

1D08 拡張DEIM法に対するモード数及びセンサ数の パラメトリックスタディ

○小林亜藍，佐々木康雄，野々村拓（名古屋大学）

Parametric study of the number of modes and sensors for the extended DEIM method

○Aran Kobayashi and Yasuo Sasaki and Taku Nonomura (Nagoya University)

Key Words : DEIM, Reduced order Modeling, Numerical analysis, Parametric study, Numerical Analysis

Abstract

In this study, overestimated discrete empirical interpolation method (ODEIM), an extension of discrete empirical interpolation method (DEIM) is proposed, and a parametric study by varying the number of modes and sensors is conducted. Conventional DEIM employs the QR method to determine sensor locations, which places an upper limit on the number of sensors. However, ODEIM employs the determinant-based greedy method, which allows an arbitrary number of sensors. The two problems we addressed are one involving a numerically unstable time evolution, and the other involving a numerically stable steady state. For these two problems, parametric studies using DEIM and ODEIM are carried out to examine criteria for appropriate parameter selection.

1. 緒論

流体力学の研究ではシミュレーションが頻繁に用いられるが，計算コストやメモリ使用量が膨大になる．特に，フィードバック制御などの高い応答性が求められる制御系ではリアルタイムでの実装が困難になる課題がある．これらの問題を解決するため，高次元空間から低次元化空間へと元データの特性を保持したまま次元削減を行う低次元化手法が古くから用いられてきた．Chaturantabutら^[1]はDEIM (Discrete Empirical Interpolation Method) を提案し，それまで困難であった非線形項（時間発展方程式の時間微分項以外で非線形となる部分）の低次元化に成功した．DEIMでは，まず固有直交分解（Proper Orthogonal Decomposition: POD）^[2, 3, 4, 5, 6]により支配的なモードに分解した後，QR分解を用いて非線形項の空間分布を良く表現する複数のスパースなセンサ点を選択する．そのセンサ点のみの低次元化された空間で計算を行った後，非線形項の空間を再構成して場全体の近似解を求める．これにより計算コストが大幅に削減される．しかし，QR分解でセンサ点を決定する従来のDEIMでは，センサ数を非線形項のPODでの打ち切りモード数よりも大きくすると，適切なセンサ位置が選択できない．すなわち，従来のDEIMではセンサ数を増やせない課題がある．

Saitoら^[7, 8, 9]は，行列式ベースの高速貪欲センサ選択アルゴリズム（Determinant-Based Fast Greedy Sensor Selection Algorithm: DG）を提案した．DG法は，行列式の最大化を用いた貪欲的なセンサ点選択アルゴリズムであり，これを用いることでセンサ数を非

線形項のモード数と関係なく増やすことが可能になる．そこで我々は，DG法によってセンサ点を求めるODEIM (Overestimated-DEIM) を導入して，従来のDEIMを拡張した．本研究では，非線形項を含む問題に対してDEIMとODEIMを適用し，モード数やセンサ数を系統的に変化させるパラメトリックスタディを実施することで，適切な選択基準を明らかにする．具体的には，液面形状の緩和問題，ラプラス方程式の定常問題の2つの問題を対象とし，DEIMとODEIMのそれぞれの誤差を評価する．

2. 研究手法

2.1 DEIM

例として，次に示すような非線形項 $f(x)$ と線形項 $Ax(t)$ からなる微分方程式を考える．

$$\dot{x} = f(x) + Ax(t) \quad (1)$$

まず，主変数のデータセット $X \in \mathbb{R}^{n \times m}$ と非線形項分布のデータセット $F \in \mathbb{R}^{n \times m}$ を事前に用意し，図1のようにそれぞれに対してPODを行い支配的なモードに分解する．この時の打ち切りモード数をそれぞれ r_x , r_f と置く．

