流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/redを用いた動的モード分解

大野　修平*

DMD Analysis Based on AFFr Simulation Results

Shuhei Oono*

複雑な流体現象の中に潜む支配的な構造や動力学を抽出する手法として、モード分解は近年広く注目を集めている。本稿では、汎用流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red（AFFr）に搭載されたモード分解解析機能について紹介する。特にインクリメンタル POD に基づいた次元削減処理と、Dynamic Mode Decomposition（DMD）による時系列データからの支配的構造抽出手法に焦点を当てる。応用例として、チャンネル乱流に対して DMD を適用し、並進対称性の影響を削減することで、抽出されるモードの性質や解釈への影響について考察を行った。

https://doi.org/10.69290/j.001168-vol32
Keywords: Advance/FrontFlow/red、流体解析、チャンネル乱流、連続対称性、動的モード分解

1. はじめに

流体現象は、空間的にも時間的にも高い自由度を持つ非定常な構造を示し、直接的にその全体像を把握・記述することは困難である。こうした複雑な現象を少数の支配的な構造によって簡潔に表現するための手法として、モード分解に基づく解析が注目されている。

モード分解手法の一つである Proper Orthogonal Decomposition（POD）は、データに含まれるエネルギーの大きな構造から順に直交基底を構成する手法であり、支配的な構造を抽出する手法として広く用いられている[1,2]。一方で、Dynamic Mode Decomposition（DMD）は、時系列データから時間発展を含む空間構造を抽出することが可能であり、物理現象の周波数・減衰率・伝播方向などを明示的に捉えられるという点で、流れの可視化やモデリングに有効な手法である[3,4]。

DMD はその背景に Koopman 作用素の存在があり、非線形力学系に対しても、状態空間上の観測量の時間発展を線形な枠組みで記述できる可能性を示している[5]。

本稿では、これらのモード分解手法を汎用 CFD ソフトウェア Advance/FrontFlow/red（AFFr）に搭載した実装について紹介し、特にチャンネル乱流を対象とした DMD 解析の適用事例と、連続対称性の影響およびその対処について議論する。

2. Incremental POD による DMD 解析

弊社の汎用流体解析ソフト Advance/FrontFlow/red（AFFr）には、流体の時系列データに対する POD や DMD といったモード分解解析機能が搭載されている。本章では、その機能について簡単に説明する。

Incremental POD による次元削減

本節では、AFFr に搭載されたモード分解手法の基礎として、POD、スナップショット POD、インクリメンタル POD、および POD 空間上での DMD について数式を交えて説明する。

まず、Proper Orthogonal Decomposition（POD）は、時系列データの直交モード分解により支配的構造を抽出する手法であり、空間的なエネルギーを最も効率よく保持する基底を得ることができる。

*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

流体計算の計算結果は格子点上の物理量として与えられるが、格子点ごとに流速や圧力などの物理量をとって並べた列ベクトル$\overrightarrow{x_k} \in R^m$ を時系列として並べたデータ行列

$$X = [x_0, x_1, \cdots, x_N] \qquad (1)$$

を考える。流体計算では格子点の数は数百万～数億程度まで取られることがあり、通常データ行列は縦(格子点×物理量の方向)に長い形となる。

POD は以下の固有値問題を解くことで定義される：

$$C\Phi = \Phi\Lambda \quad (C = X^tX：スナップショット相関行列) \qquad (2)$$

ここで Φ は右特異ベクトル（モード）、Λ は固有値である。エネルギーの高い順にモードを並べることで、次元削減された基底空間が得られる。

次に、スナップショット POD（Snapshot POD）[2]は、全時刻のスナップショットを保存し、それらの集合に対して特異値分解（SVD）を適用する手法である。

$$X = U\Sigma V^t \qquad (3)$$

このとき、$U \in \mathbb{R}^{nxr}$ は空間モード、$\Sigma \in \mathbb{R}^{rxr}$ は特異値（エネルギーの寄与）、$V \in \mathbb{R}^{mxr}$ は時間係数を表す。ただし、スナップショット POD では全データを同時に扱う必要があるため、大規模データに対しては計算メモリの制約が生じる。

