

翼周計算におけるデータ同化手法の適用性について

名古屋靖一郎, 木野由也
 アーク情報システム
 相曽秀昭
 宇宙航空研究開発機構

Applicability of Data Assimilation for Numerical Calculation of Flow around Wing

by
 Seichiro Nagoya, Yuya Kino, and Hideaki Aiso

ABSTRACT

The aim of this paper is to discuss the applicability of data assimilation methods for numerical calculation of flow around wing. We mainly adopt the particle filter to solve the maximum problem of likelihood which is consisted of difference between CFD and EFD. Effectiveness of the adjoint method is also discussed.

1. はじめに

翼周の計算において、データ同化手法の適用性について議論する。具体的には、粒子フィルターを適用し、仮想的な実験データに数値計算を同化させた場合の感度解析を行う。また、アジョイント法の適用可能性についても議論する。

2. 粒子フィルター

粒子フィルターを文献 1) に沿って概説する。

2. 1 一般状態空間モデル

時刻 t の m 次元ベクトルの観測時系列を y_t ($t=1,2,\dots,T$) とする。この観測値に関連したシミュレーションを x_t と書くことにする。 x_t は状態ベクトルと呼ばれる。線形・ガウス型の状態空間モデルは、これらの確率変数間の関係を以下のような線形モデルと正規ノイズの二つの式で表したものである。

$$x_t = F_t x_{t-1} + G_t v_t \quad (\text{システムモデル})$$

$$y_t = H_t x_t + w_t \quad (\text{観測モデル})$$

ただし、 x_t は k 次元状態ベクトル、 $v_t \sim N(0, \Sigma_{v_t})$ と $w_t \sim N(0, \Sigma_{w_t})$ はそれぞれ l 次元、 m 次元の正規白色雑音で、システムノイズ、観測ノイズと呼ばれる。 Σ_{v_t} , Σ_{w_t} は分散共分散行列である。また、 F_t , G_t , H_t は行列である。非線形と非ガウス型の時系列モデルは、

$$x_t = F_t(x_{t-1}, v_t) \quad (\text{システムモデル})$$

$$y_t = H_t(x_t, w_t) \quad (\text{観測モデル})$$

と書くことができる。 F_t , H_t は非線形関数で、 v_t , w_t は非ガウス密度関数に従う白色雑音である。非線形・非ガウス型状態空間モデルを更に一般化したものとして、条件付分布を用いて表現された以下のような一般状態空間モデルを考えることができる。

$$x_t \sim Q_t(\cdot | x_{t-1}) \quad (\text{システムモデル})$$

$$y_t \sim R_t(\cdot | x_t) \quad (\text{観測モデル})$$

ただし、 Q_t , R_t はそれぞれ状態 x_{t-1} と x_t が与えられたときの条件付確率分布を表す。粒子フィルターにおいては、このように状態空間モデル自身が確率分布になる。

2. 2 状態推定

状態空間モデルでは、観測値 y_t に基づいて状態 x_t の推定を行うことである。時刻 j までの観測値 $y_{1:j} = (y_1, \dots, y_j)$ に基づいて、状態 x_t の推定を行う場合を考えることにする。 $j < t$ の場合、予測分布、 $j = t$ の場合、フィルター分布、 $j > t$

の場合、平滑化分布と分類される。観測値 $y_{1:j}$ が与えられたとき、状態 x_t を推定するためには、条件付分布 $p(x_t | y_{1:j})$ を求めればよい。一期先予測として、

$$p(x_t | y_{t-1}) = \int p(x_t | x_{t-1}) p(x_{t-1} | y_{t-1}) dx_{t-1}$$

フィルターとして、

$$p(x_t | y_t) = \frac{p(y_t | x_t) p(x_t | y_{t-1})}{p(y_t | y_{t-1})}$$

とする。ここで、

$$p(y_t | y_{t-1}) = \int p(y_t | x_t) p(x_t | y_{t-1}) dx_t$$

固定区間平滑化として、次のような推定が行われる。

$$p(x_t | y_{1:T}) = p(x_t | y_{1:t}) \int \frac{p(x_{t+1} | y_{1:T}) p(x_{t+1} | x_t)}{p(x_{t+1} | y_{1:t})} dx_{t+1}$$

2. 3 粒子フィルター

粒子フィルターでは、条件付分布を N 個の粒子を用いて、近似する。

$$p(x_t | y_{t-1}) \cong \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(x_t - x_{t|t-1}^{(i)})$$

$$p(x_t | y_t) \cong \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(x_t - x_{t|t}^{(i)})$$