$$X \approx U_x \Sigma_x V_x^T \quad (2)$$

$$F \approx U_f \Sigma_f V_f^T \quad (3)$$

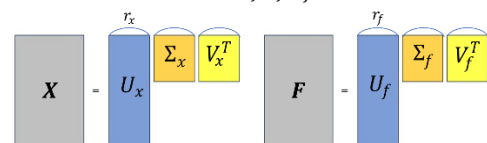


図1 2つのPODの概略図

次に、QR分解により p 箇所のセンサ点を選ぶ．式2で得られた非線形項の上位 r_f までの空間モード \mathbf{U}_f の転置 \mathbf{U}_f^T に対してピボットQR分解を行う．ピボットQR分解は通常のQR分解に加えて置換行列 \mathbf{P} を用いて列を入れ替えることで安定性を高める分解方法である．置換行列 \mathbf{P} によって選ばれる点は線形独立性が高く多くの情報を持ちセンサ点にふさわしいため，選ばれた点の順に p 箇所のセンサ点を決定する．このQR分解によるセンサ位置最適化手法をQR法^[10]と呼ぶこととする．また，二つの打ち切りモード数 r_x 、 r_f とセンサ数 p の3つが今回のパラメトリックスタディで変更するパラメータである．

$$\mathbf{U}_f^T \mathbf{P} = \mathbf{Q}\mathbf{R} \quad (3)$$

選ばれた p 点のセンサ点を決定し，それらの点のみで計算を行った後，再構築することで場全体の近似解を得る．しかし，QR法では被分解行列の行数よりも多いセンサ数を選択できないため，従来のDEIMはセンサ数 p を非線形項のモード数 r_f よりも大きくすることはできない，すなわち， $p \leq r_f$ という制限がある．

2.2 Overestimated-DEIM (ODEIM)

センサ数 p をモード数の制限なく増やすことができるよう，QR法^[10]をDG法^[7, 8, 9]に変更してDEIMを拡張したODEIMを導入する．二つの教師データに対してPODを行い，支配的なモードに分解するのは先ほどと同様である．次にDG法を用いて p 箇所のセンサ点を定める．センサ位置に1があり他の成分はすべて0の行列であるセンサ位置選択行列 \mathbf{H} を導入し，以下のように行列 \mathbf{C} を定める．

$$\mathbf{C} = \mathbf{H}\mathbf{U}_f \quad (4)$$

行列 \mathbf{C} に対して，次のように表されるFisher情報行列

$$\begin{cases} \mathbf{C}\mathbf{C}^T & (p \leq r_f) \\ \mathbf{C}^T \mathbf{C} & (p > r_f) \end{cases} \quad (5)$$

の行列式が最大となる1点をセンサ点位置として選択する．これを p 点まで貪欲的に繰り返すことですべてのセンサ点を決定する．それ以降の流れはDEIMと同様である．センサ数 p が非線形項のモード数 r_f よりも小さい場合はDG法はQR法の結果に丸め誤差の範囲内で一致することが先行研究で示されている^[8]．DG法により非線形項のモード数 r_f よりも多いセンサ数を適切に選択できるため，DEIMを拡張したODEIMでは，センサ数 p が r_f よりも大きくできる．

3. 数値計算条件

3.1 液面形状の緩和問題

本研究では二つの数値計算問題を扱った．一つ目は数値的に不安定な時間依存問題である液面形状の緩和問題を扱った．主変数を液面の高さ $h(x, t)$ とし，座

標 x を129点に離散化した空間で初期条件から液面が緩やかになる時間発展を求める．Shiratori ら^[11]は同条件をデータ同化手法の研究に用いている．表1に計算条件をまとめる．

表1 液面形状の緩和問題の計算条件

主変数	$h(x, t)$
座標と離散化	x ($-10 \leq x \leq 10$, 129点)
支配方程式	$\frac{\partial h}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(h^3 \frac{\partial^3 h}{\partial x^3} \right)$
境界条件	$\frac{\partial h}{\partial x} = \frac{\partial^3 h}{\partial x^3} = 0$ at $x = x_{\min}, x_{\max}$
初期条件	$h_{\text{ini}}(x) = (2 - 2x)e^{-\frac{x^2}{2}} + 1$
時間刻み	$\Delta t = 5 \times 10^{-6}$ (100000回, $t = 0.5$ まで)

