

モデル縮減に基づく数値計算法

松尾宇泰

東京大学

計算科学における時空間アップスケーリングと数理手法

背景 1 : 大規模微分方程式系の数値計算

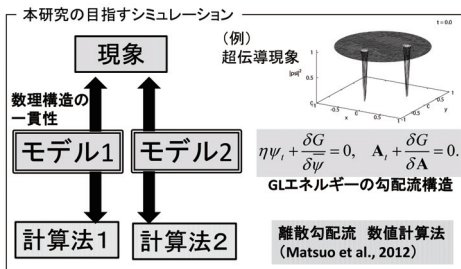
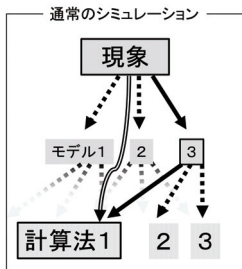
- 1 . 数値解析学 (微分方程式の数値解法) の観点から :
 - 第 1 世代 = 汎用解法 (固定刻み) Runge-Kutta 法 , ...
 - 第 2 世代 = 汎用解法 (適応刻み , 動的格子) 計算高速化
 - 第 3 世代 = 専用解法・構造保存数値解法 (固定刻み , 固定格子) 質は高いが重い
- 2 . 数値解析学 (線形計算) (+ HPC 技術) の観点から :
 - 上記で帰着する線形計算の高速化 (疎性利用 , 部分空間法 , ...)
 - マルチグリッド , 通信回避アルゴリズム , ...
- 3 . 計算科学 (物理) の観点から :
 - 各種近似 (Hartree-Fock , Kohn-Sham , Koopman 分解 , ...)

本発表 : 上記「 1 」の観点から , 「高速化手法」を改めて考えたい .

科研費 基盤 (B) 特設分野「連携探索型数理科学」:

『数理構造の抽出と保存を中心とした
次世代エレクトロニクス材料設計基盤の創出』

研究代表者：松尾，研究分担者：星，山本，宮武，多田



数理的手法・発想による「モデル縮減」の考え方，
およびそれと「構造保存解法」の組み合わせ可能性について．

- POD (Proper Orthogonal Decomposition)
- SMR (Symplectic Model Reduction)
- 数値例：非線型 Schrödinger 方程式を例に

Proper Orthogonal Decomposition (POD)

汎用のモデル縮減手法・構造解析・制御論・流体，...

(Moore (1981), Antoulas-Sorensen-Gugercin (2001), etc.)

問題：(常微分方程式)

$$\frac{d}{dt}u(t) = f(u) = Au + F(u), \quad u: \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^n, A \in \mathbb{R}^{n \times n}, F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n.$$

趣旨： n が非常に大きいとき，「小さくして」解きたい．

発想： $V_k \in \mathbb{R}^{n \times k}$ ($k \ll n$)， $V_k^\top V_k = I_k$ を用いて「圧縮」：

$$u = V_k \tilde{u}, \quad \tilde{u}: \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^k.$$

結果： $V_k^\top u = \tilde{u}$ であるから（直交性），

$$\tilde{u}_t = V_k^\top u_t = V_k^\top (Au + F(u)) = \underbrace{V_k^\top A V_k}_{A_k \in \mathbb{R}^{k \times k}} \tilde{u} + V_k^\top F(V_k \tilde{u}).$$

観察：これは $k \ll n$ 次元の微分方程式．

非線形項は「拡大→評価→縮小」なので注意．

行列 V_k の作り方がすべて .

$$\text{フルサイズ} \rightarrow \mathbb{R}^n \ni u = V_k \tilde{u} \in \mathbb{R}^k \leftarrow \text{縮小版}$$

「フルサイズ」の挙動を「縮小版」が捕まえないと意味がない .

そこで , サンプルを作って解の挙動を観察 .

- まず , フルサイズの問題を解いて , 「サンプル」を集める :

$$u^1 \simeq u(\Delta t), u^2 \simeq u(2\Delta t), \dots, u^s, \quad U = [u^1, u^2, \dots, u^s] \in \mathbb{R}^{n \times s}.$$

- U の列空間の主要部を取り出す :

$$V_k \Sigma \tilde{V}^\top := U. \quad (\text{特異値分解})$$

注意 . $\Delta t, s, k$ の選択は非自明 .

