

変分原理に基づく流体力学の縮約モデルの構築

小島直泰 指導教員：鈴木宏二郎教授

東京大学大学院工学系研究科航空宇宙工学専攻

1. 序論

1.1 背景

近年、流体力学や構造力学等の数値シミュレーションは、航空宇宙工学をはじめ様々な分野で重要なものとなっている。しかし、コンピュータの性能が向上した現在においてもその計算コストは低くなく、パラメータ等を変えての多数の計算を行うことは困難であり、リアルタイム計算を行い制御に利用することは現状不可能である。

そこで、多自由度の問題を少数自由度でうまく近似し計算量を削減する手法として縮約モデル (Reduced Order Model; ROM) が研究されている。縮約モデルは、事前に適用する問題のパラメータ群の中で行った計算の結果から求められる、少数でよく物理量を近似する基底を用いて構成される。

事前計算の結果を用いるため、適用できる問題は限定されるものの、実用上はパラメータを変える程度の計算を行うことは多くあり、そのような場面で応用が期待される。これにより、あるクラスの問題に対しては計算速度が飛躍的に向上し、流体現象等のリアルタイム計算やそれによる制御が可能になることが期待される。

1.2 POD-Galerkin 法

最も一般的な縮約モデルを作成する手法は POD-Galerkin 法によるものである [Kunisch and Volkwein, 2002]。これは、事前計算により、物理量を少ない数で効率よく表すために最適なモードを抽出する手法である固有直交分解 (Proper Orthogonal Decomposition; POD) [Jolliffe, 2002] を用いて POD モードを計算し、そのモードに対して Galerkin projection を行い支配方程式を射影することで POD モードの時間発展方程式を得る手法である。

1.3 縮約モデルの課題

最もよく知られている方法である POD-Galerkin 法による縮約モデルには次のような課題が知られている [Stabile and Rozza, 2018; Schilders et al., 2008; Bungartz et al., 2010]。

- 元の系が安定であっても、縮約モデルの安定性が必ずしも保証されない。
例) 保存系であっても解が発散に向かう等
- 境界条件の影響を考慮することが難しい。
- 連成問題への適用が難しい。

1.4 変分原理に基づく縮約モデル

[Lall et al., 2003; Carlberg et al., 2015] では、特に構造力学に対して変分原理に基づく縮約モデルが構成されている。変分原理とは、実現する運動をある作用積分の値を停留させる問題として表現する手法である。多くの物理的問題は変分原理を用いた記述が可能であり、これにより保存則を考えやすくなるといった利点がある。

変分原理に基づき縮約モデルを構築する方法では、支配方程式 (偏微分方程式) から直接縮約モデルを導くのではなく、支配方程式を変分原理によってあらわし、その変分問題を使って縮約モデルを導く。これにより、力学系の変分原理的構造から導かれる保存則等の性質を縮約モデルに対しても引き継ぐことができる。

1.5 研究目的

本研究では、変分原理に基づく流体力学の縮約モデルを構築し、流体力学の構造保存縮約モデルを作成する。これにより、安定性等の問題点を改善することを目的とする。

変分原理に基づく方法では上記のように安定性が保証されることや、連成問題も変分原理を用いて自然に表現することができるため連成問題に対しても適用がしやすいこと、境界条件も拘束条件として取り扱いが可能であること等が期待される。

2. KdV 方程式の縮約モデル

2.1 KdV 方程式

KdV 方程式 (Korteweg-De Vries 方程式) とは、

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \epsilon^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0 \quad (1)$$

で表される浅水波等の非線形波動を記述する非線形偏微分方程式の一つである。ソリトン解をもつ可積分系の代表的な例であり、無限個の独立な保存量を持つといった特徴がある。また、KdV 方程式は変分原理を用いた記述が可能である [Cooper et al., 1993; Nutku, 1984]。

2. KdV 方程式の縮約モデル

2.2 POD-Galerkin 法による KdV 方程式の縮約モデル

偏微分方程式から直接 POD-Galerkin 法によって縮約モデルを構築する。POD モード ϕ_i による近似を行う。

$$u(x, t) \approx \sum_i a_i(t) \phi_i(x) \quad (2)$$

(2)を(1)に代入すると、次の式を得る。

$$\sum_j \dot{a}_j \phi_j + \sum_{j,k} a_j a_k \phi_j \phi_k' + \sum_j \epsilon^2 a_j \phi_j''' = 0 \quad (3)$$

