

マルチブロック直交格子における計算スキームの動的切り替え Dynamic Switching of Numerical Schemes in Multi-Block Cartesian Mesh

○ 三坂孝志, 産総研, 茨城県つくば市並木 1-2-1, takashi.misaka@aist.go.jp
Takashi Misaka, AIST, 1-2-1 Namiki, Tsukuba, Ibaraki 305-8564, Japan

We consider cost reduction of unsteady flow simulation using a reduced-order model (ROM). Since the prediction accuracy of existing ROMs is limited in high Reynolds number complex flows, we investigate here a zonal hybrid approach of a full-order model and a ROM in the framework of multi-block Cartesian mesh.

1. はじめに

計算機能力の発展に伴って数値シミュレーションの時空間解像度は向上し続けており、複雑な対象の解析に要する時間(実時間)は依然として長い。一方、固有直交分解(Proper Orthogonal Decomposition, POD)⁽¹⁾や動的モード分解(Dynamic Mode Decomposition, DMD)に基づく次元縮約モデルは、比較的単純な流れ場のモデル化能力に優れているが、レイノルズ数の高い複雑な流れ場ではモデル化が困難な場合も多い⁽²⁾。しかしながら、複雑な流れ場全体を次元縮約しモデル化するのが困難であっても、時空間的に小さな領域を考えると、その部分空間内の流れ場の自由度は比較的小さい。そこで本研究ではマルチブロック直交格子法⁽⁴⁾で扱われる各ブロック内において次元縮約の可否を判断し、縮約が可能な場合にのみ次元縮約モデルの計算を行うような計算手法の動的切り替えを検討する。モデルの動的切り替えは、例えば、時間方向の切り替えが Williams らによって検討されている⁽⁶⁾。この研究では2種類の次元縮約モデルの予測精度が異なるときに、オリジナルのモデルに戻って予測を行っている。また、著者らによってPOD次元縮約モデルを用いた空間的なモデルの切り替えの可能性も検討されている⁽⁶⁾。マルチブロック直交格子上でモデルの切り替えを行うためには、その指標も検討する必要がある。

2. 数値計算手法

2. 1 Building Cube Method

中橋によって提案された Building Cube Method (BCM)では、格子生成、高次精度スキームの組み込み、および、後処理の簡素化のために等間隔の直交格子を用いている。さらに、計算アルゴリズムを複雑化させることなく、格子を複雑形状および局所流れ場に適合させるために、マルチブロック構造格子を採用している。計算領域はキューブと呼ばれる立方体ブロックに分割されるが、格子解像度がキューブサイズで決まり、また、キューブを用いた並列処理が効率的に行われるように、各キューブは同じ数の格子点を含んでいる⁽⁴⁾。流れ解析には式(1)に示す 3 次元非圧縮性ナビエ・ストークス方程式と式(2)の連続の式を用いる。

$$\frac{\partial u_j}{\partial t} + \frac{\partial u_j u_k}{\partial x_k} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p'}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_k} [(v + v_t) 2S_{jk}], \quad (1)$$

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0. \quad (2)$$

ここで、 u_j と p' はそれぞれ3次元速度成分($j, k = 1, 2, \text{ or } 3$)と、基準圧力からの変動分 $p = p_0 + p'$ である。 $S_{jk} = (\partial u_j / \partial x_k + \partial u_k / \partial x_j) / 2$ はひずみ速度テンソルである。式(4)および(5)では速度成分 u_j に関して縮約記法を用いている。密度は一定値($\rho_0 = 1.2 \text{ kg/m}^3$)とし、式(1)に現れる渦粘性係数はコヒーレント構造サブグリッドスケールモデルより得られる⁽⁷⁾。

2. 2 固有直交分解に基づく次元縮約モデル

固有直交分解は主成分分析とも呼ばれ、データの変動(流れ場の変動)をよく表す直交基底ベクトル $\boldsymbol{\varphi}$ を以下のようにして求める⁽¹⁾。

$$\arg \min_{\boldsymbol{\varphi}} \|\boldsymbol{X} - \boldsymbol{\varphi} \boldsymbol{\varphi}^T \boldsymbol{X}\|, \quad (3)$$

ここで \boldsymbol{X} はデータを格納した行列、 $\boldsymbol{\varphi}$ は POD 基底ベクトルである。流体シミュレーション結果によく適用されるスナップショット POD では、非定常流体シミュレーション実行時にある間隔で流れ場のデータを保存し、行列 \boldsymbol{X} を以下のように構成する。

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} u_1^1 & \cdots & u_1^m \\ \vdots & & \vdots \\ u_n^1 & \cdots & u_n^m \end{bmatrix}, \quad (4)$$