この問題を解決するために、AFFr では Incremental POD（逐次 POD）を実装している。Incremental POD は、新たなスナップショット x_k を逐次的に POD 空間に追加しながら、空間基底を更新する手法である。これにより、過去のデータを全て保持する必要がなくなり、メモリ消費を大幅に削減できる。逐次的特異値分解（Incremental SVD）に基づいた手法が一般的である[6,7]。

Sparcity-promoting DMD

次に AFFr の DMD ツールが使用しているアルゴリズムの紹介をしつつ、DMD について簡単に説明する。２つのスナップショットデータ行列を

$$X_0 = [x_0, x_1, \cdots, x_{N-1}]$$
$$X_1 = [x_1, x_2, \cdots, x_N\ \ ]$$

ととると、厳密に$X_1 = A\,X_0$を満たすことはできないが数値的に最も確からしいものとして、Aは以下のように与えられる。

$$A \approx X_0^{\dagger}\,X_1 \qquad (4)$$

ここで†は Moore-Penrose の擬逆行列を表す。

Aを対角化することで、この時系列に対する、固有値(固有振動数)と固有モードが得られる。しかしAは対称行列ではないため、データベクトル$\overrightarrow{x_i}$が実数で表されていても、固有値・固有ベクトルは一般に複素数で、固有ベクトルは互いに非直交である。

先述の通り、Xは格子点数のオーダーの大きな行列なので式(6)を直接扱うことは非現実できある。Aの代わりに、Aを POD 基底Uに射影した

$$A' = U^t A U \qquad (5)$$

を扱う。POD 基底は Incremental POD で得られた POD モードを使用する。データ行列Xを直接扱う代わりに、U^tX (POD モード数×時系列数の行列)を扱うことで、データ量が大きく削減される。

POD では、固有値の大きさは運動エネルギー(流速をとった場合)のような物理量と対応付けることができ、固有値の大きさがその固有モードが元のデータに対し占める比重を直接表すが、DMD の場合の固有値はそのモードの(複素)振動数と対応し、物理的な比重とは対応しない。更に DMD モードは互いに非直交であるため、モードごとに内積をとって係数を定めることもできないうえ、時間変化もあるため、時系列全体で残差を最小化するように各固有モードの係数を定めなければならない。AFFr の DMD ツールでは、Sparcity-Promoting DMD のアルゴリズム[8]を採用し、DMD モードの係数決定の際は、入力の時系列データを再現するための DMD のモード数を指定し、そのモード数で残差を最小化するような DMD モードの組み合わせとその時の各モードの係数が結果として得られ、DMD モードの物理的な重要性を見出すのに便利である。

3. 適用例:チャンネル乱流

次に、AFFr で行った LES による$Re_\tau = 180$のチャンネル乱流解析の結果に対する DMD 解析の適

用例について紹介する。

チャンネル乱流(２つの平行平板間の流れ)では、壁面における強い速度勾配により大きな剪断応力が生じ、その結果として乱流のエネルギー生成が主に壁付近で起こる。壁面で生成された乱流渦はチャンネル内へと輸送・拡散されながら多様なスケールの構造を形成する。とくに壁面近傍に存在するストリークやコヒーレント構造が、時間的に変化しつつも再帰的に現れることが知られており、全体としては不規則性と構造性が共存する非定常な場となる。

チャンネル内部でのパワースペクトルは図 1 のようになり、自励振動や共鳴振動のような特定の周波数での明瞭なピークは見られない。チャンネル乱流では、スペクトルは広帯域かつ連続的であり、顕著な周波数に支配された単純な構造とは異なる複雑さを持つ。

