

Empirical Cubature Method を用いた Hyperreduced-order Modeling の非圧縮性粘性流れへの適用

Hyperreduced-order Modeling of Incompressible Viscous Flows via Empirical Cubature Method

安保亮¹⁾, 金子栄樹²⁾, 吉村忍³⁾

Toru Abo and Shigeki Kaneko and Shinobu Yoshimura

- 1) 東京大学大学院工学系研究科 システム創成学専攻 (E-mail: abotoru@g.ecc.u-tokyo.ac.jp)
 2) 工博 名古屋工業大学大学院工学研究科 助教 (〒466-0061 愛知県名古屋市昭和区御器所町, E-mail: kaneko.shigeki@nitech.ac.jp)
 3) 工博 東京大学新領域創成科学研究科 特任教授 (〒277-0882 千葉県柏市柏の葉5丁目1-5, E-mail: syoshi@edu.k.u-tokyo.ac.jp)

In engineering, the numerical analysis of partial differential equations plays a pivotal role, with repeated parameter variation analyses being crucial in manufacturing. However, conducting analyses with detailed models is time-intensive. To reduce computational costs, model order reduction has been extensively studied. This research focuses on Reduced Order Models (ROM), constructed from high-fidelity Full Order Models (FOM), employing the POD-Galerkin (POD-G) method for projection of the FOM onto a POD basis derived from the FOM analysis results. It is known that the application of the POD-G method to nonlinear problems results in high computational costs for projection operations. Consequently, a technique known as Hyperreduction (HR) methods has been proposed. The present study adopts the Empirical Cubature Method (ECM) as the HR technique, a numerically stable and effective method for creating a Reduced Quadrature to replace Gauss Quadrature. ECM, originally proposed for structural analysis, has not been sufficiently investigated for fluid analysis. The aim here is to extend ECM to be applicable to fluid analysis. We demonstrate the methodology's effectiveness with a case study on two-dimensional cavity flow, considering various Reynolds numbers, and reveal substantial improvements in computation speed and accuracy.

Key Words : *Reduced Order Model (ROM), Hyperreduced-Order Model (HROM), Empirical Cubature Method (ECM), POD-Galerkin Method*

1. 序論

工学の分野では、偏微分方程式の数値解析が重要な役割を果たしている。ものづくりの現場では、パラメータを様々に変化させ、繰り返し解析することが大事である。しかし、すべての解析を詳細モデルで行うのは時間がかかる[1]。

このような背景から、計算コストを削減するために、モデル低次元化が研究されてきた。本研究では低次元されたモデルを Reduced Order Model (ROM) と呼び、次元削減対象の詳細モデルを Full Order Model (FOM) と呼ぶ。ROM の構築方法として本研究では POD-Galerkin (POD-G) 法を用いる。POD-G 法では、FOM の解析の結果から POD 基底を抽出し、FOM を POD 基底で張られるベクトル空間に射影する。しかし、POD-G 法を非線形解析に適用する場合、計算コストの高い射影演算を繰り返し行う必要がある。

この課題を解決するのが Hyperreduction (HR) [2] であり、HR では射影演算を近似的に行って、POD-G の計算コストを低減させる。HR により構築されたモデルを Hyperreduced Order Model (HROM) と呼ぶ。本研究では、Empirical Cubature Method (ECM) を HR 手法として選択した。ECM は Gauss Quadrature を代替する Reduced Quadrature を求める手法であり、数値的に安定で有効な手法である[3, 4]。しかし、構造解析の場合で提案された手法であり、流体解析で使えるかは十分検討されていない。本研究の目的は既存の ECM を流体解析に適用できるように拡張することである。以後 FOM, ROM, HROM を用いた解析をそれぞれ FOM 解析, ROM 解析, HROM 解析と呼ぶ。

2. 手法

(1) FOM 解析

非圧縮性粘性流れの支配方程式は連続の式と Navier-Stokes 方程式で書かれるが、有限要素法により離散化すると次式を得る。

$$Kd = f. \quad (1)$$

$K \in \mathbb{R}^{dof \times dof}$ は全体係数行列、 $d \in \mathbb{R}^{dof}$ は解ベクトル、 $f \in \mathbb{R}^{dof}$ は全体右辺ベクトルと呼ばれる。ただし dof は自由度、 d は全ての節点における速度と圧力の値を格納したベクトルである。