(3)の両辺に a_i を掛けて積分 ($\int_{\Omega} (\cdot) \phi_i dx$) し、POD モードの正規直交性を使って整理すると、次の POD モードの係数の時間発展方程式が得られる。

$$\dot{a}_i = -a_j a_k \int_{\Omega} \phi_i \phi_j \phi_k' dx - \epsilon^2 a_j \int_{\Omega} \phi_i \phi_j''' dx \quad (4)$$

2.3 変分原理に基づく KdV 方程式の縮約モデル

ここでは、KdV 方程式(1)を直接近似するのではなく、変分原理

$$\delta \int dt \int dx \mathcal{L} = 0, \quad \mathcal{L} = \frac{\epsilon^2}{2} \Psi_{xx}^2 - \frac{1}{2} \Psi_x \Psi_t - \frac{1}{6} (\Psi_x)^3 \quad (5)$$

を近似する (ただし、 Ψ は速度ポテンシャルで、 $\Psi_x = u$)。速度ポテンシャルを Ψ の POD モードを ψ_i で表し、(5)を近似すると、次のようになる。

$$\mathcal{L} \approx \tilde{\mathcal{L}} = \int_{\Omega} \left(\frac{\epsilon^2}{2} a_j a_k \psi_j'' \psi_k'' - \frac{1}{2} a_j \dot{a}_k \psi_j' \psi_k' - \frac{1}{6} a_j a_k a_l \psi_j' \psi_k' \psi_l' \right) dx \quad (6)$$

近似された変分原理は $\delta \int dt \tilde{\mathcal{L}} = 0$ から導かれる a_i についての停留条件を考えると、次の微分方程式が得られる。

$$\dot{a}_j \int_{\Omega} (\psi_j' \psi_j - \psi_j \psi_j') dx = 2\epsilon^2 a_j \int_{\Omega} \psi_j'' \psi_j'' dx - a_j a_k \int_{\Omega} \psi_j' \psi_j' \psi_k' dx \quad (7)$$

近似された Lagrangian(6)は時間に陽に依らず、時間並進対称性を持つため、Noether の定理より、次の量が保存量となる。

$$\tilde{E} = -\frac{\epsilon^2}{2} a_j a_j \int_{\Omega} \psi_j'' \psi_j'' dx + \frac{1}{6} a_j a_j a_k \int_{\Omega} \psi_j' \psi_j' \psi_k' dx = \tilde{I}_3 \quad (8)$$

これは連続系での保存量の一つ $I_3 = \int \left\{ -\frac{\epsilon^2}{2} u_x^2 + \frac{1}{6} u^3 \right\} dx$ を速度ポテンシャルの POD モード ψ_i を用いて近似したものに他ならない。

2.4 数値計算例

計算条件を表1に示す。この条件で差分法による FOM(Full Order Model) と POD の計算を事前に行い、縮約モデルの計算を行った。

表 1. 問題設定

方程式のパラメタ	$\epsilon = 0.022$
計算領域	$x \in \Omega = [0, 2)$
境界条件	周期境界
初期条件	$u(x, 0) = \cos(\pi x)$

縮約モデルの時間刻みを変分原理に基づく方法では $\Delta t = 1/1000$, POD-Galerkin 法では $\Delta t = 1/10000$ として計算を行った場合について計算結果の一部を図1に示す。いずれも赤線が差分法による FOM, 黒線が ROM を表す。