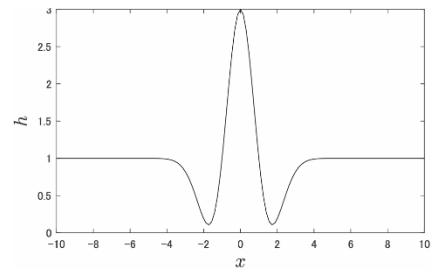


図2 液面分布の初期条件

同じ初期条件と計算条件に対して，オイラー陰解法により事前に $t = 0.5$ sまで計算を行い，その計算結果を基に $t = 0.0025$ s毎の，液面高さ $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^{129 \times 1}$ を列方向に並べた， $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{129 \times 200}$ を主成分の教師データとした．同様に， $t = 0.0025$ s毎に，表1の支配方程式の右辺 $\mathbf{f} \in \mathbb{R}^{129 \times 1}$ を列方向に並べた， $\mathbf{F} \in \mathbb{R}^{129 \times 200}$ を非線形項分布の教師データとした．

また，オイラー陰解法を用いて計算した結果を真値とし，以下に示す式のようにDEIM法，ODEIM法により計算した結果とのL2ノルムを誤差の評価値として用いた．

$$\text{Error} = \frac{\|\mathbf{h} - \hat{\mathbf{h}}\|_2}{\|\mathbf{h}\|_2} = \frac{\sqrt{\sum_x |h_x - \hat{h}_x|^2}}{\sqrt{\sum_x |h_x|^2}} \quad (6)$$

3.2 ラプラス方程式の定常問題

二つ目は数値的に安定な二次元のラプラス方程式の定常問題を扱った．ラプラス方程式には時間に当たる t が含まれないため，時間により変化しない定常状態を表す偏微分方程式となる．主変数を $u(x, y)$ とし， xy 平面に対して， x と y 方向にそれぞれ50点で離散化し， xy 平面を計2500点に離散化した空間でラプラス方程式の定常状態を求める．定常状態は反復法の一つである逐次加速緩和法 (Successive Over-

Relaxation : SOR) を用いて計算した．表2に計算条件をまとめる．

表2 液面形状の緩和問題の計算条件	
主変数	$u(x,y)$
座標と離散化	x,y ($0 \leq x,y \leq 1$, 2500点)
支配方程式	$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\mu_1}{\mu_2}(e^{\mu_2 u} - 1)$ $= 100 \sin 2\pi x \sin 2\pi y$ $(\mu_1 = 0.2, \mu_2 = 3)$
境界条件	$u = 0$ $x = x_{\min}, x_{\max}$ $y = y_{\min}, y_{\max}$

本研究では例として定数 μ_1, μ_2 に対して、 $\mu_1 = 0.2$, $\mu_2 = 3$ の場合について計算を行ったが、事前にフル次元空間で $0.01 < \mu_1 < 10$, $0.01 < \mu_2 < 10$ を満たすランダムな μ_1, μ_2 に対して144回の定常計算を行い、得られた定常状態 \mathbf{u} と非線形項 $\frac{\mu_1}{\mu_2}(e^{\mu_2 u} - 1)$ を144個格納した行列をそれぞれ教師データとした．

また、フル次元で計算した結果を真値とし、以下に示す式のようにDEIM, ODEIMにより計算した結果とのL2ノルムを誤差の評価値として用いた．

$$Error = \frac{\|\mathbf{u} - \hat{\mathbf{u}}\|_2}{\|\mathbf{u}\|_2} = \frac{\sqrt{\sum_x \sum_y |u_{x,y} - \hat{u}_{x,y}|^2}}{\sqrt{\sum_x \sum_y |u_{x,y}|^2}} \tag{6}$$