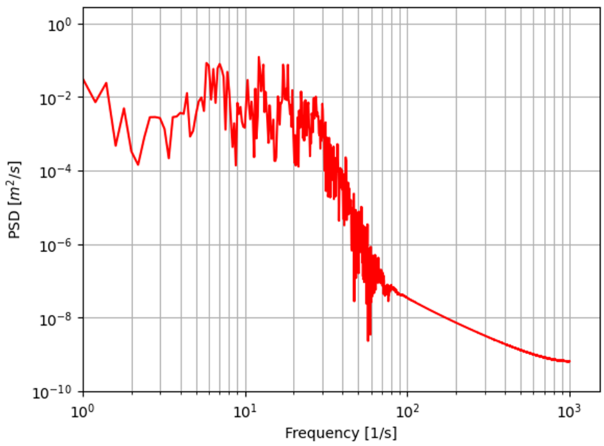

図 1 $Re_\tau = 180$ チャンネル流れにおけるパワースペクトル。

チャンネル流れは連続的対称性(流れ方向およびスパン方向の並進対称性)を持つため、スペクトルは対称性を反映して縮退する。このような系へモード分解を直接適用すると、実質的に違いのない多くのモードが結果に含まれてしまい[2]、解釈が困難になることがある。本節では、前処理で入力データから対称性の影響を除去した上で[9]、DMD を行い、得られる結果について考察する。

まず時系列データに含まれる定常成分（平均流れ）を除去する。本解析では、チャンネル乱流の持つ統計的な対称性に基づき、時間方向 t、流れ方 x およびスパン方向 z に関して平均をとり、壁面方向 y のみに依存した平均速度場を以下のように定義し、

$$\bar{u}(y) = \frac{1}{T\,L_x L_z} \iiint dx\,dz\,dt\,u(x,y,z,t) \quad (6)$$

これを時系列データから差し引いた変動成分 $u'(i\cdot\Delta t) = u(i\cdot\Delta t)$ を入力データとした。

並進対称性の存在により、同一の物理構造が異なる位置に出現し得るため、状態空間上ではこれらが対称性軌道を形成し、モード分解などを通じて得られる動的モードの解釈を困難にすることがある。

Bundanur らはこのような冗長性を排除するために第 1 フーリエモードスライス [10]を用いた。これは、速度場のフーリエ展開における第 1 モード（最長波長成分）を用いて、その位相が一定となるように各スナップショットに空間的並進を施す手法である。第 1 フーリエモードは、並進対称性の規約表現において最も低次（長波長）であり、多くの流れにおいて支配的な寄与を持つため、対称性軌道の中から代表状態を選び出す基準として適している。

初めに第 1 フーリエモードへのスライスのためのテンプレート場を以下のように導入する。

$$\overrightarrow{u'_x} := \overrightarrow{f_x}(y)\ \cos(2\pi x/L_x) \quad (7)$$

$$\overrightarrow{u''_x} := \mathrm{T}(L_x/4\,,0{,}0)\,\overrightarrow{u'_x} = \overrightarrow{f_x}(y)\ \sin(2\pi x/L_x) \quad (8)$$

これらを用いて縮退空間における位相を $\varphi_x := \arg\left(\langle\overrightarrow{u_x}\,,\overrightarrow{u'_x}\rangle + i\,\langle\overrightarrow{u_x}\,,\overrightarrow{u''_x}\rangle\right)$ を求めれば、この位相を用いた対称変換

$$S_x(\vec{u}) := T\left(-\frac{\varphi_x L_x}{2\,\pi}, 0, 0\right)\vec{u} \quad (9)$$

は並進によりのみ異なる軌道を同一軌道へ変換する。同様の議論でz方向についても

$$S_z(\vec{u}) := T\left(0, 0, -\frac{\varphi_z L_z}{2\,\pi}\right)\vec{u} \quad (10)$$

を与えることができる。またx方向とz方向への並進は可換であるため、(11)と(12)を以下のように同時に作用させられる。

$$\vec{\tilde{u}} = S(\vec{u}) = S_z(S_x(\vec{u})) \quad (11)$$

$\vec{u}$は流れ方向とスパン方向の２つの自由度落とされているが、代わりにこれらの情報は位相φ_xとφ_xに反映され、位相の時間変化は概ね流れ場のドリフト速度と対応する。