(2) ROM 解析

FOM 解析により解ベクトル d に関する大量のデータを得て、特異値分解を施して POD 基底を得る。POD 基底を k 本列として並べた行列を $V_k \in \mathbb{R}^{dof \times k}$ と表す。そして、 $d \approx V_k a$ のように近似する。 $a \in \mathbb{R}^k$ は低次元での解ベクトルである。また、POD-G 法では(1)式の代わりに、以下の式を解く。

$$V_k^T K V_k a = V_k^T f. \quad (2)$$

$V_k^T K V_k \in \mathbb{R}^{k \times k}$, $V_k^T f \in \mathbb{R}^k$ であり、 $k \ll dof$ であるため、ROM 解析は FOM 解析に比べて行列方程式の求解に要する時間がかかなり少ない。一方で新たに射影演算の計算コ

ストが発生する。射影演算とはこの場合、 $\mathbf{V}_k^T \mathbf{K} \mathbf{V}_k, \mathbf{V}_k^T \mathbf{f}$ を求める演算であり、その計算コストが高いという課題がある。射影演算は、以下のような要素に関するアセンブルの形で書くことができる。

$$\mathbf{V}_k^T \mathbf{f} = \sum_{e=1}^M \mathbf{V}_k^T \mathbf{f}_e, \mathbf{V}_k^T \mathbf{K} \mathbf{V}_k = \sum_{e=1}^M \mathbf{V}_k^T \mathbf{K}_e \mathbf{V}_k \quad (3)$$

ただし、 \mathbf{f}_e は要素右辺ベクトル、 \mathbf{K}_e は要素係数行列、 M は全要素数である。

(3) 従来の ECM による重みの導出とその課題

ECM を用いた HROM 解析では以下のように射影演算を近似的に行う。

$$\sum_{e=1}^M \mathbf{V}_k^T \mathbf{f}_e = \sum_{e=1}^M \mathbf{w}_e \mathbf{V}_k^T \mathbf{f}_e \quad (4)$$

$$\sum_{e=1}^M \mathbf{V}_k^T \mathbf{K}_e \mathbf{V}_k = \sum_{e=1}^M \mathbf{w}_e \mathbf{V}_k^T \mathbf{K}_e \mathbf{V}_k \quad (5)$$

ここで $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^M$ は重みベクトルであり、 \mathbf{w}_e は \mathbf{w} の成分である。ここで、 \mathbf{w} のほとんどの成分が 0 (スパース) となるよう設定されるため、要素ごとの計算をかなり省略でき、高速化がなされる。ECM では以下の Non-Negative Least Squares (NNLS) と呼ばれる最小化問題を解いて \mathbf{w} を求める。

$$\arg \min_{\mathbf{w} \geq 0} \|\mathbf{J}\mathbf{w} - \mathbf{b}\|_2^2 \text{ s.t. } \|\mathbf{w}\|_0 \leq m_{plus} \quad (6)$$

m_{plus} は、 \mathbf{w} の非ゼロ要素の数 $\|\mathbf{w}\|_0$ の上限を表す。 $\mathbf{J} \in \mathbb{R}^{kn_s \times M}$ は ROM 解析で得られるトレーニングデータを並べた行列であり、

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{V}_k^T \mathbf{f}_1^1 & \cdots & \mathbf{V}_k^T \mathbf{f}_1^M \\ \vdots & & \vdots \\ \mathbf{V}_k^T \mathbf{f}_{n_s}^1 & \cdots & \mathbf{V}_k^T \mathbf{f}_{n_s}^M \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{kn_s \times M} \quad (7)$$

と書ける。 n_s はスナップショットの数、 $\mathbf{V}_k^T \mathbf{f}_j^i$ は i 番目のスナップショットの j 番目の要素の低次元化された右辺ベクトルを表す。 \mathbf{b} は $\mathbf{b} = \mathbf{J}\mathbf{1}$ で求まる。従来の ECM は Newton-Raphson 法を用いた非線形構造解析のために提案されたものであり、本研究で扱う移流を線形化した流体解析に対してそのまま用いることができない。

(4) 本研究で提案する ECM

2.3 節の課題を解決するために、本研究では \mathbf{J} の構築方法に関して 3 つの工夫を行った。まず $\mathbf{V}_k^T \mathbf{f}_e$ に加えて、要素ごとの残差 $\boldsymbol{\epsilon}_e = \mathbf{V}_k^T \mathbf{K}_e \mathbf{V}_k \mathbf{a} - \mathbf{V}_k^T \mathbf{f}_e$ を並べて \mathbf{J} を構築した。これは式 (4) で表される積分則だけではなく、式 (5) で表される積分則も再現できるような \mathbf{w} を求めるためである。

次に体積制約 [5] と呼ばれる新たな制約条件に対応する行を \mathbf{J} に組み込んだ。体積制約は以下の式で表される。

$$\|\mathbf{S}^T \mathbf{w} - \mathbf{S}_{total}\| \leq \delta \quad (8)$$

$\mathbf{S} \in \mathbb{R}^M$ は各要素の面積を格納したベクトル、 \mathbf{S}_{total} は領域全体の面積であり $\mathbf{S}_{total} = \mathbf{S}^T \mathbf{1}$ と書ける。 δ は閾値である。

