

1.プロローグ .....	2
2.本資料の全体構成 .....	3
3.シミュレーション計算におけるデータの圧縮(次元削減)の概念 .....	4
3.1 データ間の相関の利用 .....	4
3.2 Active subspace の概念 .....	7
4.シミュレーションの入出力と Reduced Order Model .....	8
4.1 入力データの次元削減の概要 .....	8
4.2 シミュレーションの簡略化(surrogate model)の概要 .....	8
4.3 出力データの次元削減の概要 .....	9
5.固有値分解、特異値分解及び低ランク近似 .....	10
5.1 固有値分解 .....	10
5.1.1 固有値問題と対角化 .....	10
5.1.2 固有値と固有ベクトルの意味 .....	11
5.2 特異値分解 .....	13
5.3 低ランク近似 .....	19
6.出力データの次元削減とシミュレーションの簡略化 .....	21
6.1 例 1:水の加熱 .....	21
6.2 例 2:一般的な時系列データ .....	25
7.入力データの次元削減 .....	28
7.1 入力データ間の相関を用いた次元削減 .....	28
7.1.1 理論 .....	28
7.1.2 具体例 .....	32
7.2 入力データの感度係数を用いた次元削減 .....	33
7.2.1 概要 .....	33
7.2.2 理論 .....	36
7.2.3 具体例 .....	37
8.エピローグ .....	39

## 1.プロローグ

20xx年、あなたは某メーカーのエンジニアとして勤務している。持ち前の能力を生かして、工学システムの性能評価についてバリバリ業務をこなしていたある日、上司に呼ばれた。

「【シミュレーション計算が得意】君、わが社の重要顧客から、例のシステムの性能評価に関する依頼が来た。この性能評価では、システムを使用する環境条件が変化したときに、どのようにシステムの振る舞いに変化するか、徹底的に評価することが求められている。この仕事を頼めるのは、【シミュレーション計算が得意】君しかいない。日本政府からの認可取得の関係で、顧客は急いでいるようだ。1か月後に検討結果が欲しいと言っている。」

「わかりました。【いろいろな仕事を頼んでくる上司】さん、やってみましょう。」

あなたは早速抱えている仕事の再スケジューリングを行い、依頼された重要業務を開始した。着手してすぐにわかったことは、この工学システムは、様々な異なった種類、しかも非常にミクロなスケールから、マクロなスケールまでの物理現象に基づいているものであり、そのシミュレーションは、一筋縄ではいかない、ということであった。また、シミュレーションに入力するパラメータの数および、評価結果として考慮すべき出力パラメータの数も非常に多い。

顧客から求められているのは、システムの環境条件、すなわち入力パラメータを変化させたときのシステムの変化(応答)である。このシステムのシミュレーションコードは存在するが、非常に複雑なシステムを扱うことから、計算時間も長い。大型のクラスター計算機を利用しても、一回の計算結果を得るまでに日単位の時間がかかる。すなわち、愚直に入力パラメータを変更し、シミュレーションを実行し、その結果からシステムの応答をまとめる形では、1年かけても終わりそうにない。

そこで、シミュレーションに用いる計算モデルを大幅に簡略化し、試計算を行ってみた。その結果、分かったことは、大幅な簡略化をした計算モデルでは、システムの応答が適切に評価できず、使い物にならない、ということであった。

あなたはハタと困ってしまい、上司と相談することとした。

「【無茶な仕事を振ってくる上司】さん、ということで、どうすればよいか、悩んでいるんです。お知恵を拝借いただけないでしょうか？」

「うむ、そうか。コードでメッシュなどを粗くするのはダメだったんだな？」

「やってみましたが、ダメでした」

「最近、計算時間を抜本的に減少させる手法として、Reduced Order Model という手法が流行っているらしい。そういえば、【この話は大学で聞いているはずだが】君、君の大学の指導教員も手掛けていたのでは？」

「そ、そうでしたかね(汗)。【意外に鋭い上司】さん、一度話を聞いてみることにします」ということで・・・。

## 2.本資料の全体構成

本資料では、Reduced Order Model (ROM)の基礎を学ぶため、以下の章構成としている。

第3章では、シミュレーション計算におけるデータ圧縮の概念について、概要を説明する。また、ROMで重要となる active subspace の概念を説明する。

第4章では、シミュレーション計算の入出力データとROMの関係の概要を解説する。

第5章では、ROMで重要となる線形代数の知識、特に固有値分解と特異値分解について説明を行う。また、これらの結果を用いて行列を近似する低ランク近似について解説する。

第6章では、シミュレーションの出力データに対してROMを適用する例について説明する。ここでは、入力データの変化に対して得られた出力データに相関があることに着目し、入力データから出力データを予測するモデルの作成方法を示す。

第7章では、シミュレーションの入力データに対してROMを適用する例を二つ説明する。一つは入力データ間の相関を利用し、独立な変動が少ない入力データを削減する方法、もう一つは、計算結果に大きな影響を与えない(感度が小さい)入力データを削減する方法である。

### 3.シミュレーション計算におけるデータの圧縮(次元削減)の概念

#### 3.1 データ間の相関の利用

以下に示す二次元(x,y)のデータがある。

$$(x,y) = (0,0), (1,2), (2, 4), (3, 6), (4, 8), (5, 10), (6, 12), (7, 14), (8, 16), (9, 18)$$

このデータは、20個の数字からなっているが、このデータを、もっと簡略に伝える方法はないだろうか？

データをプロットするまでもなく、これらのデータは、 $y=2x$  の関係を満たしている。したがって、 $x=(0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9)$ ,  $y=2x$  という表記でも同じ内容のデータを伝えることができる。つまり、もともとは2次元のデータを、1次元のデータに置き換えられることを示している。これは、データ間に存在する関係性、すなわち「相関」や「規則性」を用いて、余分な(冗長な)データを削減できることを示している。

