二乗近似型の縮減ではなく，(2) 式に

$$U^{(n)} \approx U^{(n-1)} + V\Delta U^{(n)}$$

という近似を代入した過決定系に対して

$$\min_{\Delta U^{(n)}\in\mathbb{R}^{n_s}} ||r^{(n)}(U^{(n-1)} + V\Delta U^{(n)})||_2^2 \tag{4}$$

を考えることで $\Delta U^{(n)} \in \mathbb{R}^{n_s}$ に関する系を構築するという，残差最小二乗近似型の縮減を提案し，Petrov-Galerkin projection と命名した [3]．このように残差を直接最小化することで，不安定な問題に対して Galerkin projection よりも頑健な縮減の実現が期待されている．

2.5　拡張 2： 複数部分空間の構築

Amsallem らは，Petrov-Galerkin projection による縮減の文脈で，複数の部分空間を構築し元の問題の局所的な挙動を低次元でより正確に近似することを試みる手法を提案した [1]．具体的には，k-means 法によるクラスタリングで解ベクトルを N_v 個のクラスタに分割した後，overlap と呼ばれる手続きを行って各クラスタを再構築，その後各クラスタについてスナップショット行列を作成し，Proper Orthogonal Decomposition で部分空間 $V_j \in \mathbb{R}^{N\times n_s}$ $(j = 1, \ldots, N_v)$ を構築する．縮減モデルの構築では，

$$U^{(n)} \approx U^{(n-1)} + V(U^{(n-1)})\Delta U^{(n)}$$

という近似の下 Petrov-Galerkin projection による縮減を考え，各ステップでは $U^{(n-1)}$ と各クラスタの中心とのユークリッド距離をはかり，最も近いクラスタの部分空間を選択する．なお，overlap とは，縮減モデルの計算で部分空間が切り替わる際の挙動を滑らかにすることを意図したもので，各クラスタについて他クラスタの解ベクトルを一部追加するという手続きを行う．

3 本研究とその結果

前節で述べた近年の拡張については，その優位性が報告されているのはごく限られた問題に対してのみであり，実際のパフォーマンスは不明な点が多いのが現状である．そこで，本研究では，漸近挙動がある程度知られているもののモデル縮減の分野ではあまり扱われてこなかった散逸型微分方程式を対象に数値実験を行い，これらの性能を評価した．なお，性能評価については，次の 2 つの論点に基づいて行った．

- 論点 1： Galerkin projection と Petrov-Galerkin projection の性能比較．
- 論点 2： 複数部分空間構築の効果検証．

拡散方程式および Allen-Cahn 方程式に対する論点 1 の結果では，Galerkin projection が優位となる場合があり，扱う問題毎に縮減手法を適切に選択する必要があることが新たに明らかとなった．Allen-Cahn 方程式に対する論点 2 の結果では，大幅な精度向上が観察され Amsallem らの手法の有効性が確認された．

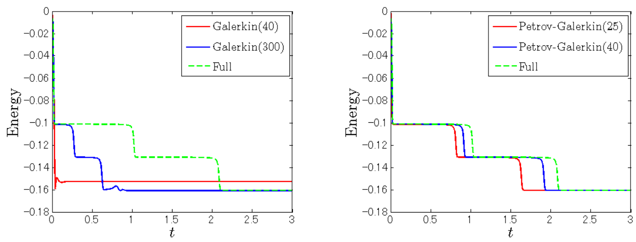
以下では，1 次元 Cahn-Hilliard 方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(-pu+ru^3-q\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right),\ (x,t)\in[0,L]\times[0,T]$$

に対する結果について述べる．

境界条件は $\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0\ (x=0,L)$，初期条件は $u(x,0) = 0.1\sin 2\pi x + 0.01\cos 4\pi x + 0.06\sin 4\pi x + 0.02\cos 10\pi x$ とし，パラメータは $p = 1$, $q = 0.001$, $r = 1$, $L = 1$, $T = 3$, $\Delta x = 2.0\times 10^{-3}$ $(N = 500+1)$, $\Delta t = 1.0\times 10^{-5}$, $N_{snaps} = 300$, $N_v = 3$ とした．離散化の手法には，離散変分法 [4] を用いた．

論点 1 の結果では，Galerkin projection による縮減の失敗が観察された一方で Petrov-Galerkin projection による縮減では比較的安定した挙動を示すことが観察され，Petrov-Galerkin projection がある程度頑健な手法であることが確認された（図 1 参照）．



(a) Galerkin. (b) Petrov-Galerkin.