ここで、 δ はデルタ関数であり、 $x_{t|t-1}^{(i)}$ は i 番目の粒子の

$t-1$ 時刻から計算される時刻 t での粒子である。乱数 $v_t^{(i)}$ を入れたシステムモデルにより、 $x_{t|t-1}^{(i)} = F_t(x_{t-1|t-1}^{(i)}, v_t^{(i)})$ と計算される。また、 $x_{t|t}^{(i)}$ は尤度 $w_t^{(i)} = R_t(y_t | x_{t|t-1}^{(i)})$ の大きさに応じて復元抽出された時刻 t での粒子とする。復元抽出とは、重複を許したサンプル抽出のことで、尤度が大きく観測データに近い粒子は複数残され、そうでない粒子は消滅させる処理のことである。フィルターの分母は、各点の尤度の平均になり、デルタ関数の計算により、

$$p(y_t | y_{t-1}) = \int R_t(y_t | x_t) p(x_t | y_{t-1}) dx_t$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N R_t(y_t | x_{t|t-1}^{(i)})$$

となる。尤度の高い粒子ほど条件付確率が大きくなる。この割合に応じて N 個の粒子を再構成する。粒子の集合 $X_{t|t} = \{x_{t|t}^{(1)}, \dots, x_{t|t}^{(N)}\}$ を第 t 世代と呼ぶ。粒子フィルターのアルゴリズムをまとめると、

(1) $i=1, \dots, N$ について初期粒子 $x_{00}^{(i)}$ を生成する。

(2) $t=1, \dots, T$ について、以下の処理を行う。

(a) 各 i について、

- i. 乱数 $\mathbf{v}_t^{(i)}$ を生成し, $\mathbf{x}_{t|t-1}^{(i)} = F_t(\mathbf{x}_{t-1}^{(i)}, \mathbf{v}_t^{(i)})$.
- ii. 尤度 $w_t^{(i)} = R_t(\mathbf{y}_t | \mathbf{x}_{t|t-1}^{(i)})$ を計算.
- (b) $W_t = \sum_{i=1}^N w_t^{(i)}$ を計算.
- (c) $X_{t|t-1} = \{\mathbf{x}_{t|t-1}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}_{t|t-1}^{(N)}\}$ について, 比 $\tilde{w}_t^{(i)} = w_t^{(i)} / W_t$ を計算し, 割合に応じて, 復元抽出し, $X_{tt} = \{\mathbf{x}_{tt}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}_{tt}^{(N)}\}$ を生成する.

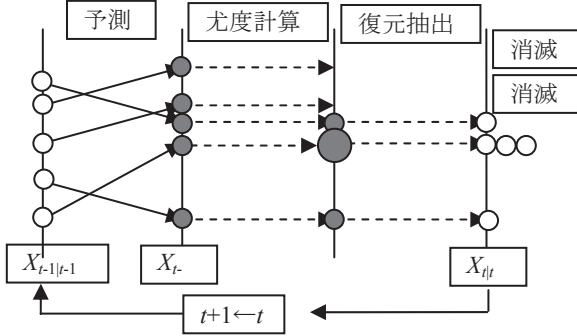


図1. 粒子フィルターのアルゴリズム

3. アジョイント法

アジョイント法は、4次元変分法とも呼ばれ、初期値や上流側の情報を実験データに融合するように更新できる。翼周計算においても、上流側の境界流速を更新し、データ同化を行える可能性がある。アジョイント法では、解いているシミュレーションの方程式系のアジョイントな方程式を構成しなければならない。そのため、方程式系や離散式が明示される必要がある。一方、粒子フィルターは、このような制約がなく、シミュレーション部分はブラックボックスで良い。今回の翼周計算においては、fluidyn-NS という汎用コードを用いたので、アジョイント法の適用は行わなかった。この本稿では、アジョイント法の有効性を確かめるための簡単な数値実験を報告することに止める。