それでは、表 3.1～表 3.3 の例はどうであろうか？

表 3.1 データ 1

X	Y	Z
0.778943	1.55789	2.33683
0.632191	1.26438	1.89657
0.669418	1.33884	2.00826
0.911412	1.82282	2.73424
0.729727	1.45945	2.18918
0.122423	0.244845	0.367268
0.170492	0.340984	0.511476
0.000968348	0.0019367	0.00290504
0.0726456	0.145291	0.217937
0.789154	1.57831	2.36746
0.351568	0.703136	1.0547

表 3.2 データ 2

X	Y	Z
0.693185	0.508612	3.09678
0.44018	0.350574	2.02169
0.442068	1.55027	4.42675
0.428305	0.611313	2.50754
0.519177	0.0112239	1.57998
0.116691	0.504184	1.35844
0.965998	0.433146	3.76429
0.135558	0.522415	1.4515
0.473424	1.12651	3.67329
0.474922	0.524639	2.47405
0.403969	1.4315	4.07491
0.415812	0.113456	1.47435
0.0332364	1.72671	3.55313
0.682517	1.47912	5.00578
0.977801	1.08385	5.1011

(以下省略)

表 3.3 データ 3

X	Y	Z
-0.319907	0.236917	0.917349
0.654223	0.60694	0.451237
-0.0619923	-0.843833	0.533013
-0.151772	0.41548	0.896851
-0.445456	0.850281	0.28034
-0.478713	-0.412266	0.775159
0.55845	-0.578679	0.59436
0.612535	-0.17942	0.769812
$-3.90043 \times 10^{-6}$	0.000108227	1.
0.399286	-0.015582	0.916694
-0.140148	-0.301477	0.943117
-0.806074	-0.0836212	0.585878
0.0114799	0.521571	0.853131

(以下省略)

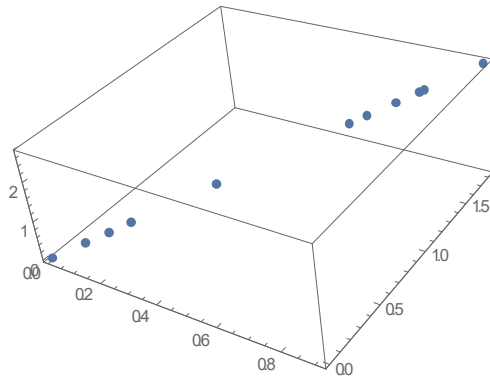


図 3.1 データ 1 をプロットしたもの

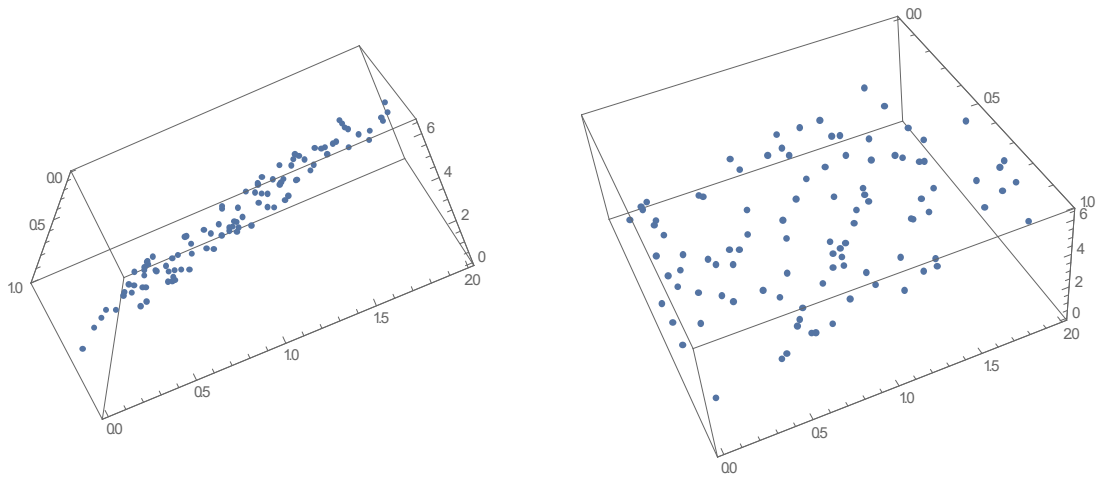


図 3.2 データ 2 をプロットしたもの

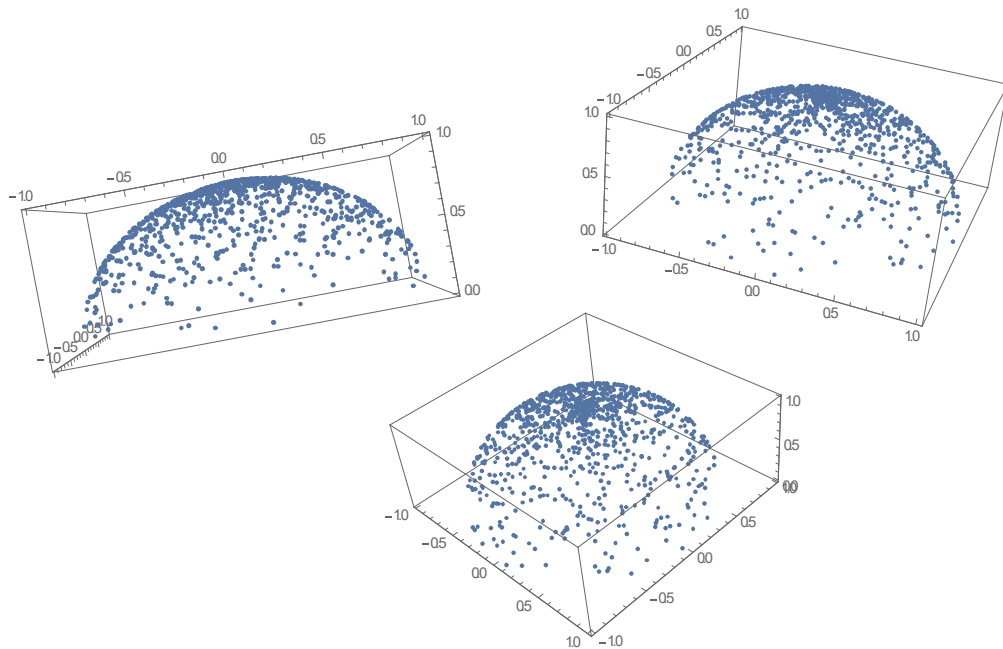


図 3.3 データ 3 をプロットしたもの

これらの例は、もともとは三次元のデータであったものを、一次元あるいは二次元で示すことが可能であることを示している。すなわち、もともと三次元のデータを一次元あるいは二次