テンプレート場の壁方向依存性$f_x(y)$はチェビシェフ多項式を用いて以下のように展開される。

$$\overrightarrow{f_x}(y) = \sum_{n=1}^{n_f} T_n(y)\left[c^n_{x,x}\,\overrightarrow{e_x} + c^n_{x,y}\,\overrightarrow{e_y} + c^n_{x,z}\,\overrightarrow{e_z}\right] \quad (12)$$

係数の決定は、$\overrightarrow{f_x}(y)$の全ステップの流れ場への射影

$$J_x = \sum_{i=0}^{N}\left[\langle \vec{u}(i\,\Delta t), \overrightarrow{u'_x}\rangle^2 + \langle \vec{u}(i\,\Delta t), \overrightarrow{u''_x}\rangle^2\right] \quad (13)$$

を制約条件$\left|\overrightarrow{u'_x}\right| = 1$の下、最大化するという最適化問題を解くことで決定される。またこの時、系の壁面方向に関する鏡面対称性を考慮し、チェビシェフ多項式の偶奇性より、xおよびz成分に関しては偶数次の項のみ残し、y成分に関しては奇数次の項のみ残す。

チャンネル乱流の時系列データに対しJ_x(式(13))を最大化するように係数を決定し、求まった$\overrightarrow{f_x}(y)$および$\overrightarrow{f_z}(y)$を図 2 に示す。

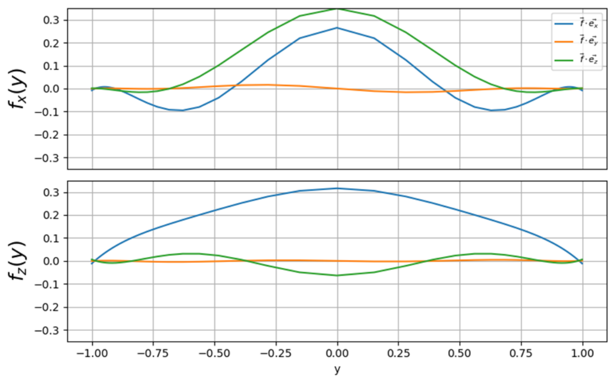

図 2 テンプレート関数のy依存性$f_x(y)$、$f_z(y)$。

また、各タイムステップごとに求まった位相φ_x、φ_zに対し、差分近似で求めた位相速度を図 3 に示す。

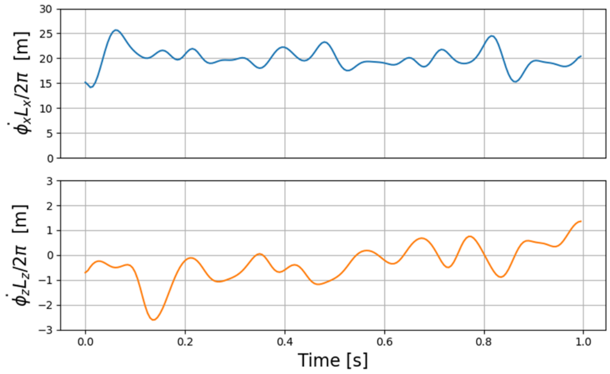

図 3 位相速度$\dot{\varphi}_x$、$\dot{\varphi}_z$の時間変化。

前処理として、平均流れの除去と並進対称性の削減を行った後に DMD を適用し、得られた固有値スペクトルを図 4 に示す。DMD を行う際、16 個の POD 基底を取った。図 4 の左側には対称性の削減を行わなかった場合、右側には削減を行った場合の結果をそれぞれ示している。

対称性の削減を行わなかった場合は、固有値が単位円上に比較的一様に分布しており、顕著な構造的特徴が見えにくい。一方、対称性を削減した場合は、固有値が単位円の内側にも分布しており、偏った分布やまとまりが見られる。これは、空間的な位置ずれにより分散していた類似構造が整理され、より少数のモードに集約された結果と考えられる。