図 1: 各縮減手法でのエネルギーの時間発展．

論点 2 の結果では，縮減次元を大きくしているにも関わらず，状態遷移のタイミングが大きくずれ，精度が悪化する現象が確認された（図 2 参照）．

また，方程式のパラメータ設定を変更して更なる検証を行ったところ，このような現象が更に顕著に現れるだけでなく，クラスタリングを行わない場合では数値的に不安定な現象が観察されることもある等，本研究で扱った各種モデル縮減手法は，Cahn-Hilliard 方程式に対して上手く働くとは言い難い結果が得られた．

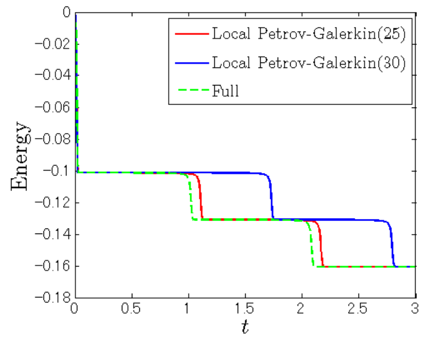


図 2: エネルギーの時間発展．

Cahn-Hilliard 方程式は，微小な揺らぎを拡大させる複雑なダイナミクスを形成し，数値計算において非常に難しい問題であることが古くから知られており，この難しさについては降旗・森の記念碑的研究 [5] によって一旦克服されたかに思われてきたが，本研究の結果は，モデル縮減という新たな観点でこの問題の解き方を再考する必要性を指摘するものである．

4 まとめ

本研究では，モデル縮減の分野で近年盛んに研究されている Petrov-Galerkin projection による縮減および複数部分空間の構築という 2 つの拡張について，散逸型微分方程式を対象とする数値実験を通して実際の性能を評価した．

Galerkin projection と Petrov-Galerkin projection の性能比較では，問題によっては Galerkin projection が優位となる場合があり，扱う問題毎に縮減手法を適切に選択する必要があることが新たに明らかとなった．

複数部分空間構築の効果検証では，精度向上が顕著に見られる問題もある一方で，Cahn-Hilliard 方程式では，かえって精度が悪くなる場合があることが分かり，以前より認識されていた数値計算上の「難しさ」をモデル縮減という観点から新たに指摘した．

参考文献

[1] D. Amsallem, M. J. Zahr and C. Farhat: Nonlinear model order reduction based on local reduced-order bases. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 92 (2012), pp. 891–916.

[2] K. Carlberg, M. Barone and H. Antil: Galerkin v. least-squares Petrov-Galerkin projection in nonlinear model reduction. *Journal of Computational Physics*, vol. 330 (2017), pp. 693–734.

[3] K. Carlberg, C. Bou-Mosleh and C. Farhat: Efficient non-linear model reduction via a least-squares Petrov-Galerkin projection and compressive tensor approximations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 86 (2011), pp. 155–181.

[4] D. Furihata and T. Matsuo: *Discrete variational derivative method*, Chapman & Hall/CRC, 2011.

[5] 降旗 大介，森 正武: 偏微分方程式に対する差分スキームの離散的変分による統一的導出. 日本応用数理学会論文誌, vol. 8 (1998), pp. 317–340.

[6] B. C. Moore: Principal component analysis in linear systems: controllability, observability, and model reduction. *IEEE Transactions on Automatic Control*, vol. 26 (1981), pp. 17–32.