元に削減できることを示している。また、もともとのデータには、不要な次元が含まれていた、と言うこともできる。

「複雑なデータを、データ間の相関を活用して、簡略化する」ことが Reduced Order Model の一つの本質である。

### 3.2 Active subspace の概念

図 3.1 の個々のデータは三次元の座標であらわされているものの、図 3.1 より明らかなように、一次元の直線状に並んでいる。すなわち、図 3.1 のデータを表現するためには、直線に沿った次元を考えれば十分であり、この直線に直交する方向は、このデータを表現するためには全く不要である。

図 3.2 については、データがある平面上に並んでおり、これらのデータを取り扱うためには、この二次元平面を考えれば十分である。この平面に直交する方向は、考えなくても全く差し支えない。

図 3.3 については、データが球面状に並んでおり、この球面上、すなわち二次元を考えればデータを取り扱うことができる。

これらの観察結果は、扱うデータに相関がある場合には、考慮しなくてもよい方向(次元)が存在することを示している。逆に、特定の方向は、データを表すために不可欠であるといえる。図 3.1 の場合、直線の方法はデータを表すのに不可欠であり、図 3.2 の場合には、平面を構成する 2 方向が不可欠である。図 3.3 の場合は、球面上のデータを表す極角と方位角の 2 つが不可欠となる。

このように、データを表すために不可欠(あるいは重要)な方向(次元)を active subspace と呼ぶ。Subspace は、部分空間と訳されるが、例えばある三次元空間を考えた場合、その中にある点(0 次元)、線(1 次元)、平面(2 次元)は、それぞれ、元の三次元空間の部分空間を構成することになる。このような部分空間は、無数に考えることができるが、そのうち、データを取り扱うために必要な部分空間を抜き出したものを active(有効な) subspace(部分空間)と呼んでいる。

シミュレーション計算を簡略化するためには、この active subspace をどのように見出すかがキーポイントとなる。

## 4.シミュレーションの入出力と Reduced Order Model

シミュレーション解析は、おおざっぱに言うと、入力データを計算モデルに与え、出力データを得る作業であるといえる。シミュレーションにおいては、図 4.1 に示す形で Reduced Order Model を使用することができる。本章では、それぞれの項目について、概要を述べる。なお、出力データの次元削減及びシミュレーションの簡略化については第 6 章で、入力データの次元削減については第 7 章で、より詳細な説明を行う。

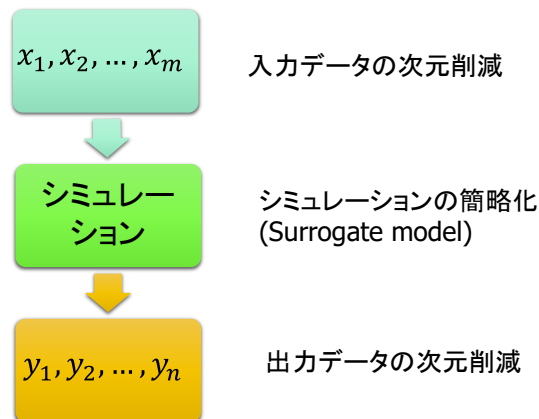


図 4.1 シミュレーション計算の概要と Reduced Order Model

### 4.1 入力データの次元削減の概要

### 4.2 シミュレーションの簡略化(surrogate model)の概要

一般にシミュレーションモデルは、実際の物理現象を模擬したモデルを設定し、数値計算を行う。例えば、原子炉の核特性解析では、中性子の振る舞いを Boltzmann 輸送方程式で記述し、この Boltzmann 輸送方程式の解を各種の数値解法により求める。あるいは、炉心損傷を含むような過酷事故の進展を評価する場合には、燃料溶融、燃料と被覆管の共晶反応、原子炉容器破損、コアコンクリート反応など、様々な物理現象を含むモデルを構築し、数値計算を行う。

このような数値計算は、対象とするシステムが複雑であるほど、一般的に長い計算時間を要する。このような場合、入力データを変えながら多数回シミュレーション計算を行うことは、現実問題として難しい場合が多い。

しかし、入力データの変化と、計算結果である出力データの変化には、高い相関がみられることが多い。例えば、燃料集合体の濃縮度に対する燃料集合体の無限増倍率の依存性を予測することを考える。計算精度の高い連続エネルギーモンテカルロコードを用い、統計誤差を非常に小さくなるようにして計算を実施すると、長い計算時間を要する。そのため、濃縮度を変えながら、数多くの計算をすることはかなりの計算時間を要するかもしれない。しかしながら、濃縮度と無限増倍率には、非常に良い相関があるため、代表的な濃縮度について連続エネルギーモンテカルロコードの計算を実施し、計算していない濃縮度については、代表点の濃縮度における無限増倍率を内挿することで、実用上、十分な精度で無限増倍率を予測できると考えられる。

これは、シミュレーションモデルの簡略化(surrogate model)の一例である。Surrogate とは、「代



理」を意味する言葉であり、surrogate model は、「代理モデル」すなわち、詳細なシミュレーションコードの「代わり」になるモデルであるといえる。

Surrogate model は、おおざっぱに言うと、入力データと詳細なシミュレーションの計算結果の相関(関係)を用い、入力データを用いて、出力データの内挿を行うものである。Surrogate model は、メッシュ幅を広くしたり、考慮する物理モデルの数を減らしたりするなど、計算モデルの簡略化を行わないところに特徴がある。従って、入力データと計算結果の相関が高く、入力データから、高精度に計算結果が内挿できる場合、surrogate model は、低い計算コストで、高精度な結果を得ることが可能である。逆に、入力データと出力データの相関の発見が困難、両者の関係が極めて複雑で内挿モデルを作成することが困難な場合には、surrogate model の適用は制限される。