3. 1 アジョイント法概説

教科書2)に沿って、アジョイント法について概説する。モデル方程式を次のように定義する。

$$\mathbf{x}_t = M(\mathbf{x}_{t-1})$$

M はモデル演算子, \mathbf{x}_t は時間ステップ t における状態変数である。そして, $t=0$ から $t=T$ の各時間ステップにおける観測データ \mathbf{y}_t を使って初期値 \mathbf{x}_0 を変分法により最適化することを考える。最尤推定の理論より、分散共分散行列 B, R_t およびシミュレーション初期値 \mathbf{x}^b , そして、シミュレーション値を観測値の空間へ写像する関数 $H_t(\mathbf{x})$ を用いて、

$$J = (\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^b)^T B^{-1} (\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^b) + \sum_{t=0}^T (H_t(\mathbf{x}_t) - \mathbf{y}_t)^T R_t^{-1} (H_t(\mathbf{x}_t) - \mathbf{y}_t)$$

の変分をとる。この関数を微分し, $2\mathbf{g} = \partial J / \partial \mathbf{x}_0$ を計算すると、

$$\mathbf{g} = B^{-1} (\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^b) + \sum_{t=0}^T \tilde{H}_t^T R_t^{-1} (\tilde{H}_t(\mathbf{x}_0) - \mathbf{y}_t)$$

ただし, $\tilde{H}_t(\mathbf{x}_0) = H_t(M'(\mathbf{x}_0))$ とし, $M'(\mathbf{x}_0)$ はモデル演算子を t 回施すことである。また、

$$\tilde{H}_t^T = M_0^T M_1^T \cdots M_{t-1}^T H_t^T \quad (1)$$

という行列を表し, M_t^T は、各時刻 t でのモデル演算子の接線(微分)演算子の転置行列, H_t^T は、演算子 H_t の接線演算子の転置行列を表すものとする。 \mathbf{g} が初期値の補正項となり、観測値によるデータ同化が行われる。(1)式がアジョイント演算子であり、各時刻での観測誤差にこの行列が施されることにより、時間を遡って初期値の更新が行われる。

3. 2 連続系でのアジョイント法

3. 1節では、離散系でのアジョイント法を考えたが、離散系の式を微分して、アジョイントな方程式を得ることは容易ではない。連続系での方程式

$$\partial \mathbf{x} / \partial t = M(\mathbf{x}) \quad (2)$$

を考え、アジョイントモデルのラグランジュの未定係数法での定式化を行う。ラグランジュ関数 L を次のように定義する。

$$L = \int E dt + \int \langle \lambda, M(\mathbf{x}) - \partial \mathbf{x} / \partial t \rangle dt$$

ここで、 E は誤差項であり、 λ はラグランジュ乗数であり、 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ は内積、各時刻で(2)式を満足する制約条件を課している。この式に変分 δL をとり、 $\delta(L - E) = 0$ という条件を課すると、 $\delta \lambda$ の係数から(2)式が導かれ、 $\delta \mathbf{x}$ の係数からはアジョイント方程式

$$-\partial \lambda / \partial t = M^* \lambda + \nabla_{\mathbf{x}} E$$

が得られる。ここで、アジョイント行列 M^* は、ヤコビ行列 $M = \partial M / \partial \mathbf{x}$ をとり、

$$\int \langle \lambda, M \delta \mathbf{x} \rangle dt = \int \langle M^* \lambda, \delta \mathbf{x} \rangle dt$$

を満足する。このとき、この方程式の初期値が勾配 $\mathbf{g} = \lambda(0)$ となる。

例えば、線形化された浅水波方程式

$$\begin{cases} \partial u / \partial t - f v = -g \partial h / \partial x, \\ \partial v / \partial t + f u = -g \partial h / \partial y, \\ \partial h / \partial t + \partial(Du) / \partial x + \partial(Dv) / \partial y = 0 \end{cases}$$

のアジョイント方程式は、ラグランジュ関数

$$L = \iiint E dx dy dt + \iiint \lambda^u (f v - g \partial h / \partial x - \partial u / \partial t) dx dy dt + \iiint \lambda^v (-f u - g \partial h / \partial y - \partial v / \partial t) dx dy dt + \iiint \lambda^h (-\partial(Du) / \partial x - \partial(Dv) / \partial y - \partial h / \partial t) dx dy dt$$

に変分をとる、

$$\begin{cases} -\partial \lambda^u / \partial t + f \lambda^v = D \partial \lambda^h / \partial x + \partial E / \partial u, \\ -\partial \lambda^v / \partial t - f \lambda^u = D \partial \lambda^h / \partial y + \partial E / \partial v, \\ -\partial \lambda^h / \partial t - g (\partial \lambda^u / \partial x + \partial \lambda^v / \partial y) = \partial E / \partial h \end{cases}$$