4. 結果及び考察

4.1 液面形状の緩和問題における誤差

まず液面形状の緩和問題をDEIMで計算した結果を示す．図4は液面形状の緩和する様子であり、左側の図に真値の計算結果、右側の図にDEIMを用いた計算結果を示す．また右側の図の赤色の点は10点のセンサ位置である．図4右側の図は、この10点のみの情報で定性的に場全体が近似できることを示す．

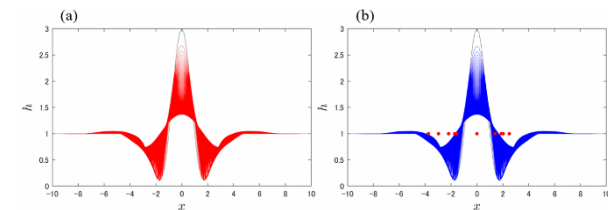


図4 液面形状の模式図 (a)真値 (b)DEIM $r_x, r_f = 10$

次に、 r_x と r_f をそれぞれ1から30まで変化させたときの、誤差を以下に示す．ただし、2.1節で述べた通り、DEIMでは $r_f = p$ という制約がある．

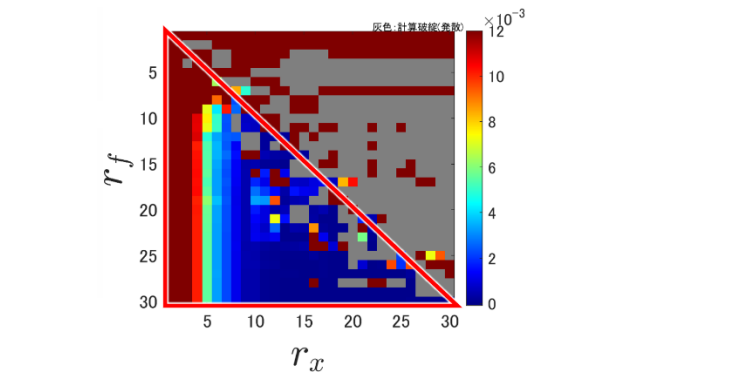


図5 液面形状の緩和問題のDEIMの誤差

図5のグレーの条件では計算が発散したことを示す．グレーや誤差の値が大きい（赤色）で示される条件では近似精度が悪いことを示す．赤色の三角形で囲まれた $r_x < r_f$ の条件で誤差が小さい傾向があるが、特異的に誤差が大きくなり近似できない条件もあり、適切なパラメータを設定する必要がある．

次に、ODEIMを用いて $p = r_f$ の制約を取り除く．まず、 $p = r_f + 1$ として r_x, r_f を1から30まで変化させた時の誤差を図6の左側に示す．また、DEIMの結果から $r_x < r_f$ の条件のみを計算した．

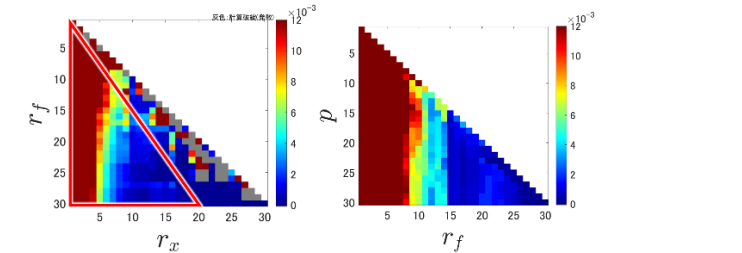


図6 液面形状の緩和問題のODEIMの誤差

ODEIMでは赤色の三角形で囲まれた $r_f/r_x > 1.5$ の条件で発散が回避でき、良好な近似解を求められる．発散を回避した上で、 r_f が小さくて済むよう、 $r_f/r_x \approx 1.5$ を満たすように r_x, r_f を設定し、センサ数 p を変化させて誤差を求めた結果、多くの r_f で p を r_f より3程度大きく設定すると誤差が十分に小さくなり、 p を大きくしても誤差が大きく減少しないことがわかった．ただし、モード数によって、誤差を最小にするセンサ数 p と r_f の差は異なり、明確な規則性は得られなかった．