### 4.3 出力データの次元削減の概要

一般的に、シミュレーション計算においては、多数のデータが出力される。例えば、原子炉内の燃料棒ごとの三次元の出力分布を考える。燃料棒本数は数万本( $10^4$ )のオーダーであることから、軸方向のメッシュ数を 100 すると、原子炉の一つの状態あたり、 $10^4 \times 10^2 = 10^6$  オーダーの燃料棒出力の計算結果が得られる。原子炉の安全評価では、数百～数千点の原子炉の状態を評価するため、 $10^6$  オーダーの個数の燃料棒出力のデータが、数百～数千個出力されることになる。

しかし、これらのデータは、まったくの無相関ではない。例えば、制御棒配置、燃焼度や原子炉出力が似通っている場合、燃料棒出力のデータは、かなり似通ったものになることが容易に予想できる。これは、言い換えると、データ間に高い相関があることを示しており、この相関を用いて、得られたデータをより少数のデータであらわすことが可能となる。

## 5.固有値分解、特異値分解及び低ランク近似<sup>1</sup>

本章では、データの次元削減を行うために必要となる数学的テクニックである特異値分解及び低ランク近似について解説を行う。

### 5.1 固有値分解

#### 5.1.1 固有値問題と対角化

ある正方行列 $\mathbf{A}$ による変換に対し、ある複素数 $\lambda$ および $\vec{0}$ でないベクトル $\vec{v}$ が(5.1)式の関係を満たすとき、 $\lambda$ を固有値、ベクトル $\vec{v}$ を（縦）固有ベクトルとよぶ。

$$\mathbf{A}\vec{v} = \lambda\vec{v} \quad (\vec{v} \neq \vec{0}) \quad (5.1)$$

(5.1)式は、行列 $\mathbf{A}$ を固有ベクトル $\vec{v}$ に作用させると、その固有ベクトルの方向は変化せず、大きさが $\lambda$ 倍（固有値倍）されることを示している。つまり固有値 $\lambda$ は、固有ベクトル $\vec{v}$ の行列 $\mathbf{A}$ による伸縮の度合を表す値である。

一例として、 $2 \times 2$ の正方行列 $\mathbf{A}$ に対して縦固有ベクトル $\vec{v}_1, \vec{v}_2$ が存在したとする。ただし、この固有ベクトルに対応する固有値は $\lambda_1, \lambda_2$  ( $\lambda_1 \neq \lambda_2$ ) とする。

$$\mathbf{A}\vec{v}_1 = \lambda_1\vec{v}_1 \quad (\vec{v}_1 \neq \vec{0}) \quad (5.2)$$

$$\mathbf{A}\vec{v}_2 = \lambda_2\vec{v}_2 \quad (\vec{v}_2 \neq \vec{0}) \quad (5.3)$$

ここで、固有ベクトルからなる行列 $\mathbf{P}$ 、固有値からなる行列 $\mathbf{\Lambda}$ を(5.4), (5.5)式で定義する。

$$\mathbf{P} = (\vec{v}_1, \vec{v}_2) \quad (5.4)$$

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \quad (5.5)$$

行列 $\mathbf{P}$ に行列 $\mathbf{A}$ を作用させると次式になる。

$$\mathbf{AP} = \mathbf{P}\mathbf{\Lambda} \quad (5.6)$$

(5.6)式に、行列 $\mathbf{P}$ の逆行列 $\mathbf{P}^{-1}$ を両辺の左から作用させる。

$$\mathbf{P}^{-1}\mathbf{AP} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{P}\mathbf{\Lambda}$$

$$\mathbf{P}^{-1}\mathbf{AP} = \mathbf{E}\mathbf{\Lambda}$$

$$\mathbf{P}^{-1}\mathbf{AP} = \mathbf{\Lambda} \quad (5.7)$$

行列 $\mathbf{A}$ に対応する固有ベクトル $\vec{v}_1, \vec{v}_2$ を使えば、行列 $\mathbf{A}$ から(5.7)式のように対角成分だけの行列を取り出すことができる。なお、上記において、 $\mathbf{E}$ は、 $2 \times 2$ の単位行列とする。

同様に、(5.6)式の両辺の右から逆行列 $\mathbf{P}^{-1}$ を作用させる。

$$\mathbf{APP}^{-1} = \mathbf{P}\mathbf{\Lambda}\mathbf{P}^{-1}$$

---

<sup>1</sup> 第5章及び第6章は、名古屋大学山本研究室の松下柁輝氏の研究会資料をベースに作成されている。

$$\begin{aligned}\mathbf{AE} &= \mathbf{P}\mathbf{\Lambda}\mathbf{P}^{-1} \\ \mathbf{A} &= \mathbf{P}\mathbf{\Lambda}\mathbf{P}^{-1}\end{aligned}\tag{5.8}$$

(5.8)式は、行列 $\mathbf{A}$ を固有ベクトルに関する行列 $\mathbf{P}$ 、逆行列 $\mathbf{P}^{-1}$ と固有値に関する行列 $\mathbf{\Lambda}$ の3つに分解できることを示している。

### 5.1.2 固有値と固有ベクトルの意味

固有値と固有ベクトルの本質的な意味を考えるために、具体的な行列を扱って説明していく。  
2次元のXY座標系上の点を移動させる表現行列 $\mathbf{A}$ が次式で与えられるとする。

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}\tag{5.9}$$

XY座標系の軸方向のベクトルを以下のように定義する。

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}\tag{5.10}$$

$$\vec{y} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\tag{5.11}$$

例えば、次の直交座標系上のデータ点 $\vec{q}$ について考える。

$$\vec{q} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1\vec{x}\tag{5.12}$$