さらに、得られた \mathbf{J} に対して QR 分解を行い、 $\mathbf{J} = \mathbf{Q}\mathbf{R}$ のように \mathbf{J} を直交行列 \mathbf{Q} と上三角行列 \mathbf{R} に分解した。 \mathbf{R} の対角成分が大きい順に上から行を取り出してから NNLS を解いた。 \mathbf{J} の全ての行を学習データとして用いると、NNLS を解く計算コストが高くなる。QR 分解によって行選択を行うことで、NNLS を解く計算コストを下げるができる [6]。

3. 数値解析例

2次元のCavity流れに対して Reynolds 数 (Re) を変化させてパラメトリックスタディを行なった。正方形の領域に対し、境界条件として点Aから点Dに一定流速を与えた。図1は $Re = 190$ のときの FOM 解析の結果である。

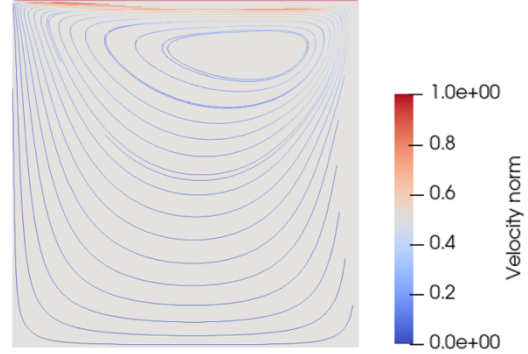


図-1 FOM 解析の流線の可視化

本研究の解析のフローは図 2 のようになる。

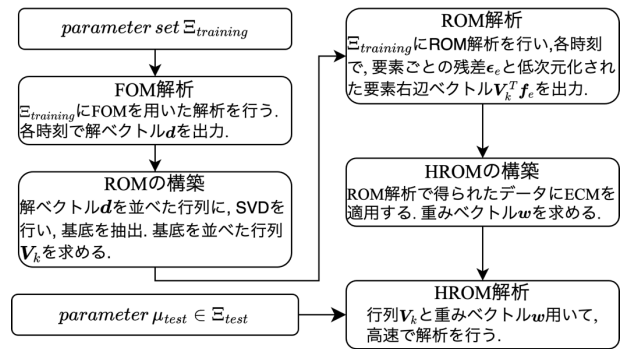


図-2 解析フロー

解析は大きく Offline と Online に分けることができる。Offline では FOM 解析と ROM 解析を行い、得られたデータをもとに \mathbf{w} を求める。FOM 解析と ROM 解析を行ったパラメータ、本研究では Re の集合を $\Xi_{training}$ と定義した。

Online では求めた \mathbf{w} を用いて計算負荷の小さい HROM 解析を高速で行う。HROM 解析を行うパラメータの集合を Ξ_{test} と定義した。

解析パラメータは、要素数 M が 23256、節点数 N が 11829、タイムステップ Δt が 0.01 (s)、総解析時間 T が 1 (s) であった。また、392GB のメモリと Intel (R) Xeon (R) Gold 6238R CPU @ 2.20GHz を有する計算機を用いて解析を行った。

$\Xi_{training} = [100, 120, 140, 160, 180, 200]$ とし、上記 6 ケースに対して FOM 解析、ROM 解析を行った。また速度、圧力ともに 20 本の基底を取り出した。

$m_{plus} = 527$ と設定して \mathbf{w} を求め、可視化したところ図 3 のようになった。ただし、 \mathbf{w} の非ゼロ成分に対応する要素を赤く表している。

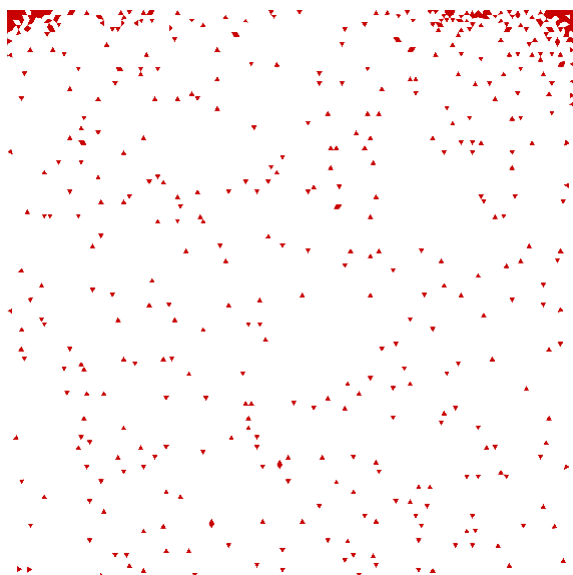


図-3 重みベクトルの可視化

次に, HROM 解析の計算精度と計算速度を評価した. $\Xi_{test} = [110, 130, 150, 170, 190]$ の5つのケースに対して HROM 解析を行った.