計算時間について、真値としたオイラー陰解法と $r_x = r_f = p = 10$ におけるODEIMの計算時間を対数スケールで以下の図に示す．

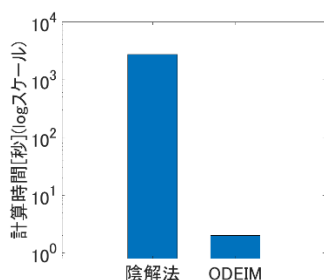


図7 液面形状の計算時間の比較

今回の計算では、 10^3 オーダーで計算時間を削減することができた。これは、低次元化による削減に加えて、フル次元の計算では安定性の観点から陰的時間発展法を利用した上で小さな時間刻みを採用したため計算時間が増加したことも理由として挙げられる。

4.2 ラプラス方程式の定常問題における誤差

二次元のラプラス方程式の定常問題をDEIMで計算した結果を示す。図8に示すラプラス方程式の定常問題の解より、DEIMで良好な近似結果が得られる。また、図9の赤色の点は $r_x, r_f = 10$ のDEIMのセンサ点位置を表しており、この10点のみの情報で場全体の解を求められた。

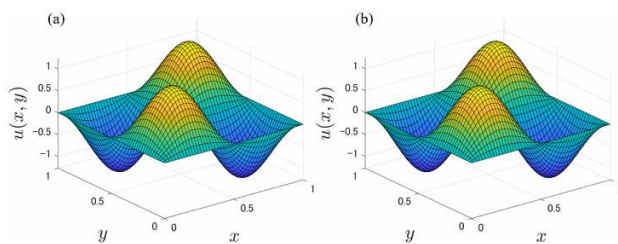


図8 ラプラス方程式の解(a)真値(b)DEIM $r_x, r_f = 10$

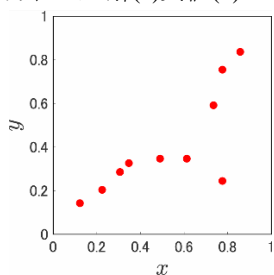


図9 $r_x, r_f = 10$ のDEIM法のセンサ点

次に、 r_x と r_f をそれぞれ1から30まで変化させたときの、誤差を以下に示す。ただし、2.1節で述べた通り、DEIMでは $r_f = p$ という制約がある。ただし、液面形状の緩和問題の結果から $r_x < r_f$ の条件のみを計算した。

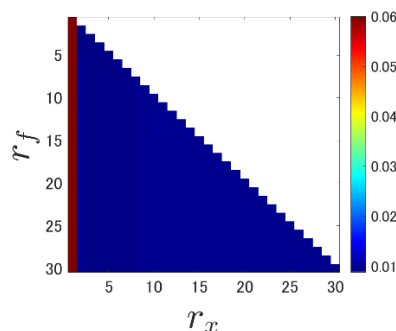


図10 ラプラス方程式の定常問題のDEIMの誤差

この結果から、本問題では $r_x \geq 2$ で良好な近似結果が得られ、 r_f の値は結果に影響を及ぼさないことがわかった。また、 $r_x \geq 2$ であれば、 r_x, r_f は誤差に影響を与えない。続いてODEIMを用いて $r_x = r_f$ のもとでセンサ数 p を変化させた結果を以下に示す。

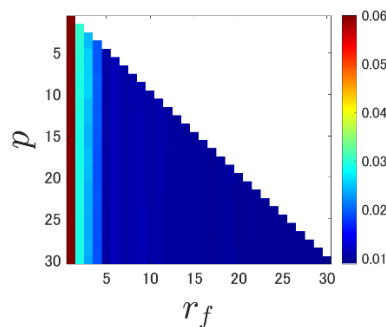


図11 ラプラス方程式の定常問題のODEIMの誤差

ODEIMの場合も、広い条件で近似でき、 p は誤差とは無関係である。すなわち、 r_x が大きければ、 r_f, p の値に関わらず安定した結果が得られる。以上よりラプラス方程式の定常問題に対してはDEIMで十分であると結論付けられる。