ここで上付き添え字 m はスナップショット数、下付き添え字 n は POD に用いる流れ場変数の総数である。式(3)の最小化問題は以下の固有値問題に置き換えることができる。

$$\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\psi}_i = \lambda_i \boldsymbol{\psi}_i, \quad (5)$$

m 個のスナップショットを用いると、 m 個の固有値 λ_i と固有ベクトル $\boldsymbol{\psi}_i$ を得ることができる。POD 基底ベクトルは行列 \boldsymbol{X} を用いることで元の流れ場と同じ次元のベクトルとして以下のように得られる。

$$\boldsymbol{\Psi}_i = \boldsymbol{X} \boldsymbol{\psi}_i / \sqrt{\lambda_i}. \quad (6)$$

POD 基底ベクトルは互いに直交しており、その性質を利用して次元縮約モデルを構築することができる(例えば、Galerkin 射影を用いた方法)。何かしらの次元縮約モデルで予測された時間変化する係数 $a_i(t)$ を用いると、流れ場以下のように再構築される。

$$\boldsymbol{u}(x, t) = \bar{\boldsymbol{u}}(x) + \sum_{i=1}^r a_i(t) \boldsymbol{\Psi}_i(x). \quad (7)$$

ここで $\bar{\boldsymbol{u}}$ は流れ場の平均成分であり、行列 \boldsymbol{X} を構成する段階で差し引かれるため、再構成時に加えられる。 r は流れ場の再構築に用いる POD モードの数である。各 POD モードに対応する係数 $a_i(t)$ は以下のようにして求めることができる。

$$a_i(t) = (\boldsymbol{u}(x, t) - \bar{\boldsymbol{u}}(x)) \cdot \boldsymbol{\Psi}_i(x). \quad (8)$$

本研究ではこのようにして得られた係数 $a_i(t)$ から直接その予測式を構成することで次元縮約モデルを構築する。係数 $a_i(t)$ の時間発展が連立常微分方程式によって求められると考え、さらに、時間微分の差分近似を行うと、ある時刻の係数 $a_i(t)$ を 1 つ前の時刻の係数 $a_i(t-1)$ から求めることができればよい。すなわち、式(10)のような関係を考え、これを放射基底関数(Radial Basis Function, RBF)で表現することにすれば、

$$a_i(t) = f_i[\mathbf{a}(t-1)] = \sum_{j=1}^r w_{i,j} \cdot \phi(r_j). \quad (10)$$

ここで $w_{i,j}$ は重み係数、 r_j は係数間の距離である。関数 $\phi(r_j)$ として多重二乗関数を用いる。POD 基底生成に用いたスナップショットから求めた係数 $a_i(t)$ によって重み係数 $w_{i,j}$ を計算することができるので、係数 $a_i(t)$ の時間発展式が得られる⁶⁾。

2. 3 処理の流れ

ナビエ・ストークス方程式を Full-order model (FOM), 上述の次元縮約モデルを Reduced-order model (ROM)と標記すると、FOM-ROM ハイブリッド計算の流れは図 1 のようになる。POD および RBF を用いた ROM 構築は Cube 単位で行われ、Cube 毎に FOM と ROM の精度を比較しながら、動的に切り替えを行う。図 1 中の N_{samp} はスナップショットを取得する時間ステップ間隔、 ϵ_{POD} は POD による流れ場の展開誤差、 ϵ_{ROM} は ROM による流れ場の予測誤差である。キューブ毎にこれらの処理を行い、 ϵ_{ROM} が閾値よりも小さい場合に ROM による流れ場の予測に切り替える。

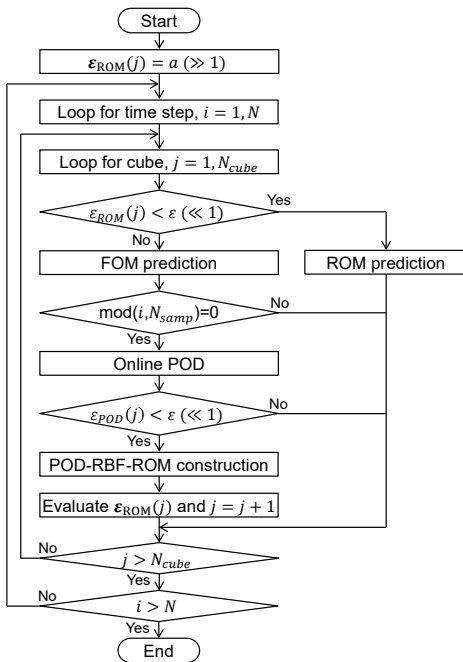


Fig.1 Flowchart of FOM-ROM hybrid simulation.