計算精度に関しては, 速度の L2 ノルムを領域全体に対して計算した. そして L2 ノルムの相対誤差を計算し, 時間平均を求めると図4のようになった. 青が ROM 解析に対する HROM 解析の相対誤差, 橙が FOM 解析に対する ROM 解析の相対誤差を表す. ROM 解析に対する HROM 解析の相対誤差を, $3e-03$ 以下に抑えることができた

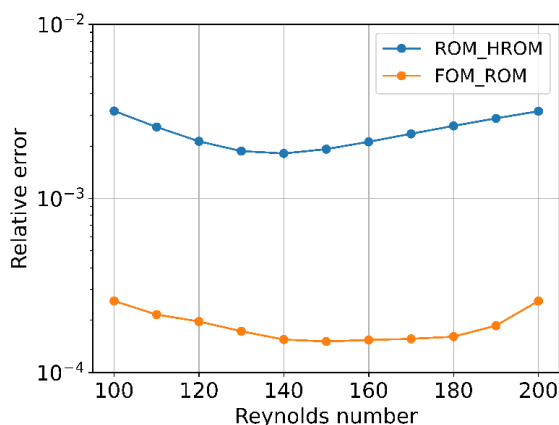


図-4 計算精度の比較

タイムループあたりの計算時間を表 1 に示した. 処理 1 は行列方程式の導出, 処理 2 は行列方程式の求解を表す. タイムループ全体で, HROM 解析は FOM 解析の 86 倍, ROM 解析の約 31 倍の計算速度となった.

表-1 タイムループあたりの計算時間の比較

	FOM (s)	ROM (s)	HROM (s)
処理 1	5.7e-02	8.8e-02	2.1e-03
処理 2	1.9e-01	5.3e-05	5.4e-05
合計	2.5e-01	8.9e-02	2.9e-03

最後に従来の ECM と, 本研究で提案した ECM を比較した.

$m_{plus} = 527$ とし, 両方法で \mathbf{w} を導出した. そして, $Re = 190$ として HROM 解析を行った. ROM 解析と HROM 解析の速度の L2 ノルムの相対誤差は, 従来手法で 1.1, 提案手法で $2.9e-03$ となった. \mathbf{J} の構築方法を工夫することで, HROM 解析の誤差を大きく抑えることができた.

4. 結論と今後の展望

従来の ECM を流体解析に適用すると HROM の計算精度は低い. しかし, 2.4 節で提案した \mathbf{J} の構築方法を用いることで, 計算精度と計算速度の両面で優れた HROM を構築することができた.

今後の展望としては, まず基底の本数と NNLS の収束の関係について挙げられる. 基底の本数の変更は \mathbf{J} のサイズや成分に影響を与える.

次に, NNLS における許容誤差の適切な設定に関しても課題が残されている. 許容誤差を適切に設定することは \mathbf{w} を求める計算コストと HROM 解析の計算精度のバランスを最適化する上で重要であると予想される.

最後に, 他の Hyperreduction 手法との比較による ECM の相対的な性能評価も必要である. NNLS を用いない

Hyperreduction 手法との比較を通じて, ECM の強みと弱点を明らかにし, さらなる改善の方向性を探ることが望まれる.

参考文献

- [1] A. Quarteroni: Reduced Basis Methods for Partial Differential Equations, Springer, 2016.
- [2] Ryckelynck, D.: A priori hyperreduction method: an adaptive approach, J. Comput. Phys., Vol.202(1), pp.346-366, 2005.
- [3] Hernández, J.A., Caicedo, M.A., and Ferrer, A.: Dimensional hyper-reduction of nonlinear finite element models via empirical cubature, Comput. Methods Appl. Mech. Eng., Vol.313, pp.687-722, 2017.
- [4] Farhat, C. et al.: Structure-preserving, stability, and accuracy properties of the energy-conserving sampling and weighting method for the hyper reduction of nonlinear finite element dynamic models, Int. J. Numer. Methods Eng., Vol.102(5), pp.1077-1110, 2015.
- [5] Yano, M.: Discontinuous Galerkin reduced basis empirical quadrature procedure for model reduction of parametrized nonlinear conservation laws, Adv. Comput. Math., Vol.45, pp.2287-2320, 2019.
- [6] Humphry, A.S.: Efficient hyperreduction by empirical quadrature procedure with constraint reduction for large-scale parameterized nonlinear problems, Master's thesis, University of Toronto, 2023.