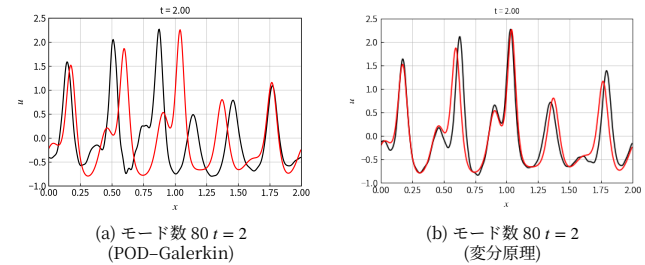


図 1. KdV 方程式の ROM

保存量 \tilde{E} の時間履歴を POD-Galerkin 法と変分原理に基づく ROM のそれぞれの場合について図2に示す。

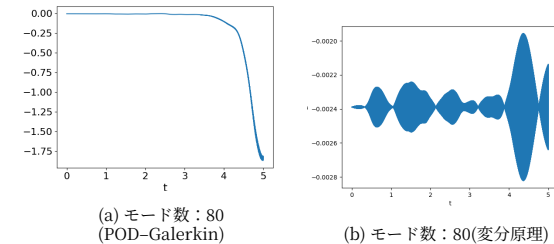


図 2. 保存量の時間履歴

2.5 ここまでのまとめ

変分原理による方法と Galerkin 法による方法で ROM を構築した。時間刻みを固定すると、POD-Galerkin 法ではモード数を増やすと計算が発散する結果となった。誤差等の解析では変分原理に基づく ROM の方がよく FOM と一致する結果となった。

また、変分原理に基づく ROM では保存系となっていることが数式でも数値計算でも示された。変分原理に基づく ROM は、保存量の性質を引き継ぐ構造保存となっており、計算も安定化しやすいものであることが確かめられた。

境界条件については周期境界以外の境界条件は考慮されておらず、その他の境界条件については今後の課題である。

3. 圧縮性非粘性流体の縮約モデル

3.1 定式化

圧縮性非粘性流体の変分原理として、次のものを考える。

$$\delta \int_{t_{ini}}^{t_{fin}} dt \int_{\Omega} \mathcal{L} dV = 0 \quad (9)$$

$$\mathcal{L} = \rho \left(\frac{1}{2} v^2 - \epsilon(\rho, s) \right) - \kappa \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v) \right) - \lambda D_t s \quad (10)$$

ただし、 v は速度、 ρ は密度、 s は比エントロピー、 ϵ は比内部エネルギー、 κ, λ はそれぞれ質量保存と断熱条件の拘束条件の未定乗数であり、 D_t は物質微分を表す。物理量 v, ρ, s をそれぞれ POD モード V_i, R_i, S_i を用いて次のように近似する。

$$v(x, t) \approx \sum_i^N a_i(t) V_i(x), \quad \rho(x, t) \approx \sum_i^M b_i(t) R_i(x), \quad s(x, t) \approx \sum_i^L c_i(t) S_i(x) \quad (11)$$

また、拘束条件である質量保存および断熱条件の式はそれぞれ重み関数 $W_{1k}(x)$ および $W_{2l}(x)$ と未定乗数 $K(t)$ と $\Lambda(t)$ を用いて近似する。

以上を用いて変分原理(9)を近似すると、近似された Lagrangian $\tilde{\mathcal{L}}$ は次のようになる。

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{L}} = & \frac{1}{2} a_i a_j b_k \int V_i \cdot V_j R_k dV - \int \tilde{E}(b, c) dV \\ & - K_k \left(\dot{b}_i \int R_i W_{1k} dV - b_i a_j - \int (\nabla \cdot (R_i V_j)) W_{1k} dV \right) \\ & - \Lambda_l \left(\dot{c}_i \int S_i W_{2l} dV - a_i c_j \int (V_i \cdot (\nabla S_j)) W_{2l} dV \right) \end{aligned} \quad (12)$$

ただし、 $\tilde{E}(b, c) = \tilde{\rho}(b) \epsilon(\tilde{\rho}(b), \tilde{s}(c))$ は単位体積当たりの内部エネルギーである。