このデータ点に対して、行列 $\mathbf{A}$ を作用させる。

$$\mathbf{A}\vec{q} = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 2 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \end{pmatrix} = 3\vec{x} + 2\vec{y}\tag{5.13}$$

ここで、もう一度行列 $\mathbf{A}$ を作用させる。

$$\mathbf{A}(\mathbf{A}\vec{q}) = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 2 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 11 \\ 14 \end{pmatrix} = 11\vec{x} + 14\vec{y}\tag{5.14}$$

(5.13), (5.14)式からわかるように、XY座標系では、行列 $\mathbf{A}$ による変換を単純に扱うことができない。もし行列 $\mathbf{A}$ による変換をn回繰り返す場合、変換後のベクトルを求めるためには行列とベクトルの演算をn回行う必要がある。

そこで、行列 $\mathbf{A}$ による変換を簡単に扱えるような新たな軸を考える。行列 $\mathbf{A}$ の固有値と固有ベクトルは以下のように求められる。

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 5 \end{pmatrix}\tag{5.15}$$

$$\mathbf{P} = (\vec{v}_1, \vec{v}_2) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}\tag{5.16}$$

ここで、 $\vec{q}$ と $\mathbf{A}\vec{q}$ と $\mathbf{A}(\mathbf{A}\vec{q})$ の成分を直交座標系ではなく固有ベクトルを使って表現してみる。

$$\vec{q} = \vec{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{2}{3} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} + \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \frac{2}{3}\vec{v}_1 + \frac{1}{3}\vec{v}_2\tag{5.17}$$

$$\mathbf{A}\vec{q} = \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \end{pmatrix} = \frac{4}{3} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} + \frac{5}{3} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = 2 \times \frac{2}{3} \vec{v}_1 + 5 \times \frac{1}{3} \vec{v}_2 \quad (5.18)$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{A}\vec{q}) = \begin{pmatrix} 11 \\ 14 \end{pmatrix} = \frac{8}{3} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} + \frac{25}{3} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = 2^2 \times \frac{2}{3} \vec{v}_1 + 5^2 \times \frac{1}{3} \vec{v}_2 \quad (5.19)$$

この結果を見ると、あるベクトルに行列 $\mathbf{A}$ を作用させることは、固有ベクトル $\vec{v}_1$  方向に2倍、 $\vec{v}_2$  方向に5倍することに等しい。また、各倍率は(5.15)式の各固有ベクトルに対応する固有値の値に等しい。以上のことを図4.1に示す。つまり、行列 $\mathbf{A}$ の変換は、あるベクトルを各固有ベクトルに分解し、その固有ベクトル上で固有値倍することに等しい。

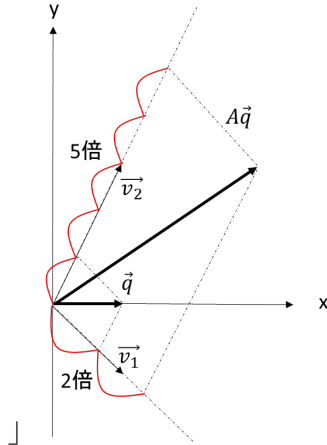


図 5.1 行列  $\mathbf{A}$  による変換の固有値と固有ベクトルの解釈

行列 $\mathbf{A}$ による変換を $n$ 回繰り返すとき、(5.8)式を使うと以下ようになる。

$$\mathbf{A}^n = \mathbf{P}\mathbf{\Lambda}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{P}\mathbf{\Lambda}\mathbf{P}^{-1}\dots\mathbf{P}\mathbf{\Lambda}\mathbf{P}^{-1} = \mathbf{P}\mathbf{\Lambda}^n\mathbf{P}^{-1} = \mathbf{P} \begin{pmatrix} 2^n & 0 \\ 0 & 5^n \end{pmatrix} \mathbf{P}^{-1} \quad (5.20)$$

$$\mathbf{A}^n\vec{q} = \mathbf{P} \begin{pmatrix} 2^n & 0 \\ 0 & 5^n \end{pmatrix} \mathbf{P}^{-1}\vec{q} = \frac{2^n \times 2}{3} \vec{v}_1 + \frac{5^n \times 1}{3} \vec{v}_2 \quad (5.21)$$

行列 $\mathbf{A}$ による変換は固有ベクトルを用いれば固有値で簡単に扱うことができる。言い換えると、行列 $\mathbf{A}$ による変換は、対応する各固有ベクトル上で固有値倍する操作である。以下に簡単な行列 $\mathbf{A}$ の変換の解釈を示す。

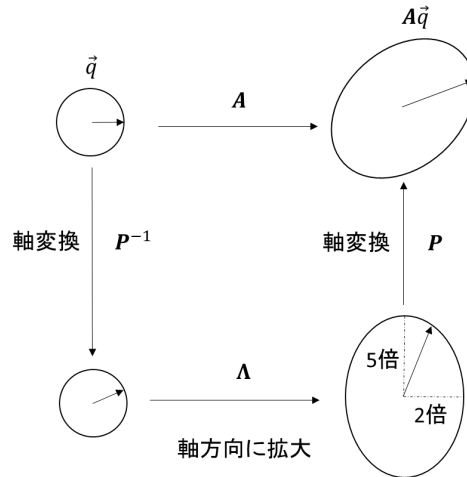


図 5.2 行列 A の変換の解釈

## 5.2 特異値分解

特異値分解とは、任意の行列を適当な直交行列により対角行列に変換する操作である。固有値分解と同じ操作と考えるが良いが、固有値分解が正方行列に対してのみ使用できるのに対し、特異値分解は任意の行数・列数の行列に対して適用可能となる。また、対象とする行列が対称行列(すなわち正方行列)である場合、固有値分解の結果と特異値分解の結果は一致する。特異値分解は、固有値分解の一般的なケースであると理解しても良い。ROM を作成する場合、正方でない行列を扱うことが一般的であり、従って、特異値分解が用いられる。