また、得られたモードを用いて時系列データを再構成した結果、対称性を削減した場合の方が、同数のモードで再構成誤差（残差）がやや小さくなる傾向が見られた。これは、対称性に起因する冗長な表現が抑制されたことで、表現効率が向上したことを示している。

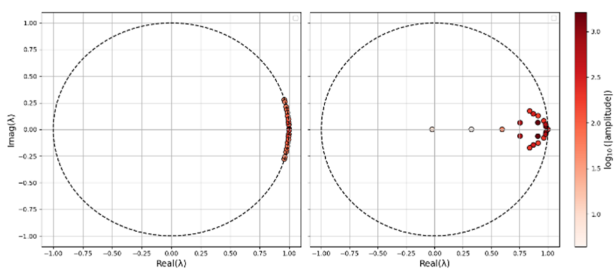

図 4 DMD 固有値スペクトルの比較。左：対称性の削減を行わない場合、右：並進対称性を削減した場合。

図 5 には、DMD により得られたモードのうち、

最も振幅が大きいものを取り上げ、主流方向（x 方向）に関する渦度成分のコンター図を示す。左図は対称性の削減を行わなかった場合、右図は削減を行った場合の結果である。

対称性を削減しなかった場合には、x 方向および z 方向に対して規則的で周期的な縞状パターンが全体に広がっており、空間的に一様な構造が抽出されているように見える。これは、空間的に位置が異なる類似構造が重ね合わされた結果として生じる人工的な周期性と解釈される可能性がある。

一方、対称性を削減した場合には、そのような単純で均一なパターンは見られず、壁面近傍を中心に構造が局在化している様子が確認できる。渦度の分布にも方向性や非対称性が現れており、空間的に非一様で物理的な特徴を強く反映した構造が抽出されていると考えられる。この違いは、対称性削減により空間的な平均化が排除され、特定の構造に対応するモードが分離・強調されたことを示唆している。これは、空間的なドリフト成分を取り除くことにより、内部のダイナミクスに純粋に対応する構造が顕在化したことを意味している。

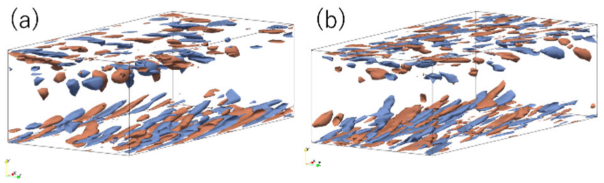

図 5 最も振幅の大きい DMD モードに対応する x 方向渦度のコンター図の比較。(a)：対称性の削減を行わなかった場合、(b)：並進対称性を削減した場合。

対称性をもつ系では、観測される時系列データには、本質的な状態変化に加え、対称操作によって生成される冗長な変化が重畳して現れる。今回の解析では、第 1 フーリエモードに基づく整列操作を通じて、このうち空間的並進に対応する自由度を明示的に除去することにより、構造そのものの変形や再編成といった内部の動的変化に焦点を当てたモード分解が可能となった。これにより、従来は対称性の効果により平均化されたり、他のモードに分散して埋もれていた情報が明確に抽出されるようになった。

4. まとめ

本稿では、Advance/FrontFlow/red（AFFr）に付属するモード分解解析機能について紹介した。特に、本機能においては、大規模な流体　解析に対応するために、スナップショット法およびインクリメンタル POD を基盤とした構成を採用し、大規模な時系列データに対しても低メモリでの次元削減を可能にしている。さらに、DMD（Dynamic Mode Decomposition）についても、同様にインクリメンタル POD を前処理とした効率的な実装となっており、時系列データから支配的な空間構造とその時間スケールを抽出できる。