この近似された変分原理の結果、次の微分代数方程式が得られる。

$$a_j b_k A_{ijk} - K_k b_j C_{jik} - \Lambda_l c_j E_{ijl} = 0 \quad (13)$$

$$\frac{1}{2} a_j a_k A_{jki} - \int \frac{\partial \tilde{E}}{\partial b_i} dV - K_k a_j C_{ijk} = -\dot{K}_k B_{ik} \quad (14)$$

$$- \int \frac{\partial \tilde{E}}{\partial c_i} dV - \Lambda_l a_j E_{jil} = -\dot{\Lambda}_l D_{il} \quad (15)$$

$$\dot{b}_i B_{ik} - b_i a_j C_{ijk} = 0 \quad (16)$$

$$\dot{c}_i D_{il} - a_i c_j E_{ijl} = 0 \quad (17)$$

ただし、 $A \sim E$ はそれぞれ次のようにモードに依存して定まるものである。

$$A_{ijk} = \int V_i \cdot V_j R_k dV, \quad B_{ik} = \int R_i W_{1k} dV,$$

$$C_{ijk} = \int \nabla \cdot (R_i V_j) W_{1k} dV, \quad D_{il} = \int S_i W_{2l} dV, \quad E_{ijl} = \int V_i \cdot (\nabla S_j) W_{2l} dV$$

3.2 内部エネルギーの近似

縮約モデルの式では、 $\int \frac{\partial \tilde{E}}{\partial b_i} dV$, $\int \frac{\partial \tilde{E}}{\partial c_i} dV$ という項が現れる。

通常の計算方法では、結局格子点数 $N_{grid} (\gg N + M + L)$ 分の計算量が必要になり、計算が高速化されない。この問題を解決する方法として、領域内の積分を代表点いくつかの重み付きの和で近似する sparse cubature method [An et al., 2009] がある。

$$\int_{\Omega} g(X; q) dV \approx \sum_i^n w_i g(X_i; q) \quad (18)$$

代表点と重みは事前計算の結果を用いて Greedy Method で事前に求める。

3.3 保存量

この縮約モデルでは、Lagrange 構造に基づく保存量が保存されることが期待される。Lagrangian の時間並進対称性に基づく保存量について考える。これは、元の系と近似された系において、それぞれ次のようになる。

$$F = \int_{\Omega} \left(-\frac{1}{2} \rho v^2 + E(\rho, s) - \kappa \nabla \cdot (\rho v) - \lambda (v \cdot \nabla) s \right) dV \quad (19)$$

$$\tilde{F} = -\frac{1}{2} a_i a_j b_k A_{ijk} + \int \tilde{E}(b, c) dV + K_k b_i a_j C_{ijk} + \Lambda_l a_i c_j E_{ijl} \quad (20)$$

部分積分公式および流体力学の変分原理で現れる式、縮約モデルの式等から

$$F = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} \rho v^2 + E(\rho, s) \right) dV \quad (21)$$

$$\tilde{F} = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} (a_i V_i) \cdot (a_j V_j) b_k R_k \right) dV + \int_{\Omega} \tilde{E}(b, c) dV \quad (22)$$

となり、これはいずれもエネルギーの総和となる。

よって、この系では、時間並進対称性による保存量はエネルギーの総和であり、これは近似系においても対応した量が保存されることが証明できる。

4. 数値計算例

4.1 問題設定

テスト問題として、1次元周期境界流れを考え、初期条件を次のように与える。

$$f(x, 0) = \frac{f_{\max} - f_{\min}}{2} \cos(2\pi x/L) + \frac{f_{\max} + f_{\min}}{2} \quad (f = u, \rho, s)$$

$$u_{\max} = 0.125, \quad \rho_{\max} = 1, \quad p_{\max} = 1$$

$$u_{\min} = 0.1, \quad \rho_{\min} = 0.8, \quad p_{\min} = 0.8$$

4. 数値計算例

4.2 計算結果

有限体積法による FOM(Full Order Model) と比較した図を図3に示す. いずれも赤線が FOM, 黒線が ROM である. u の相対誤差 $\frac{\int(\hat{u}(x,t)-u(x,t))^2 dV}{\int(u(x,t))^2 dV}$ の時間変化を図4に示す. N, M, L はそれぞれ u, ρ, s のモード数である.

$(N, M, L) = (20, 20, 20)$ のモード数を増やした場合では高周波成分が発生し, 振動部分が大きくなり, 時間がある程度経た後には相対誤差が逆に大きくなっていく様子が見られる. 逆に $(N, M, L) = (5, 5, 5)$ の場合ではモード数が少ないために十分な近似を行うことが出来ず誤差が生じている様子が見られる.