具体的に、 $m$  行  $t$  列の実数行列  $\mathbf{A}$  を正規直交基底  $\mathbf{U}=(\vec{u}_1, \vec{u}_2, \dots, \vec{u}_m)$  と  $\mathbf{V}=(\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_t)$  を用いて  $m$  行  $t$  列の対角行列  $\mathbf{\Sigma}$  に変換する。

$$\mathbf{U}^T \mathbf{A} \mathbf{V} = \mathbf{\Sigma} \quad (5.22)$$

この式は、前節の(5.7)式に対応している。

ここで、行列  $\mathbf{\Sigma}$  は対角行列として以下のように表される。(  $m < t$  の時)

$$\mathbf{\Sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \sigma_m & 0 \end{pmatrix} \quad (5.23)$$

対角成分は、 $\sigma_1 > \sigma_2 > \dots > \sigma_i > \dots > \sigma_m \geq 0$  ( $1 \leq i \leq m$ ) で表される単調減少する正の値である。 $m$  は行列  $\mathbf{A}$  のランクに一致する。

正規直交基底  $\mathbf{U}, \mathbf{V}$  は共にユニタリ行列 (転置行列と逆行列が等しい:  $\mathbf{U}^T \mathbf{U} = \mathbf{U}^{-1}$ ,  $\mathbf{V}^T \mathbf{V} = \mathbf{V}^{-1}$ ) であるので、両辺の左から  $\mathbf{U}$ 、右から  $\mathbf{V}^T$  をかけると、次式に変換できる。

$$\begin{aligned} \mathbf{U}^T \mathbf{U} \mathbf{A} \mathbf{V}^T \mathbf{V} &= \mathbf{U} \mathbf{\Sigma} \mathbf{V}^T \\ \mathbf{U} \mathbf{U}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{V} \mathbf{V}^{-1} &= \mathbf{U} \mathbf{\Sigma} \mathbf{V}^T \\ \mathbf{E} \mathbf{A} \mathbf{E} &= \mathbf{U} \mathbf{\Sigma} \mathbf{V}^T \\ \mathbf{A} &= \mathbf{U} \mathbf{\Sigma} \mathbf{V}^T \end{aligned} \quad (5.24)$$

つまり、行列  $\mathbf{A}$  は3つの行列に分解できる。ここで、行列  $\mathbf{U}$  を左特異ベクトル、行列  $\mathbf{\Sigma}$  を特異値、行列  $\mathbf{V}$  を右特異ベクトルという。(5.24)式は、固有値問題の(5.8)式に対応している。

図 5.2 と同様にこの変換についての概念を図 5.3 に示す。内容としては、次元の縮約などあるが固有値分解とほぼ同じである。

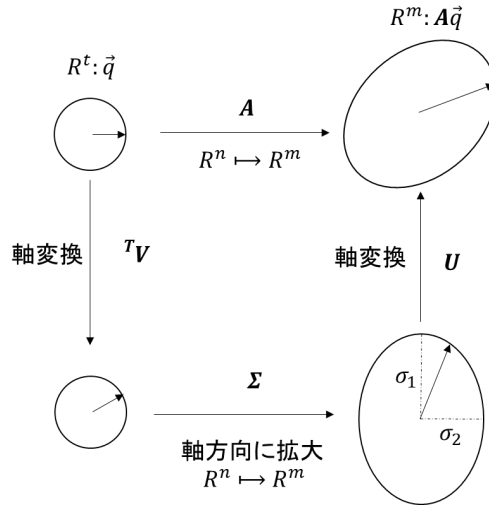


図 5.3 行列  $A$  の変換の解釈

特異値分解の具体例を以下の行列  $\mathbf{B}$  を用いて示す。

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \frac{50}{11\sqrt{2}} & \frac{50}{9\sqrt{2}} & \frac{50}{9\sqrt{2}} & \frac{50}{-11\sqrt{2}} \\ \frac{4}{-9\sqrt{2}} & \frac{4}{11\sqrt{2}} & \frac{4}{-11\sqrt{2}} & \frac{4}{9\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (5.25)$$

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 100 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 10 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (5.26)$$

(5.26)式の3つの行列を(5.24)式に対応させて考える。左特異ベクトルの行成分及び右特異ベクトルの列成分は正規化されていて、異なった行成分、列成分で内積をとると0となり直交していることが容易に分かる。また、行列  $\mathbf{B}$  と特異値  $\Sigma$  のランクは必ず一致しこの計算例では3になる。

この分解において、右特異ベクトルを観察してみる。右特異ベクトルを行方向に見ると4つのベクトルがあることが分かる。この4つのベクトルそれぞれを4つの時間ステップからなる変化としてみると、以下のようなになる。

$$\begin{pmatrix} T_{\vec{v}_1} \\ T_{\vec{v}_2} \\ T_{\vec{v}_3} \\ T_{\vec{v}_4} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (5.27)$$

