修士論文 要旨

散逸型微分方程式の構造保存モデル縮減

数理情報学専攻 48176201 稲場 俊弥
指導教員 松尾 宇泰 教授

1 はじめに

高次元の力学系に対し，次元を落として低次元の問題に帰着させてから解くことで計算コストを抑える手法のことを，モデル縮減という．モデル縮減の中でも特に幅広く用いられる手法が，Galerkin 射影と POD（Proper orthogonal decomposition）[2] による基底の選び方の組み合わせであり，多くの力学系で良い挙動を示す．一方でこの縮減手法では，元の問題の持つ構造を破壊し，解が不安定になる場合がある．そこで，ハミルトン系の微分方程式に対しては，縮減先もハミルトン系になるような縮減により，安定な解を求める手法が近年提案された [3]．本研究はそれを応用し，散逸型微分方程式に対し，散逸性を保存する縮減手法を提案する．

2 既存研究

2.1 Galerkin 射影と POD

初期値 $\boldsymbol{u}_0 \in \mathbb{R}^n$ の n 次元の常微分方程式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{u}(t) = f(\boldsymbol{u}), \quad \boldsymbol{u}(0) = \boldsymbol{u}_0 \tag{1}$$

を考える．ここに，$\boldsymbol{u} : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^n$，$f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ である．この常微分方程式を $k(\ll n)$ 次元に落とす汎用的な手法が，Galerkin 射影である．列直交行列 $W_k \in \mathbb{R}^{n\times k}$，変数 $\tilde{\boldsymbol{u}} : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^k$ を用いた $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}_0 + W_k\tilde{\boldsymbol{u}}$ の変数変換のもとで，Galerkin 射影を用いると

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\tilde{\boldsymbol{u}}(t) = W_k^\top f(\boldsymbol{u}_0 + W_k\tilde{\boldsymbol{u}}(t)), \quad \tilde{\boldsymbol{u}}(0) = \boldsymbol{0} \tag{2}$$

という縮減モデルを構築できる．縮減行列 W_k は POD[2] により定められる．フルモデルを数値的に解いて得られた解を並べたスナップショット行列

$$M_x = [\boldsymbol{u}_1 - \boldsymbol{u}_0, \dots, \boldsymbol{u}_{n_s} - \boldsymbol{u}_0] \in \mathbb{R}^{n\times n_s} \tag{3}$$

に対し，M_x の特異値分解が $U \in \mathbb{R}^{n\times n}$，$\Sigma \in \mathbb{R}^{n\times n_s}$，$V \in \mathbb{R}^{n_s\times n_s}$ を用いて $M_x = U\Sigma V^\top$ と書けるとする．ただし，$r = \mathrm{rank}(M_x)$ とし，$\Sigma = \mathrm{diag}\,(\sigma_1, \dots, \sigma_r, 0, \dots, 0)$ は $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_r > 0$ を満たすものとする．このとき，U の左 k 列を U_1，右 $n-k$ 列を U_2 とおくと，$W_k = U_1$ が

$$\|M_x - W_kW_k^\top M_x\|_F^2 = \sum_{i=k+1}^{r} {\sigma_i}^2 \tag{4}$$

というフロベニウスノルムの最小誤差を達成する．

2.2 ハミルトン系の構造保存モデル縮減 ([3])

初期値 $\boldsymbol{u}_0 \in \mathbb{R}^{2n}$ の $2n$ 次元のハミルトン系

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}}{\mathrm{d}t} = J_{2n}\nabla_{\boldsymbol{u}}H(\boldsymbol{u}), \quad \boldsymbol{u}(0) = \boldsymbol{u}_0 \tag{5}$$

を考える．ここに，$\boldsymbol{u} : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^{2n}$，$H(\boldsymbol{u}) : \mathbb{R}^{2n} \to \mathbb{R}$ はエネルギー関数，J_{2n} は $J_{2n} = \begin{pmatrix} O & I_n \\ -I_n & O \end{pmatrix}$ を満たす行列である．