となる。ここで、 f, g は定数とした。部分積分が行われるため、奇数階微分の符号は変わり、偶数階微分の符号は変わらない。

4. 数値実験

粒子フィルターとアジョイント法による数値実験について報告する。

4. 1 コンパクト差分法の係数チューニング

Lele (cf. 3)) は、理論上観点から、コンパクト差分法の係数を提案している。ここでは、粒子フィルターを用

いて、係数のチューニングを行った。数値実験は、Chockの2次元回転コーン問題 (cf. 4)) を用いた。移流方程式

$$\partial \phi / \partial t + u \partial \phi / \partial x + v \partial \phi / \partial y = 0,$$

$$u(x, y) = -\omega y, \quad v(x, y) = \omega x, \quad \omega = 1/3600.$$

周期 $T = 2\pi / \omega = 7200\pi$ の旋回流である。33×33グリッドの格子系を用い、原点は格子番号(17,17)とする。偏心率 $H=10$ を基準とし、空間刻み幅 $h = H/10 = 1$ とする。初期値は

$$\phi_0(x, y) = \begin{cases} 50(1 + \cos \frac{\pi r}{4}) & r \leq 4, \\ 0 & \text{その他.} \end{cases}$$

$$r = \sqrt{(x+H)^2 + y^2}$$

時間刻み幅は $T/240$ とし、誤差検証時刻を $2T$ とした。コンパクト差分法は、

$$\begin{aligned} & \beta f'_{i-2} + \alpha f'_{i-1} + f'_i + \alpha f'_{i+1} + \beta f'_{i+2} \\ &= a \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{h} + b \frac{f_{i+2} - f_{i-2}}{h} + c \frac{f_{i+3} - f_{i-3}}{h} \end{aligned}$$

と書かれるが、4次精度の制約条件を入れると、

$$\begin{cases} 2\alpha + 2\beta = a + b + c - 1, \\ 6(\alpha + 4\beta) = a + 4b + 9c \end{cases}$$

となるので、 a, b, c が決まればスキームが固定される。空間方向には、5個の粒子 ($a^{(j)}, b^{(j)}, c^{(j)}$) を用意し、尤度の計算は、

$$R(\phi_0 | \phi_h^{(j)}) = \exp\left(-\frac{\|\phi_h^{(j)} - \phi_0\|_{L^2}^2}{\sigma^2}\right) \quad (3)$$

$\phi_h^{(j)}$ は粒子毎の 14400 秒目の計算解である。 $\sigma=1$ とした。

粒子の数が少ないので、1位と2位を残し、

$$\begin{pmatrix} a^{(j)} \\ b^{(j)} \\ c^{(j)} \end{pmatrix} + \gamma \begin{pmatrix} r_a - 0.5 \\ r_b - 0.5 \\ r_c - 0.5 \end{pmatrix}, \quad r_a, r_b, r_c : [0.1] \text{乱数}$$

$\gamma=0.1$ としたが、1位については、突然変異を考慮し、 $\gamma=1$ とした粒子を入れた。なお、2次元移流方程式は時間分割法で1次元化した。1000世代まで計算し、次の結果を得た。表1の上段がLeleの提案した係数と結果であり、下段が粒子フィルターによって得られた係数とその結果である。誤差も小さく、最大値の減衰の小さいことが伺える。

表1. コンパクト差分法のチューニング

| a | b | c | L^2 誤差 | 最大値 |
|-----------|---------|------------|----------|-------|
| 1.3025166 | 0.99355 | 0.03750245 | 6.983 | 98.85 |
| 1.31461 | 0.97438 | 0.02881 | 6.167 | 99.81 |

4.2 浅水波方程式の上流境界同定

アジョイント法を用いて、上流境界の同定を行ってみた。次の浅水波方程式を用いた。

u, v : 流速, D : 水深, g : 重力加速度, ν : 粘性係数, n : マニングの粗度係数, H : 底面高さ

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} = C$$

$$U = \begin{pmatrix} D \\ Du \\ Dv \end{pmatrix}, E = \begin{pmatrix} Du \\ Du^2 + gD^2/2 \\ Duv \end{pmatrix}, F = \begin{pmatrix} Dv \\ Duv \\ Dv^2 + gD^2/2 \end{pmatrix},$$

$$C = \begin{pmatrix} 0 \\ gD(\partial H / \partial x - f_x) + \nu(\partial^2(Du) / \partial x^2 + \partial^2(Du) / \partial y^2) \\ gD(\partial H / \partial y - f_y) + \nu(\partial^2(Dv) / \partial x^2 + \partial^2(Dv) / \partial y^2) \end{pmatrix},$$

$$f_x = \frac{n^2 u}{D^{4/3}} \sqrt{u^2 + v^2}, f_y = \frac{n^2 v}{D^{4/3}} \sqrt{u^2 + v^2}$$