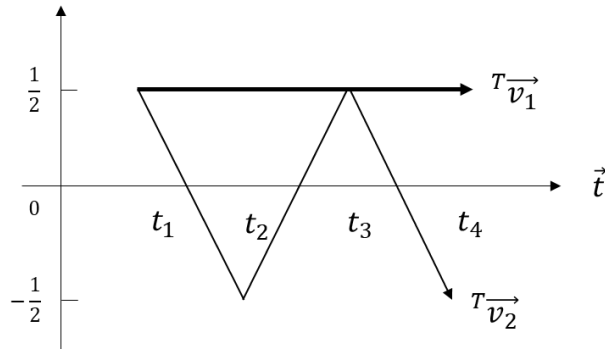


図 5.4 右特異ベクトル  $T_{\vec{v}_1}$  と  $T_{\vec{v}_2}$  の概形

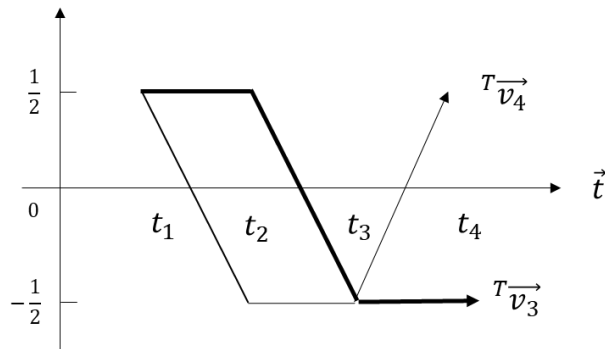


図 5.5 右特異ベクトル  $T_{\vec{v}_3}$  と  $T_{\vec{v}_4}$  の概形

ここで、行列  $\mathbf{B}$  の特徴を探してみると、1 行目は一定になっている。また、2 行目と 3 行目を見ると正負が逆になっていて、右に行くほど全体としての値が小さくなっていることが分かる。まさに、この特徴が特異ベクトルの  $T_{\vec{v}_1}$ 、 $T_{\vec{v}_2}$ 、 $T_{\vec{v}_3}$  にそれぞれ対応している。特異ベクトル  $T_{\vec{v}_4}$  の性質は、行列  $\mathbf{B}$  の行方向のデータには存在しない。(5.26)式を見ると対応する特異値が存在しないことが分かる。すなわち、この特異ベクトル  $T_{\vec{v}_4}$  は無視してもよい。

ここで、ROM 作成における特異値分解の役割について説明する。簡単のために、状態が時間ステップごとに変化する 2 つのサンプルについて考える。

表 5.1 各サンプルの時間ステップごとの変化

	$t_1$	$t_2$	$t_3$	$t_4$
1 サンプル $\vec{c}_1$	$\frac{15\sqrt{2}}{4}$	$\frac{5\sqrt{2}}{4}$	$\frac{15\sqrt{2}}{4}$	$\frac{5\sqrt{2}}{4}$
2 サンプル $\vec{c}_2$	$\frac{5\sqrt{2}}{4}$	$\frac{15\sqrt{2}}{4}$	$\frac{5\sqrt{2}}{4}$	$\frac{15\sqrt{2}}{4}$

このデータを行列 $\mathbf{C}$ に変換すると以下のようになる。

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} \frac{15\sqrt{2}}{4} & \frac{5\sqrt{2}}{4} & \frac{15\sqrt{2}}{4} & \frac{5\sqrt{2}}{4} \\ \frac{5\sqrt{2}}{4} & \frac{15\sqrt{2}}{4} & \frac{5\sqrt{2}}{4} & \frac{15\sqrt{2}}{4} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{c}_1 \\ \vec{c}_2 \end{pmatrix} \quad (5.28)$$

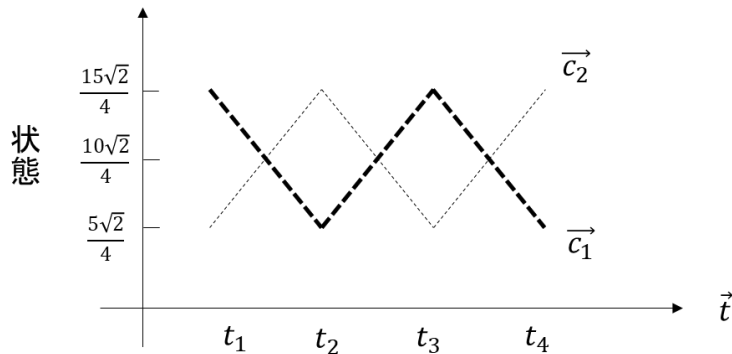


図 5.6 サンプル 1,2 の時間ステップ変化 (行列  $\mathbf{C}$ )

ここで、行ベクトルが行列にどの程度寄与しているのかを表す寄与率の大きさは、次式のように定義される。

$$(\text{行ベクトル } \vec{c}_i \text{ の行列 } \mathbf{C} \text{ に対する寄与率}) = \sqrt{\frac{\vec{c}_i^2}{\sum_{i=1}^m \vec{c}_i^2}} \quad (5.29)$$

ベクトル $\vec{c}_1, \vec{c}_2$ の大きさは等しいので行列 $\mathbf{C}$ に対する寄与率の大きさは等しい。

表 5.2 ベクトルの寄与率

ベクトル	寄与率 [%]
$\vec{c}_1$	50
$\vec{c}_2$	50

ROM の作成の考え方は、この行列 $\mathbf{C}$ の傾向を表すベクトルの数をできるだけ減らすことである。現在の形では、ベクトル $\vec{c}_1, \vec{c}_2$ の片方を無視することは行列  $\mathbf{C}$  の 50%の情報を削ることになる。そこで、寄与率が大きいベクトルと小さいベクトルに変換できれば、ベクトルを減らし



た際の行列  $\mathbf{C}$  の情報損失は小さくなることが考えられる。そのようなベクトルを探すために特異値分解を使用することができる。

行列  $\mathbf{C}$  を特異値分解すると、次式で書き表される。

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 10 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 5 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (5.30)$$

(5.30)式における特異値 10 に対応するベクトル  ${}^T\vec{v}_1$  と特異値 5 に対応するベクトル  ${}^T\vec{v}_2$  が特異値分解で得られた新たなベクトルである。

$$\begin{pmatrix} {}^T\vec{v}_1 \\ {}^T\vec{v}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (5.31)$$

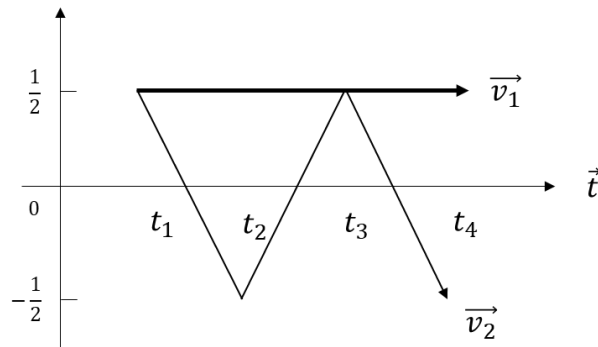


図 5.7 サンプル 1,2 の時間ステップ変化を表す特異ベクトル

ベクトル  ${}^T\vec{v}_1$  は、ベクトル  $\vec{c}_1, \vec{c}_2$  の全体の傾向を表すベクトルだと考えることができる。ベクトル  $\vec{c}_1, \vec{c}_2$  の平均値が一定なので全体の傾向として時間ステップ変化に対し一定ということを示しているベクトルである。ベクトル  ${}^T\vec{v}_2$  は、ベクトル  $\vec{c}_1, \vec{c}_2$  の時間ステップ変化ごとの状態変化率を表すベクトルである。