DMD の適用事例として、チャンネル乱流に対する大規模解析結果を用いた検討を行った。チャンネル乱流は、壁面に沿って生成・拡散される乱流構造に加え、流れ方向およびスパン方向に連続的な並進対称性をもつ。このような系では、対称性の影響により同一の物理構造が異なる位置に現れ、モードの解釈が困難になる。そこで、第 1 フーリエモードスライスに基づいた前処理を施し、空間的な冗長性を取り除いたうえで DMD を適用することで、内部の動的構造により直接的に対応したモードを抽出することが可能となった。

一方で、流体における自励振動や共鳴振動などの例としては、円柱や翼まわりの渦放出、開放キャビティなどにおいて見られる共鳴振動などが挙げられる。これらは、しばしば固有の支配周波数をもつ離散スペクトルとして観測され、DMD が得意とする応用対象となる。

しかし、チャンネル乱流のような壁乱流では、流れの構造は多様な空間スケールにわたって階層的に形成され、対応するスペクトルもコルモゴロフ理論に示唆されるような連続的な周波数分布を示す。とくに慣性領域では、非線形相互作用を通じてエネルギーが大規模構造から小規模構造へと伝播し、粘性の影響を受けない幅広いスケールでエネルギーが分配される。この領域では、典型的なスペクトルに顕著なピークは現れず、非

周期的な軌道が支配的となる。このような軌道は、初期値に鋭敏であり、周期点が稠密に存在することから、カオス的な性質を有するとされる。

一方、本解析でDMDにより抽出されたモードは、第1フーリエモード による整列操作を基に構成されており、空間的に最長波長成分に対応する。これは、スペクトルにおけるエネルギー注入領域に相当し、乱流エネルギーが主に生成されるスケールである。この領域は慣性領域よりも自由度が小さく、カオス的な複雑さが表面化しにくいため、DMD のような線形近似手法にとって比較的扱いやすい。

DMD は、連続スペクトルを支配とする高自由度なカオス的領域に対しては、その全貌を再現するには限界があるが、今回のように空間的冗長性を除去した上で、低次の長波長構造を抽出する目的においては有効である。特に、従来の平均化処理では見えにくかった準周期的な挙動や再帰的な変動を顕在化させる手段として有用である。

DMD は非線形・高自由度な乱流全体を網羅的に記述する手法ではないものの、対象とするスケールや前処理の工夫次第で、その内部に潜む再帰性や構造性を抽出する強力な手段となり得る。今後は、DMD の適用範囲や精度をさらに高めるために、力学的知見を反映した前処理やモード選択の工夫、他手法との統合的な活用が期待される。また、本稿で取り上げたようなアプローチは、複雑な乱流場の理解と、より簡潔な表現への橋渡しとして、今後の CFD 解析においても有用な基盤となるだろう。

参考文献

[1] P. Holmes, J. Lumley, G. Berkooz, (1996), "**Turbulence, Coherent Structures, Dynamical Systems and Symmetry", Cambridge University Press**

[2] L. Sirovich, Q. Appl. Math **45** (1987), 573

[3] P. Schmid, J. Fluid Mech **656** (2010), 5

[4] N. Kutz, S. Brunton, B. Brunton, and J. Proctor (2016), "**Dynamic mode decomposition", SIAM**

[5] I. Mezić, Nonlinear Dynamics **41** (2005), 309

[6] M. Brand (2002), "**Incremental Singular Value Decomposition of Uncertain Data with Missing Values**", Springer

[7] Y. Ohmichi, T. Ishida, A. Hashimoto, AIAA **56** (2018), 3938

[8] M. Jovanović, P. Schmid, J. Nichols, Phys of Fluids **26** (2014), 24103

[9] E. Marensi, G. Yalniz, B. Hof, N. Budanur, J. Fluid Mech **954** (2022), A10

[10] N. Bundanur, P. Cvitanović, Phys. Rev. Lett. 114(2015), 084102

※ 技術情報誌アドバンスシミュレーションは、それぞれの文献タイトルの下に記載した DOI から、PDF ファイル（カラー版）がダウンロードできます。また、本雑誌に記載された文献は、発行後に、JDREAMⅢ（日本最大級の科学技術文献情報データベース）に登録されます。