((e.g.) Chaturantabut–Sorensen (2012))

V_k を、次の最適化問題の解とする。

$$\min_{\text{rank } V_k = k} \int_0^T \|u(t) - V_k V_k^\top u(t)\|_2^2 dt \quad \text{s.t.} \quad V_k^\top V_k = I_k.$$

また、

$$R = \int_0^T u(t) u(t)^\top dt, \quad \text{その非零固有値 } \lambda_1^\infty \geq \lambda_2^\infty \geq \dots \lambda_r^\infty > 0$$

と置くとき、 $k < r$ ならば、

$$\int_0^T \|u(t) - V_k V_k^\top u(t)\|_2^2 dt = \sum_{i=k+1}^r \lambda_i^\infty.$$

「解の誤差は、切り落とした固有値に等しい。」

「『固有値』は、**解全体から**構成したもの。」

- $\boxed{u = V_k \tilde{u} \Leftrightarrow V_k^\top u = \tilde{u}.} \Leftrightarrow u \in \text{Im}(V_k), V_k^\top V_k = I_k.$
- 無限次元版は POD-Galerkin 法 .
少し定式化が違うが本質は同じ .
($\rightarrow$ 誤差解析を含めた読みやすい論文 (Kunisch–Volkwein (2002)))
- このままでは非線形項の計算は結局重い .

$$(\text{再掲}) \quad \tilde{u}_t = A_k \tilde{u} + V_k^\top F(V_k \tilde{u}).$$

高速化 : Discrete Empirical Interpolation Method (DEIM)

(Chaturantabut–Sorensen (2010))

- POD は , 実は方程式の「構造」を破壊する .
 $\rightarrow$ 次のトピックへ

～橋渡し～ 構造を持った系に POD を使うと

Hamilton 系 : $z : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^{2n}$ として ,

$$z_t = J_{2n} \nabla_z H(z), \quad J_{2n} = \begin{pmatrix} 0 & I_n \\ -I_n & 0 \end{pmatrix}, H : \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R}.$$

Hamiltonian 保存 : (symplectic 行列 J_{2n} の歪対称性が本質)

$$\frac{d}{dt} H(z(t)) = \nabla_z H(z) \cdot z_t = \nabla_z H(z) \cdot J_{2n} \nabla_z H(z) = 0.$$

これに POD を使うと , $\tilde{z} : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^{2k}$, $z = V_{2k} \tilde{z}$ として ,

$$\tilde{z}_t = V_{2k}^\top J_{2n} \nabla_z H(V_{2k} \tilde{z}).$$

このとき ,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} H(V_{2k} \tilde{z}(t)) &= \nabla_z H(V_{2k} \tilde{z}) \cdot (V_{2k} \tilde{z})_t \\ &= \nabla_z H(V_{2k} \tilde{z}) \cdot \underbrace{V_{2k} V_{2k}^\top J_{2n}}_{J_{2n} \text{ の射影}} \nabla_z H(V_{2k} \tilde{z}). \end{aligned}$$

これは一般には消えない . 保存性は破壊される .

[★ 休憩可能] Symplectic Model Reduction (SMR) (1/5)

(Peng–Mohseni (2016))

Hamilton 系 : $z : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^{2n}$ として ,

$$z_t = J_{2n} \nabla_z H(z), \quad J_{2n} = \begin{pmatrix} 0 & I_n \\ -I_n & 0 \end{pmatrix}, H : \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R}.$$

この「構造」を破壊してはいけない .

ゴール : $\tilde{z}_t = J_{2k} \nabla_{\tilde{z}} H(V_{2k} \tilde{z})$ ($= J_{2k} \nabla_{\tilde{z}} \tilde{H}(\tilde{z})$).

観察 1 : $\tilde{z}_t = J_{2k} \nabla_{\tilde{z}} H(V_{2k} \tilde{z}) = J_{2k} V_{2k}^\top \nabla_z H(V_{2k} \tilde{z})$. (連鎖律)

観察 2 : POD の結果 $\tilde{z}_t = V_{2k}^\top J_{2n} \nabla_z H(V_{2k} \tilde{z})$.

もし , $V_{2k}^\top J_{2n} = J_{2k} V_{2k}^\top$ **なら ,**

$$\tilde{z}_t = V_{2k}^\top J_{2n} \nabla_z H(V_{2k} \tilde{z}) = J_{2k} V_{2k}^\top \nabla_z H(V_{2k} \tilde{z}) = J_{2k} \nabla_{\tilde{z}} H(V_{2k} \tilde{z}).$$

しかし一般にこの「もし」は成り立たない .

$V_{2k}^\top$: (直交基底に基づく) 座標変換 (次元縮小) .

symplectic 構造不変性には , 直交性では足りない .

[★] SMR (2/5) : 指導原理の拡張

POD の指導原理 : 直交性に基づく .

$$\boxed{u = V_{2k} \tilde{u} \Leftrightarrow V_{2k}^\top u = \tilde{u}.} \Leftrightarrow u \in \text{Im}(V_{2k}), \quad V_{2k}^\top V_{2k} = I_{2k}.$$

SMR の指導原理 : 一般逆行列に基づく . 射影行列を W_{2k} として ,

$$\boxed{u = W_{2k} \tilde{u} \Leftrightarrow W_{2k}^- u = \tilde{u}.} \Leftrightarrow u \in \text{Im}(W_{2k}), \quad W_{2k}^- W_{2k} = I_{2k}.$$

ただし , W_{2k}^- は W_{2k} の「一般逆行列」 . 同値な定義 :

- $u \in \text{Im}(W_{2k})$ のとき , 任意の $\tilde{u} \in \mathbb{R}^{2k}$ に対して , $W_{2k}^- u$ が $u = W_{2k} \tilde{u}$ の解 .
- $W_{2k} W_{2k}^- W_{2k} = W_{2k}$ (Penrose の第一方程式) .