データ同化のための実験は、岡部等(cf. 5))の河川跳水という衝撃波を捕らえるものを用いた。

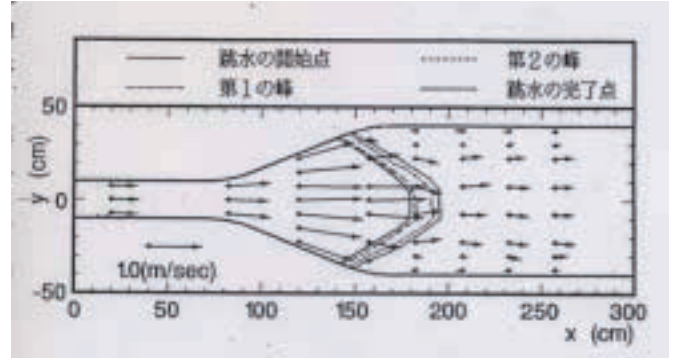


図2. 実験の水平断面流速ベクトル

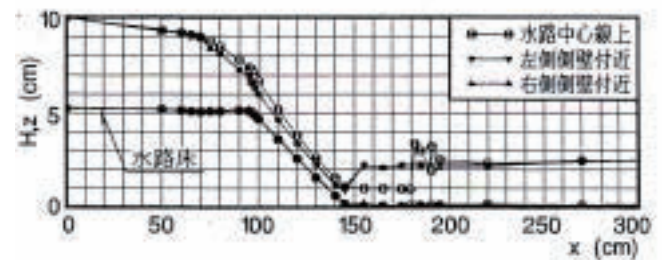


図3. 実験の鉛直断面水位

離散化法は、時間陽的オイラー法、対流項はTVD法、粘性項は2次中心差分法、壁境界はフリースリップ、 $\Delta x=0.03\text{m}$, $\Delta y=0.02\text{m}$ とし、100×40メッシュとし、時間刻み幅は0.01sとした。粘性係数は0.001m²/sとし、摩擦係数 $n=0.01346$ とした。アジョイント法を適用し、水面形を合わせるデータ同化を試みた。 u のアジョイント方程式を導入した。

$$\begin{aligned} & -\frac{\partial \lambda''}{\partial t} - u \frac{\partial \lambda''}{\partial x} - v \frac{\partial \lambda''}{\partial y} \\ &= -\sigma^{-2} \frac{\partial(D_{\text{EFD}} - D)}{\partial x} \delta_\Omega + \nu \left(\frac{\partial^2 \lambda''}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \lambda''}{\partial y^2} \right) \end{aligned}$$

ここで、 D_{EFD} は実験水深、分散 $\sigma^{-2}=10$, δ_Ω は尤度計算領域 Ω 上でのデルタ関数である。この方程式を時間逆向きに解いて、上流境界での流速を更新する操作 $u + \lambda''$ を繰り返した。

図4に初期の流速と水位の様子を示す。上段は水位の鳥瞰図であり、中段は流速ベクトルであり、下段は水位を示し、青が計算、黄色が実験である。初期では水位が一致しない様子が伺える。図5にアジョイント法によるデータ同化後の結果を示す。上流流速が初期値から変化し、実験と計算の水位が一致していることが分かる。

