流体解析における固有値直交分解（POD）と動的直交分解(DMD)

大野 修平* 大西 陽一*

Proper Orthogonal Decomposition(POD) and Dynamic Mode Decomposition(DMD) in Fluid Analysis

Shuhei Ohno* and Yoichi Ohnishi*

近年、計算機技術の急速な発達により、詳細な流体解析が可能になり得られた膨大なデータから有益な情報を抽出する手法が必要になっている。本稿では、流れ場の構造（モード）を抽出する手法である固有値直交分解（POD）と動的直交分解(DMD)について紹介し、Advance/FrontFlow/red (AFFr)と併せて利用可能な POD/DMD 解析ツールの紹介と今後の展望について述べる。

Key word: 流体現象、機械学習、POD、DMD

1. はじめに

近年、計算機技術の急速な発達により、詳細な流れ場のデータを得ることが可能になった。その膨大なデータを解析し物理現象を解明するためには、人間の思い込みなどを取り除き、システマティックに流れの構造を抽出する手法が必要となる。

本稿では、大規模データから主成分を抽出する手法の一つである固有値直交分解（POD）を流体解析に適用した例について紹介する。

POD は、ほかにも主成分分析（PCA）などとも呼ばれており、統計学や経済学、画像処理の分野でも盛んに利用されてる。流体力学においては、1960 年代から乱流解析に適用され始め[1]、その後も音響解析、空力解析などで活発に活用されている[2]。

2. POD[3]

POD とは、得られた多次元データから低次元成分を抽出する分解方法である。もとのデータが n 次元であったとすると、r 次元の座標系（$r \ll n$）でもとのデータを表すことが目的である。つまりデータを表現するのに都合の良い基底を探索する。以下数式を交えて説明する。

*アドバンスソフト株式会社 第 3 事業部
3rd Computational Science and Engineering Group, AdvanceSoft Corporation

ある時系列データが与えられているとする。

$$x(t) \in R^n,\ t_{min} < t < t_{max} \quad (1)$$

上記 n 次元データにとって、代わりの都合のいい r 次元の基底を探す。この時基底を$\{\varphi_k\}_{k=1}^{r}$とすると、n 次元から r 次元に射影し、また n 次元に戻したときにもっとも残差が小さいものとなる(arg min)。この射影してもとに戻す作業は$P = \sum_{k=1}^{r} \varphi_k \varphi_k^T$と表され、データの分散を最も大きく取れる方向にデータを射影できる基底を求めることになる(arg max)。この基底は以下の最適化問題を解くことで求められる。

$$\begin{aligned}\varphi_{k=1}^{r} &= \underset{\tilde{\varphi}_{k=1}^{r}}{\arg\min} \int_{t_{min}}^{t_{max}} \left\| \boldsymbol{x}(t) - \widetilde{\boldsymbol{P}}\boldsymbol{x}(t) \right\|^2 dt \\ &= \underset{\tilde{\varphi}_{k=1}^{r}}{\arg\max} \int_{t_{min}}^{t_{max}} \left\| \widetilde{\boldsymbol{P}}\boldsymbol{x}(t) \right\|^2 dt\end{aligned} \quad (2)$$

これは以下の分散行列$\boldsymbol{R}$

$$\boldsymbol{R} = \int_{t_{min}}^{t_{max}} \boldsymbol{x}(t)\boldsymbol{x}^T(t)dt \ \in \mathbb{R}^{n\times n} \quad (3)$$

の固有値(λ_k)、固有ベクトル(φ_k)を求めることに帰着する。分散を計算するうえで必要な処理として、$\boldsymbol{x}(t)$はその平均を除いた値を利用する。分散行列の固有値は正であり、大きな順に並べ替え、同時に固有ベクトルは正規直交化する。

$$\boldsymbol{R}\varphi_k = \lambda_k \varphi_k, \qquad \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \cdots \geq 0 \quad (4)$$

$$\langle \varphi_i, \varphi_j \rangle = \delta_{i,j}, \quad i, j = 1,2, \dots, n \tag{5}$$