計算時間について、真値としたフル次元と $r_x = r_f = p = 10$ におけるODEIMの計算時間を対数スケールで以下の図に示す。今回の計算では約85%計算時間を削減できた。

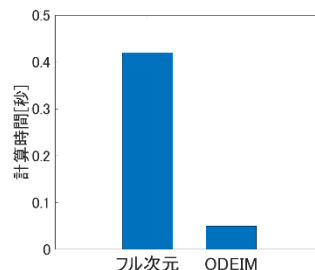


図12 ラプラス方程式の計算時間の比較

5. 結言

本研究では、DEIMとそれを拡張したODEIMの二つの低次元化手法を用いて次元削減の有効性と精度の検討を行った。限られた計算モデルではあるが、数値

的に不安定な時間依存問題に対してはODEIMを用いて適切なパラメータを設定する必要がある一方で、数値的に安定で定常状態を求める問題に対しては幅広いパラメータで近似可能であり、DEIMで十分であることが示唆された。また、全ての場合で計算時間を大幅に削減することができた。

今後は未知の初期条件での計算や、より小さい情報量の教師データによる低次元計算の検討が期待される。

参考文献

- [1] S.Chaturantabut, D.C.Sorensen, Nonlinear model reduction via discrete empirical interpolation, *SIAM Journal on Scientific Computing* 32 (5) (2010) 2737–2764.
- [2] 平 邦彦, “固有直交分解による流体解析 : 1. 基礎,” *ながれ* 30 (2011), 115-123.
- [3] G. Berkooz, P. Holmes, J. L. Lumley, The proper orthogonal decomposition in the analysis of turbulent flows, *Annual review of fluid mechanics* 25 (1) (1993) 539–575. doi:10.1146/annurev.fl.25.010193.002543.
- [4] P. Holmes, J. L. Lumley, G. Berkooz, *Turbulence, coherent structures, dynamical systems and symmetry*, Cambridge monographs on mechanics and applied mathematics, Cambridge University Press, Cambridge, 1998.
- [5] Segawa K., J. L. Lumley, *The structure of inhomogeneous turbulent flows*, Atmospheric turbulence and radio wave propagation (1967).
- [6] Z.Drmac, S.Gugercin, A new selection operator for the discrete empirical interpolation method improved a priori error bound and extensions, *SIAM Journal on Scientific Computing* 38 (2) (2015).
- [7] Y. Saito, T. Nonomura, K. Nankai, K. Yamada, K. Asai, Y. Sasaki, D. Tsubakino, Data-driven vector-measurement-sensor selection based on greedy algorithm, *IEEE Sensors Letters* 4 (2020) 7002604.
- [8] Y. Saito, T. Nonomura, K. Yamada, K. Nakai, T. Nagata, K. Asai, Y. Sasaki, D. Tsubakino, Determinant-based fast greedy sensor selection algorithm, *IEEE Access* 9 (2021) 68535–68551.
- [9] Y. Saito, K. Yamada, N. Kanda, K. Nakai, T. Nagata, T. Nonomura, K. Asai, Data-driven determinant-based greedy under/oversampling vector sensor placement, *Computer Modeling in Engineering & Sciences* (Accepted: 23 June 2021).
- [10] K. Manohar, B. W. Brunton, J. N. Kutz, S. L. Brunton,

Data-driven sparse sensor placement for reconstruction: Demonstrating the benefits of exploiting known patterns, *IEEE Control Systems Magazine* 38 (3) (2018) 63–86.

- [11] 白鳥英, 武田唯, 中村耀, 山口郁斗, 永野秀明, 島野健仁郎, *Physics-informed neural network* を用いた高速なデータ同化法, 日本流体力学会年会(2020).