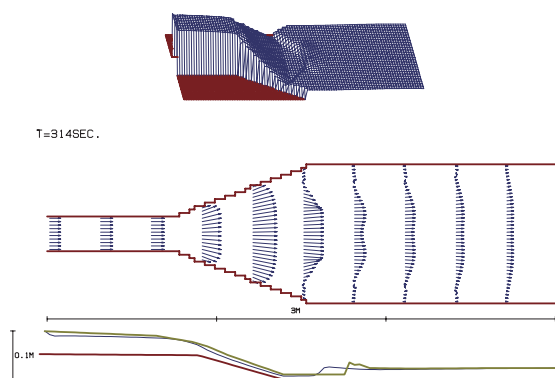


図4. 初期の流速と水位

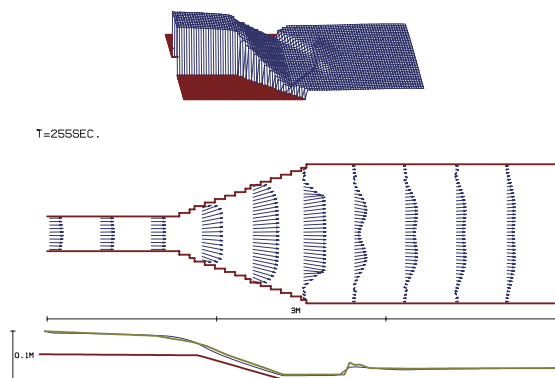


図5. データ同化後の流速と水位

4. 3 翼周計算のデータ同化手法の適用

(1) 翼面圧力でのデータ同化

粒子フィルターを用いて、翼周計算におけるデータ同化手法の適用を検討した。図6に計算範囲を示す。この上流境界での流入境界を同定する。使用した計算プログラムは、汎用コードの fluidyn-NS を用いた。スキームは3次精度 van Leer FVS、時間項は6段ルンゲ・クッタ法である。計算機はパソコンを用いた。

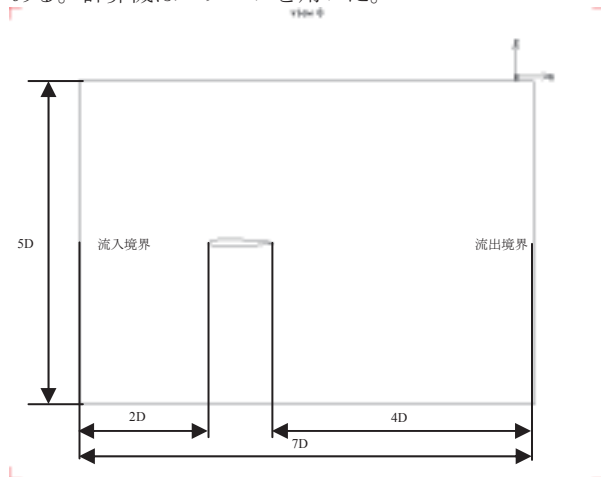


図6 翼周計算の計算範囲

尤度の計算は、翼面圧力誤差から(3)と類似の計算をし、適当な流入流速境界条件を真値に設定し、その流入流速境界条件が粒子フィルターによって、同定できるかを試した。5個の粒子により計算した。粒子数が少ないので、尤度による割合から自動的に、復元抽出をするアルゴリズムは使わなかった。1, 2位を残して、1位に3粒子、

2位から1粒子、そして、突然変異として1位から1粒子を構成した。

流入境界条件にスカラー倍の自由度を与えて、粒子フィルターを適用した。表2に各世代毎の L^2 誤差の推移を示し、図7に正解と第4世代の粒子3の解析値の比較を示す。図7の横軸は鉛直方向のメッシュ番号であり、縦軸は流入流速値を示す。単位はマッハである。1自由度の場合には、良い結果が得られた。

表2. 世代毎の L^2 誤差の推移

| 世代 | 粒子1 | 粒子2 | 粒子3 | 粒子4 | 粒子5 |
|----|-------|-------|-------|-------|-------|
| 1 | 80474 | 66806 | 17068 | 69717 | 80042 |
| 2 | 6353 | 8188 | 19364 | 15866 | 47439 |
| 3 | 3426 | 9930 | 1702 | 4365 | 11017 |
| 4 | 9840 | 8566 | 377 | 4253 | 21892 |

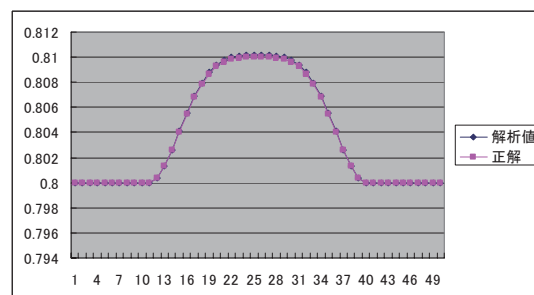


図7. 1自由度の流入流速の同化結果

次に、正解流入流速の変化があるメッシュ番号12から39について、ランダムに値を変化させる28自由度の問題を解いてみた。図8に同化結果を示す。10世代まで計算したが、この程度の結果しか得られなかった。