縮減行列 $A \in \mathbb{R}^{2n\times 2k}$ を用いて $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}_0 + A\tilde{\boldsymbol{u}}$ ($\tilde{\boldsymbol{u}} : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^{2k}$) とモデル縮減を行う．なお，初期値を除く手法は文献 [1] で考察されている．$A^\top J_{2n}A = J_{2k}$ を満たす A を縮減行列に選び，$A^+ = J_{2k}^\top A^\top J_{2n}$ を用いた射影を行うことで，

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{\boldsymbol{u}}}{\mathrm{d}t} = J_{2k}\nabla_{\tilde{\boldsymbol{u}}}H(\boldsymbol{u}_0 + A\tilde{\boldsymbol{u}}), \quad \tilde{\boldsymbol{u}}(0) = \boldsymbol{0} \tag{6}$$

というハミルトン系の縮減モデルを構築でき，安定な解が得られる．

3 提案手法

以上の背景を踏まえ，本研究では散逸型微分方程式（散逸系）の構造保存モデル縮減について提案する．初期値 $\boldsymbol{u}_0 \in \mathbb{R}^n$ の n 次元の散逸系

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}}{\mathrm{d}t} = B_n\nabla_{\boldsymbol{u}}H(\boldsymbol{u}), \quad \boldsymbol{u}(0) = \boldsymbol{u}_0 \tag{7}$$

を考える．ここに，$\boldsymbol{u} : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^n$，$H(\boldsymbol{u}) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ はエネルギー関数，$B_n \preceq O(\in \mathbb{R}^{n\times n}, \text{対称行列})$ である．散逸系は，エネルギーの散逸性 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}H(\boldsymbol{u}) \leq 0$ を満たす．

縮減行列 $W_k \in \mathbb{R}^{n\times k}$ を用いて $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}_0 + W_k\tilde{\boldsymbol{u}}$ のモデル縮減を行う．ある $B_k \preceq O(\in \mathbb{R}^{k\times k})$ と射影行列 $W_k^- \in \mathbb{R}^{k\times n}$ に対し

$$W_k^-W_k = I_k, \quad W_k^-B_n = B_kW_k^\top \tag{8}$$

が成り立つとき，縮減先が

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{\boldsymbol{u}}}{\mathrm{d}t} = B_k\nabla_{\tilde{\boldsymbol{u}}}H(\boldsymbol{u}_0 + W_k\tilde{\boldsymbol{u}}) \tag{9}$$

と散逸系になる．構造保存の条件 (8) 式は以下が十分条件である．

$$W_k^- : \mathrm{rank}\text{ が } k \text{ の } k\times n \text{ 行列}, \tag{10}$$

$$B_k = W_k^- B_n (W_k^-)^\top \text{: 正則}, \tag{11}$$

$$W_k = B_n^\top (W_k^-)^\top (B_k{}^{-1})^\top. \tag{12}$$

特に (10) 式で，任意の正則行列 $X \in \mathbb{R}^{k\times k}$ に対し $W_k^- = XU_1^\top B_n^\dagger$ とおくことで，縮減誤差

$$\sum_{i=k+1}^{r}\left(\left\|\left(U_1^\top B_n^\dagger U_1\right)^{-1} U_1^\top B_n^\dagger U_2(:,i-k)\right\|_2^2+1\right)\sigma_i{}^2 \tag{13}$$

を達成する．これは誤差の指標の 1 つを最小化する形での縮減になる．

4 数値実験

1 次元，2 次元 Cahn–Hilliard 方程式を用いて数値実験を行った．Cahn–Hilliard 方程式は数値的に解きづらい散逸系の方程式であり，特にモデル縮減における難しさが文献 [4] で指摘されている．実験に使用した環境は，OS が Windows 10 Education，CPU が Intel(R) Core(TM) i7-6820HQ @2.70GHz，メインメモリが 16GB である．実装には MATLAB Version 9.1.0.441655(R2016b) を用いた．各数値実験は 10 回ずつ行った．時間の結果は平均時間（± 標準偏差）の形で表す．また，両実験ともに，スナップショットはフルモデルの結果全てを使用しており，方程式のパラメータは $p=-1.0, q=-0.001, r=1.0$ を用いている．前章の正則行列 X は $X=(-U_1^\top B_n^\dagger U_1)^{-\frac{1}{2}}$ を使用した．