このようにして求めた基底がどの程度「もとのデータのエネルギー」を再現しているかの指標として

$$\frac{\sum_{k=1}^{r} \lambda_k}{\sum_{k=1}^{n} \lambda_k} \tag{6}$$

を考慮する。この値が1に十分近くなるまで分子のrのモードを考慮する。$r \ll n$であれば十分次元削減できたことになる。

3. POD の事例

2章で示したPOD基底を用いた事例としてカルマン渦に適用した事例を示す。図 1 は数値計算によって得られた円柱から放出されるカルマン渦の様子と、そのデータをモード分解した結果である。

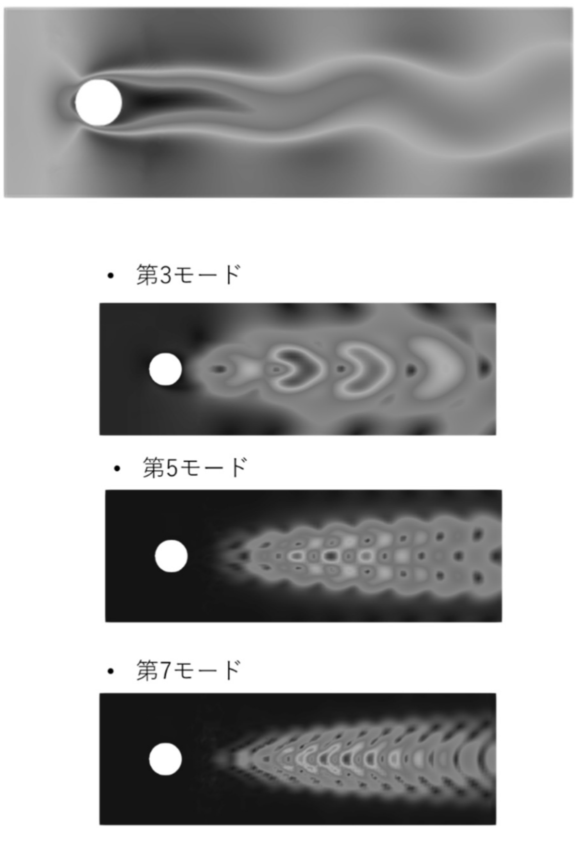

図 1　カルマン渦列の POD モード分解　最上図: 瞬時場、二段目以降：各モード

図 2はモードごとの固有値を並べている。これを見ると、モード1と2、モード3と4など2つずつ固有値の大きさがペアとなって表れていることが分かる。これは分解のもとになったカルマン渦が円柱の上下で周期的に放出されているという現象に対応しており、周期的な現象を再現するのに最低2つのモードが必要なことを反映している。

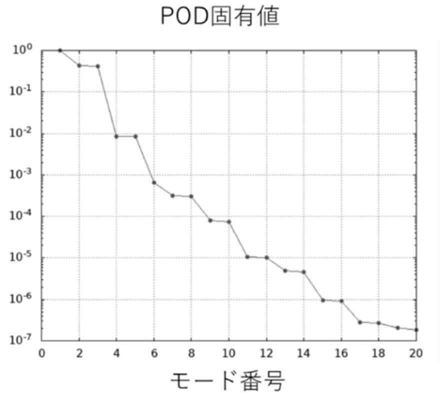

図 2　モードごとの固有値

POD 分解は数学的な処理であるので、それ自体に物理的意味を深く追及することはできないが、ある程度の解釈はできる。例えば図 1の計算は空間2次元の解析であるが、そのモード分解のもとデータには、$\boldsymbol{x}(t) = (\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})^{\boldsymbol{T}}$と速度場を用いた。この場合「もとのデータのエネルギー」は

$$\|\boldsymbol{x}\|^2 = \int_{t_{min}}^{t_{max}} \|\boldsymbol{u}^2 + \boldsymbol{v}^2\| \, dt \tag{7}$$

となる。このように定義したのちPOD分解で得られたモードは、時間平均された運動エネルギーに関して大きな固有値からモード分解されたものとみなせる。図 2はモード1から4までを考慮すると運動エネルギーのほぼ 100%を満たせることを示しており、この4つのモードの線形結合でこの流れをほぼ再現可能であることを示している。したがってこれら 4 つのモードに絞って流れ場の分析をすることができる。