3. 結果

図 2 に FOM-ROM ハイブリッドで解析されたレイノルズ数 $Re=100$ の流れ場を示す。図中の枠線で囲んだキューブを計算の途中で FOM から ROM に切り替えたキューブである。図 2(a)および(b)に示す主流方向速度および圧力の等値線から、FOM キューブおよび ROM キューブの流れ場が比較的滑らかに接続されていることが確認できる。しかしながら、図 2 の Cube 1 では、主流速度分布に若干のゆがみが見られる。図 3 にこれらのキューブにおける FOM と ROM の

誤差(RMSE)を示す。ROM 予測の始まった直後は 10^{-6} 程度の RMSE だが、直後に上昇し、その後は 10^{-3} のオーダーで変動していることがわかる。今後は FOM-ROM ハイブリッドによってどの程度計算時間が短縮されるかを評価していく。

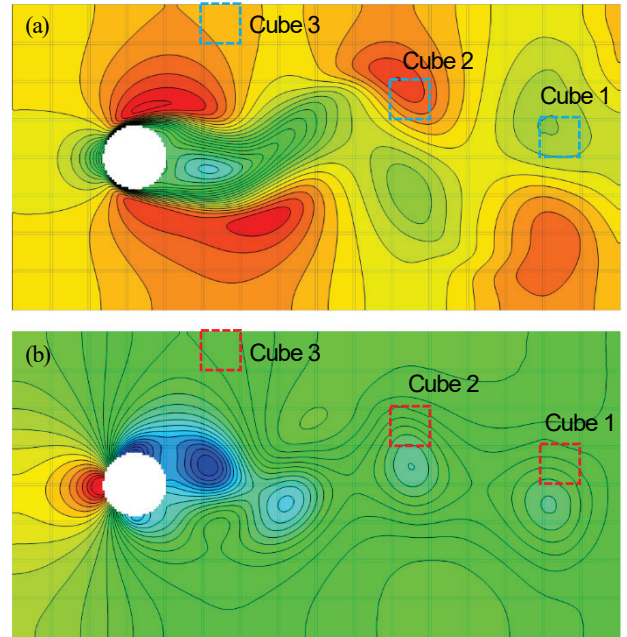


Fig.4 Streamwise velocity and pressure.

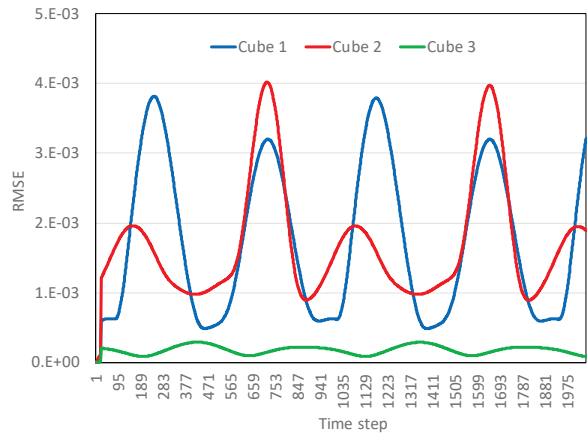


Fig.3 History of RMSE for three ROM cubes.

4. おわりに

本研究ではマルチブロック直交格子法で扱われる各ブロック内において次元縮約の可否を判断し、縮約が可能な場合にのみ次元縮約モデルの計算を行うような計算手法の動的切り替えを検討した。BCM 格子のいくつかのキューブにおいて FOM から ROM への切り替えを行い、流れ場が滑らかに接続されていることを確認した。また、ROM の予測誤差が 10^{-3} 程度で変動することを確認した。

謝辞

本研究は JSPS 科研費 JP16H015290 の助成を受けたものです。

参考文献

- (1) Sirovich, L., "Turbulence and the Dynamics of Coherent Structures. I - Coherent Structures," Quarterly of Applied Mathematics, Vol. 45, No. 3, pp. 561-571, 1987.

- (2) Couplet, M., Basdevant, C., and Sagaut, P., "Calibrated Reduced-Order POD-Galerkin System for Fluid Flow Modelling," *Journal of Computational Physics*, Vol. 207, No. 1, pp. 192-220, 2005.
- (3) Kikuchi, R., Misaka, T., and Obayashi, S., "Real-time Prediction of Unsteady Flow based on POD Reduced-Order Model and Particle Filter," *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, Vol. 30, No. 4, pp. 285-306, 2016.
- (4) Nakahashi, K., "High-Density Mesh Flow Computations with Pre-/Post-Data Compressions," *AIAA Paper 2005-4876*, 2005.
- (5) Williams, M., Schmid, P., and Kutz, J., "Hybrid Reduced-Order Integration with Proper Orthogonal Decomposition and Dynamic Mode Decomposition," *SIAM Multiscale Modeling and Simulation*, Vol. 11, No. 2, pp. 522-544, 2013.
- (6) Misaka, T., and Obayashi, S., "Zonal Reduced-Order Modelling toward Prediction of Transitional Flow Fields" *Journal of Physics: Conference Series*, Vol. 1036, pp. 012012-1-9, 2018.
- (7) Kobayashi, H., "The Subgrid-Scale Models based on Coherent Structures for Rotating Homogeneous Turbulence and Turbulent Channel Flow," *Physics of Fluids*, Vol. 17, pp. 045104, 2005.
- (8) Xiao, D., Fang, F., Pain, C., and Hu, G. "Non-Intrusive Reduced-Order Modelling of the Navier - Stokes Equations based on RBF Interpolation. *International Journal for Numerical Method in Fluids*, Vol. 79, pp. 580-595, 2015.