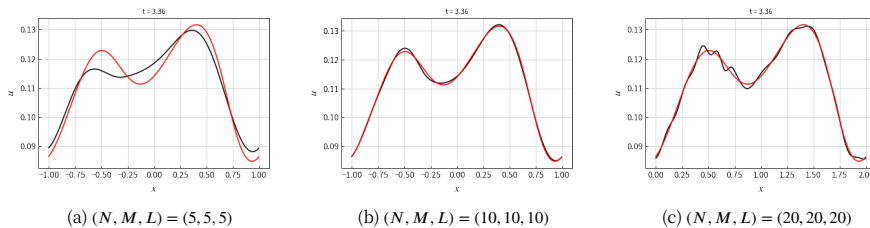


図3. $x-u$ 図 ($t=3.36$)

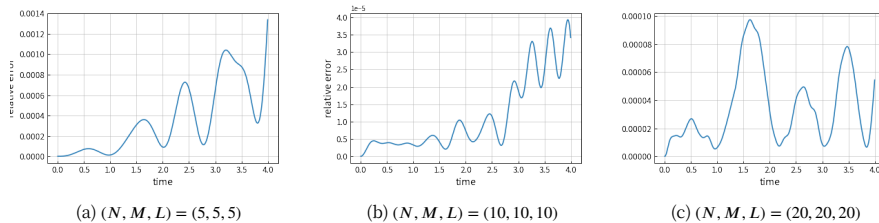


図4. u の相対誤差の時間履歴

4.3 時間刻み・安定性

時間刻みを変化させ, 計算が不安定化しない最大時間刻みを調べた. その結果を表2に示す.

表2. 最大時間刻み

(N,M,L)	最大時間刻み
(16,8,8)	0.161
(20,10,10)	0.128
(30,15,15)	0.109

モード数が大きくなると, 必要な時間刻みが小さくなる傾向が見られることが分かる. これは, 差分法等では格子を細かくし, 細かい変化までとらえる必要が生じると, 必要な時間刻みが小さくなっていくことと類似している.

4.4 保存性

図5にエネルギーの総和 \bar{E} の時間履歴を示す. 9程度の大きさの量に対し, 10^{-6} オーダーでの変動となっており, u, ρ, s で誤差が発生してもエネルギーの総和はよく保存されていることが確かめられる.

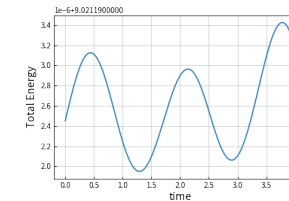


図5. エネルギーの総和の時間履歴
($(N, M, L) = (10, 10, 10)$)

4.5 計算時間

1 タイムステップあたりの計算時間を表3に示す.

表3.1 タイムステップあたりの計算時間

(N, M, L)	計算時間 [s]	FOM との比
(5,5,5)	2.87E-05	0.03
(10,5,5)	5.07E-05	0.05
(10,10,10)	1.26E-04	0.14
(20,10,10)	2.96E-04	0.32
(20,20,20)	8.33E-04	0.90
FOM	9.31E-04	1.00

今回は1次元の問題であったため高速化の効果は限定的であったが, 2, 3次元の問題を考える際には, FOM(CFD) の自由度の上昇は, 典型的には1次元から2次元では数百倍, 1次元から3次元では数万倍程度であるのに対し, 十分な近似を行うために必要な POD モード数は経験的には多くの問題で100以下程度であることから, より高速化の効果が得られると考えられる.

4.6 まとめと展望

変分原理に基づく圧縮性非粘性流体の縮約モデルを構築した. この縮約モデルではエネルギーの総和が保存されることが理論的かつ数値的に確かめられ, 1次元テスト問題に対しては保存性, FOM との一致ともに良い結果が得られた. しかし, 2次元テスト問題では, エネルギーは比較的よく保存されているものの, FOM と一致しないという結果となった. これは流体力学の変分原理で用いられる未定乗数の扱いに課題があるためであると考えられる.

この研究の発展事項としては, 次のようなものが考えられる.

- ・未定乗数の扱いの問題の解決
- ・粘性を考慮する縮約モデルの構築
- ・境界条件の考慮
- ・流体構造連成問題への適用