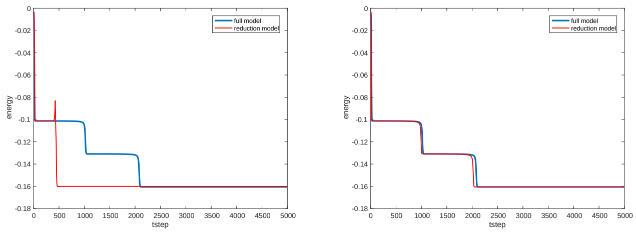
4.1 1 次元 Cahn–Hilliard 方程式

$x \in [0,1]$ で 1 次元 Cahn–Hilliard 方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(pu + ru^3 + q\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right) \tag{14}$$

の数値実験を行った．境界条件は $\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0(x=0,1)$ を課した．$n=501$ 点で離散化を行い，$\Delta t = 0.001$ で 5000 ステップ解いた．

図 1 が POD と提案手法における，エネルギー変化を表す．以降の図も含め，青線がフルモデルの結果，赤線が縮減モデルの結果を表す．図より，POD では $k=30$ の縮減でエネルギー散逸性が破壊されている一方で，提案手法では $k=5$ の低次元でエネルギー散逸を保った安定な解が得られていることがわかる．計測時間は，フルモデルが 2.795(± 0.068) 秒，$k=5$ の提案手法が 0.822(± 0.067) 秒であった．低次元に縮減できたことから，高速化が見られる．



(a) POD($k=30$)　(b) 提案手法 ($k=5$)

図 1: エネルギー変化（1 次元）

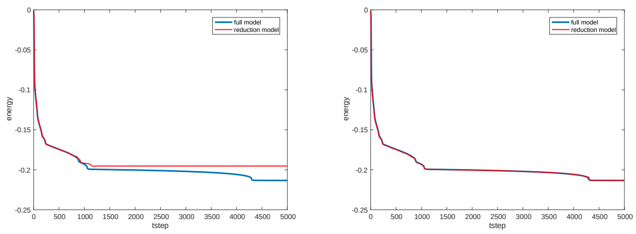
4.2 2 次元 Cahn–Hilliard 方程式

$(x,y) \in [0,1]\times[0,1]$ で 2 次元 Cahn–Hilliard 方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta\left(pu + ru^3 + q\Delta u\right) \tag{15}$$

の数値実験を行った．境界条件は $\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0(x=0,1)$, $\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial^3 u}{\partial y^3} = 0(y=0,1)$ を課した．$n=961$ 点（各軸 31 点）で離散化を行い，$\Delta t = 3/2000$ で 5000 ステップ解いた．

図 2 が POD と提案手法のエネルギー変化を表す．図より，提案手法は，POD より低次元で安定な解が得られることがわかる．計測時間は，フルモデルが 95.978(± 0.901) 秒，$k=20$ の提案手法が 5.140(± 0.070) 秒であった．縮減による大幅な時間改善が見られる．



(a) POD($k=40$)　(b) 提案手法 ($k=20$)

図 2: エネルギー変化（2 次元）

参考文献

[1] Yuezheng Gong, Qi Wang, and Zhu Wang. Structure-preserving Galerkin POD reduced-order modeling of Hamiltonian systems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, No. 315, pp. 780–798, 2017.

[2] Bruce C. Moore. Principal component analysis in linear systems: Controllability, observability, and model reduction. *IEEE transactions on automatic control*, Vol. 26, No. 1, pp. 17–32, 1981.

[3] Liqian Peng and Kamran Mohseni. Symplectic model reduction of Hamiltonian systems. *SIAM Journal on Scientific Computing*, Vol. 38, No. 1, pp. A1–A27, 2016.

[4] 柳澤広大. 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. 修士論文, 東京大学, 2018.