性質 . W_{2k} : 列フルランクなら , $W_{2k}^- W_{2k} = I_{2k}$.

観察 . W_{2k}^- は一意でない (cf.) Moore–Penrose 一般逆行列)

観察 . W_{2k} : 列直交のとき , $W_{2k}^\top$ は一般逆行列のひとつ .

[★] SMR (3/5) : SMR の手続き

W_{2k}^- をどう定めるかは後回しにして , 新しい指導原理で POD の手順を辿ってみる .

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\tilde{u} &= W_{2k}^- u_t \\ &= W_{2k}^- J_{2n} \nabla_z H(W_{2k} \tilde{u}) \\ &= J_{2k} W_{2k}^\top \nabla_z H(W_{2k} \tilde{u}) \\ &= J_{2k} \nabla_{\tilde{z}} H(W_{2k} \tilde{u}).\end{aligned}$$

赤字の仮定 . $W_{2k}^- J_{2n} = J_{2k} W_{2k}^\top$ が成り立てばよい .
(cf.) POD 版 . $V_{2k}^\top J_{2n} = J_{2k} V_{2k}^\top$.

W_{2k}^- には自由度があるので , それを活かして , 上の仮定を満たす W_{2k}^- を探しにいく .

[★] SMR (4/5) : W_{2k}^- の定め方

定義 ($(k < n$ の場合を含む) Symplectic 行列)

$W_{2k} \in \mathbb{R}^{2n \times 2k}$ が “symplectic” $\Leftrightarrow W_{2k}^\top J_{2n} W_{2k} = J_{2k}$.

補題 (Peng-Mohseni)

Symplectic 行列 W_{2k} に対して $W_{2k}^- = J_{2k}^\top W_{2k}^\top J_{2n}$ とおくと ,
これは一般逆行列のひとつで , $W_{2k}^- J_{2n} = J_{2k} W_{2k}^\top$.

(証明)

- 一般逆行列であること .

$$W_{2k} W_{2k}^- W_{2k} = W_{2k} J_{2k}^\top W_{2k}^\top J_{2n} W_{2k} = W_{2k} J_{2k}^\top J_{2k} = W_{2k}.$$

- $W_{2k}^- J_{2n} = J_{2k} W_{2k}^\top$ を満たすこと .

$$W_{2k}^- J_{2n} = (J_{2k}^\top W_{2k}^\top J_{2n}) J_{2n} = J_{2k} W_{2k}^\top.$$

[★] SMR (5/5) : Symplectic 行列 W_{2k} の定め方

最後に残るのは, **symplectic な縮減行列 W_{2k} の作り方**.

$$(\text{cf.}) \quad W_{2k}^\top J_{2n} W_{2k} = J_{2k}.$$

Peng–Mohseni にはいくつか方法が提案されているが, 一番簡単なもの:

- POD 同様にサンプル $\{z^1, z^2, \dots, z^s\}$ を作る.
- 一般化座標, 運動量の分離: $j = 1, 2, \dots, s$ に対して,

$$\mathbb{R}^{2n} \ni z^j =: \begin{pmatrix} q^j \\ p^j \end{pmatrix}, \quad q^j, p^j \in \mathbb{R}^n.$$

- $X = [q^1, \dots, q^s, p^1, \dots, p^s]$ を作り,
SVD: $U \Sigma V^\top := X \quad (U \in \mathbb{R}^{n \times k}).$
- $W_{2k} = \begin{pmatrix} U & 0 \\ 0 & U \end{pmatrix}$. これは symplectic (U の直交性に依る.)

- (混乱させてしまうかもしれないが) 実は , 構成した W_{2k} はそれ自体が直交 $W_{2k}^\top W_{2k} = I_{2k}$ であり (結果として) $W_{2k}^- = W_{2k}^\top$ が成り立つ .
(論文には明解に書かれていないが , 実はそうになっている .)
- Peng-Mohseni には , W_{2k} の作り方が 3 つ提案されており , 上を含めて , 2 つについては $W_{2k}^- = W_{2k}^\top$ が成り立つ .
つまり , POD の枠組で , 直交行列の中で Hamilton 系の構造を壊さないものを探していると言える .
- 最後の 1 つについては , $W_{2k}^- \neq W_{2k}^\top$.
- W_{2k}^- に着目する指導原理は , Hamilton 系であることに依存しないので , より強いと思う ($\rightarrow$ 現在 , その帰結を研究中 .)

- 数理的に問題を「潰す」モデル縮減手法：POD , SMR , etc.
- モデル縮減は魔法の道具では**ない** .
基本：問題を記述しきる部分空間が捕まったときに動く .
- モデル縮減 + 構造保存 は promising に見える！
- 「部分空間」を捕まえるので，線形計算の専門家の助けが必要 .
- 部分空間を動的に変化させる手法？