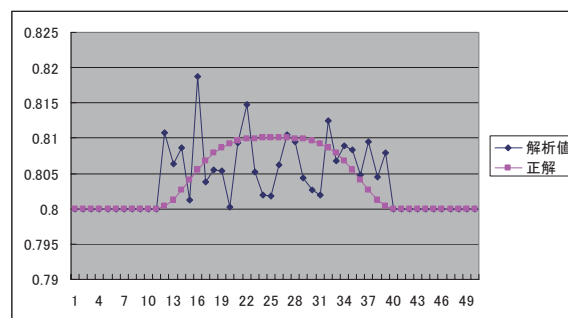


図8. ランダムな流入流速の同化結果

(2) 実験データ捕捉計算

実験データは、粗い離散的な点において計測されるが、データ同化により欠落部の流速場が補えれば実験の補助となる。

図9に翼周計算のメッシュと、流速場を捕捉するために尤度を計算するメッシュの位置を青丸で示した。青丸の位置に実験があると、正解流速場に微小な誤差を与え、実験データとした。これらの正解流速場に囲まれた流速場が粒子フィルターにより捕捉できるかをテストした。ここでの計算は(1)において良い一致を示した1自由度の手法を用いた。図10に同化された流入流速を示す。図11に正解の流速場、図12にデータ同化により予測された流速場を示す。ベクトルの上段は横方向流速値であり、下段は縦方向流速値である。図11と図12の流速値はほぼ一致しており、十分な尤度計算自由度がある場合には、実験が捕捉できることは確認できた。今後は、より現実的な実験自由度数の場合を試したい。

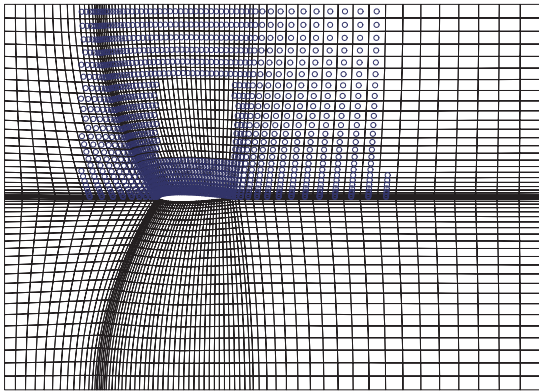


図 9．流速場捕捉のための尤度計算メッシュ

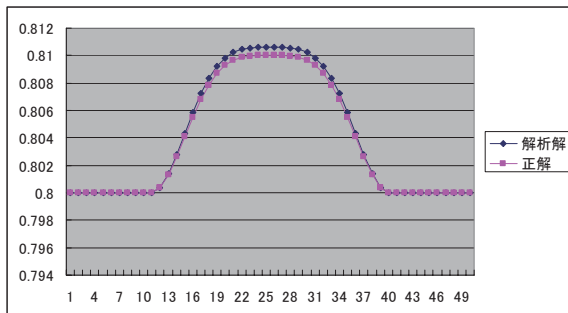


図 10．1 自由度の流入流速の同化結果



図 12．粒子フィルターにより予測された流速場



図 11．正解の流速場

5. まとめ

- 今回の計算は、パソコン上で行っており、計算機能力が貧弱であったため、粒子フィルターでの計算は、現実的な状況下では良好なものではなかった。粒子フィルターは並列計算が容易なので、今後は並列計算機を用いた場合についての検討を行う予定である。
- 粒子フィルターは、シミュレーションの部分はブラックボックスでよい利点を有する。実行形式のみがある場合の汎用コードに対しても適用できた。
- アジョイント法を時間発展の流れの方程式に適用する場合、その双対方程式は時間・流れの向きが逆になるので、上流側の情報を実験データに合わせた更新ができる。アジョイント方程式を構成するためには、シミュレーション方程式が明示される必要があるが、適用する問題に応じて良い結果を得ることが期待できる。

参考文献

- 1) 樋口, 粒子フィルタ, 電子情報通信学会誌, 88, pp.989-994, 2005.
- 2) 淡路等, データ同化, 京都大学学術出版会, 2009.
- 3) Lele, S.K., J. Comput. Phys., 103, pp.16-42, 1992.
- 4) Chock, D.P. and Dunker, A.M., Atoms. Environ. 17, pp.11-24, 1983.
- 5) 岡部等, 水工学論文集, 39, pp.403-410, 1995.