4. Incremental POD

3章の事例では2次元空間の簡易な数値流体解析(CFD)の結果であったが、通常の CFD ではデータ数が数億～京個の離散点を扱うことも珍しくない。いくらPODがデータ削減の手法であるといっても、その処理自体が困難になる。そこで入力データの低次元化自体が必要になってくる。Incremental POD

はすべてのデータを一度にメモリ上に読み込むのではなく、データを 1 つずつ読み込み逐次処理するため、多くのメモリを必要としない手法である。

基本的な考え方は以下の通りである。非定常流体解析では時間を離散化しており、incremental POD を適用するときはこの時間ステップの順番に逐次的に POD 分析を実施する。 k 番目のデータを読み込んだ場合、k-1 番目までのデータで POD 基底が求まっているとすると、この k-1 番目の固有状態と固有値を使って k 番目の固有状態と固有値を更新する規則が分かればよい。このようにして最終時間ステップまで進むことで、メモリを大量に消費することなく POD 基底を得ることができる。詳細は[4]を参考のこと。

5. DMD

動的モード分解(DMD)は、前章で紹介した Incremental POD の考えを発展させ、POD では見えなかった動的な情報を得るための手法である。具体的には、周波数ごとの情報を得ることができる。

今、m－1 番目の瞬時データ$\boldsymbol{x}_{m-1}$から写像Aによって m 番目の瞬時データ$\boldsymbol{x}_m$が得られるとすると 1 からm番目のデータを集めた$\boldsymbol{X}_{1\to m}$は

$$
\begin{aligned}
X_{1\to m} &= [\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_3, \dots, \boldsymbol{x}_m] \\
&\approx [\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{A}^2\boldsymbol{x}_1, \dots, \boldsymbol{A}^{m-1}\boldsymbol{x}_1]
\end{aligned} \tag{8}
$$

となる。DMD モード分解とは

$$
AX_{1\to m} = X_{2\to m+1} \tag{9}
$$

となる A に対して

$$
A = \arg\min_{A} \|\boldsymbol{X}_{2\to m+1} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{X}_{1\to m}\| \tag{10}
$$

の条件を満たす A の固有値､固有状態を見つけることである。これを近似的に解く手法として特異値分解法（SVD）を用いる。

詳細は[5]を参照のこと。このように DMD 分解を実施すると、時間発展の周波数と固有モードを得ることができる。

図 3 から図 5 にカルマン渦列の DMD 分解を示す。DMD 分解して得られた第 1 モード、第 2 モードは周波数スペクトルの絶対値が大きな f1,f2 に相当する。このように DMD によって POD では得られなかった系の動的な情報を得ることができる。

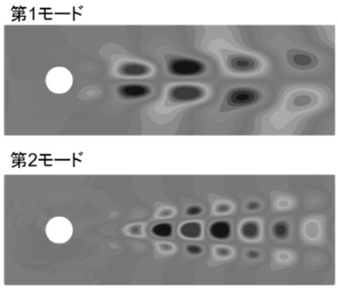

図 3　カルマン渦列を DMD 分解した結果

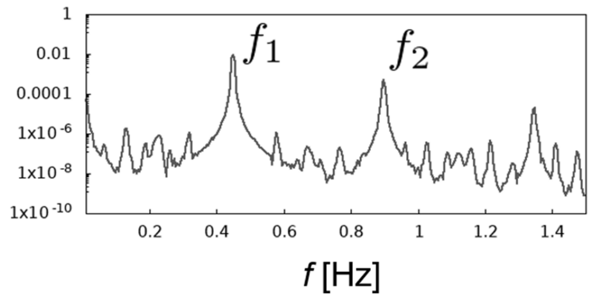

図 4　壁面上の圧力振動スペクトル

また図 5 では固有値の実部と虚部を複素平面状に示しているが、ほぼ単位円上に位置することが分かる。これは得られたモードが増幅や減衰せずほぼ周期的な振舞いをしていることを示している。

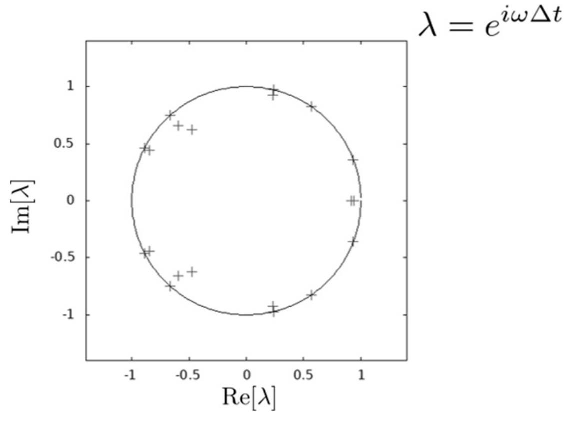

図 5　固有値の実部と虚部

6. AFFr の POD,DMD 分析ツール

AFFr では前章までに述べた POD、DMD などのツールをソルバーと一体のパッケージとして提供している。POD、DMD ツールは AFFr の計算結果のみでなく、他のさまざまな流体ソルバーの結果フォ

ーマットに対応している。実際に汎用流体解のツールとして利用するときには、入力データの読み込み時間が処理時間の律速となることが多い。AFFr ではさまざまな計算機環境において高速に POD 処理ができるようチューニングを実施している。例としてベクトル計算機における入力データ読み込み、結果書き込みを高速化した例を示す。

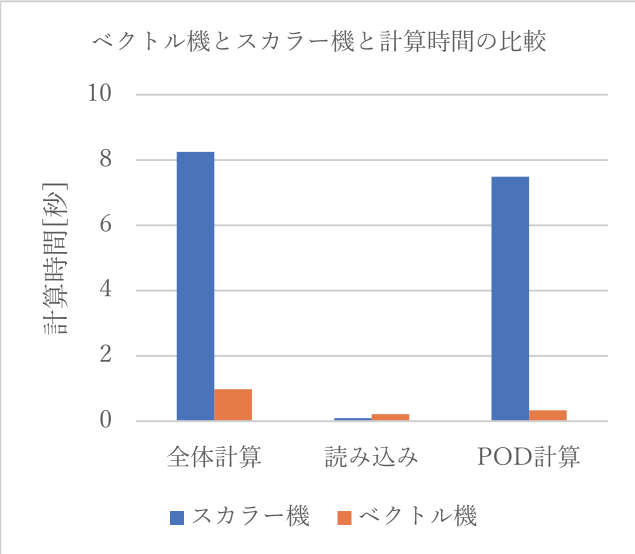

図 6　ベクトル計算機とスカラー計算機の時間比較

ここではスカラー計算機として、Intel Xeon E5-2650 v4 @ 2.20GHz、ベクトル計算機として NEC 製の Aurora[6]を使用した。ベクトル計算機を利用すると 8 倍程度の高速化を達成している。

7. まとめ

大規模データを次元削減し、物理的解釈を容易にする手法として、POD、DMD について紹介した。POD,DMD の基本概念は 1960 年代から確立されておりさまざまな分野で利用されている。しかし流体解析など物理現象の数値解析に用いる場合は、データの取り扱い、時系列データの物理的解釈の明確さにまだまだ発展の余地がある。今後もデータの大規模化はより進むことが予想されるが、データの分析手法も使えるプログラム言語や新しい概念の登場とともに適宜形を変えて発展していくものと予想する。アドバンスソフトは CAE 業界のトップ企業として有益なデータ分析手法を提供していく。

参考文献

[1] Lumley, J. L.: The structure of inhomogeneous turbulent flows, In Atmospheric turbulence and wave propagation, eds. Yaglom, A. M. & Tatarski, V. I., Moscow, Nauka (1967) 166–178.

[2] 平 邦彦: 固有直交分解による流体解析: 2. 応用, な がれ 30(3) (2011)

[3] 平 邦彦: 固有直交分解による流体解析: 1. 基礎, な がれ 30(2) (2011)

[4] Arora, R., Cotter, A., K, L., and Srebo, N., “Stochastic optimization for PCA and PLS,” 50th Annual Allerton Conference on Communication, Control, and Computing, Illinois, United States: 2012

[5] Schmid, P. J.: Dynamic mode decomposition of numerical and experimental data, J. Fluid Mech. 656 (2010) 5–28.

[6] https://jpn.nec.com/hpc/sxauroratsubasa/index.html

※ 技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、PDF ファイル（カラー版）がダウンロードできます。（ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。）