特異値は、行列  $\mathbf{C}$  による右特異ベクトルの拡大率である。これにより、ベクトル  ${}^T\vec{v}_1$  に特異値 10、ベクトル  ${}^T\vec{v}_2$  に特異値 5 をかけると、軸変換した行列  $\mathbf{C}'$  を得ることができる。

$$\mathbf{C}' = \begin{pmatrix} 10 \times {}^T\vec{v}_1 \\ 5 \times {}^T\vec{v}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & 5 & 5 & 5 \\ 5 & -5 & 5 & -5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{c}'_1 \\ \vec{c}'_2 \end{pmatrix} \quad (5.32)$$

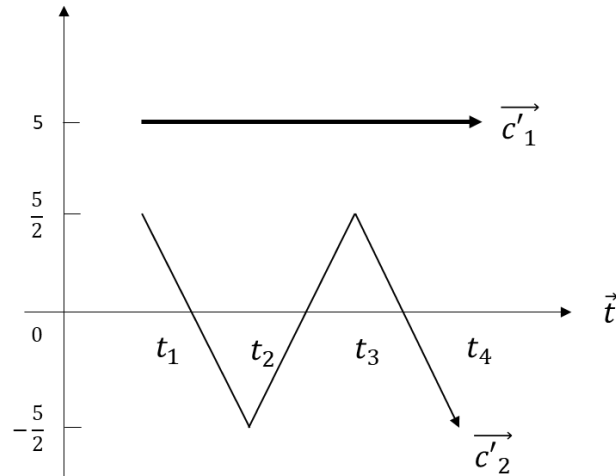


図 5.8 サンプル 1,2 の時間ステップ変化 (行列  $\mathbf{C}'$ )

(5.29)式より、ベクトル  $\vec{c}'_1$  と  $\vec{c}'_2$  の行列  $\mathbf{C}'$  に対する寄与率が与えられる。

表 5.3 右特異ベクトルの寄与率

特異ベクトル	寄与率 [%]
$\vec{c}'_1$	80
$\vec{c}'_2$	20

上記の流れをまとめると、行列  $\mathbf{C}$  を表現する寄与が等しく与えられているベクトルを、特異値分解により変換し、一方のベクトルの寄与率をできるだけ大きくすることができる。

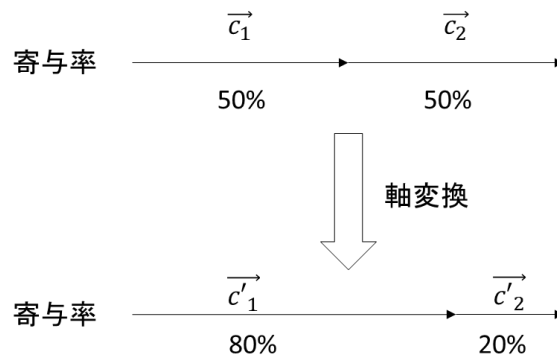


図 5.9 特異値分解による軸変換の行列  $\mathbf{C}$  に対する寄与率の変化

右特異ベクトルは正規直交基底なので、2乗ノルムは規格化されている。よって、新しく軸を取ったベクトルの寄与率は特異値のみで計算され次式のように与えることができる。なお、特異値の2乗( $\sigma_k^2$ )は、 $k$ 番目の特異値に対応する特異ベクトル方向の分散を表している。従って、 $\sum_{i=1}^m \sigma_i^2$ はデータの全分散を表しており、寄与率は、データの全分散に対する  $k$ 番目の特異値に対応する特異ベクトル方向の分散の割合を表していることになる。

$$(\text{各特異ベクトルの第}k\text{番目の直交基底の寄与率}) = \frac{\sigma_k^2}{\sum_{i=1}^m \sigma_i^2} \quad (5.33)$$

$$(\text{各特異ベクトルの第}k\text{番目までの直交基底の累積寄与率}) = \frac{\sum_{i=1}^k \sigma_i^2}{\sum_{i=1}^m \sigma_i^2} \quad (5.34)$$

### 5.3 低ランク近似

前節の特異値分解で説明した通り、右特異ベクトルと左特異ベクトルの直交基底は行列  $\mathbf{A}$  の寄与率が大きい順に並べられている。つまり、寄与率の小さい直交成分は無視しても行列  $\mathbf{A}$  のデータ損失は小さいと考えられる。このように、寄与率の小さい直交成分を無視する技術は、画像データ圧縮にも使われるものである。

特異値分解後の式を詳細にみると以下のようにになっている。 $\text{rank}\mathbf{A} = m$  とする。 $(m < t$  の時)

$$\mathbf{A} = (\vec{u}_1, \vec{u}_2, \dots, \vec{u}_m) \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & 0 & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \sigma_m & 0 \end{pmatrix}^T (\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_t) \quad (5.35)$$

ここで、行列  $\mathbf{A}$  のデータを特異値  $k$  個 ( $k \leq m$ ) まででおおよそ再現できると仮定すると行列  $\mathbf{A}$  は以下のように近似できる。特異値は、 $k \times k$  の正方行列とする。

$$\mathbf{A}' = (\vec{u}_1, \vec{u}_2, \dots, \vec{u}_k) \begin{pmatrix} \sigma_1 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \sigma_k \end{pmatrix}^T (\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_k) \quad (5.36)$$

$m \geq t$  の時も同様に近似できる。

具体例として(5.26)式の行列  $\mathbf{B}$  に対して低ランク近似を実施する。特異値の成分 100 に対して 1 は十分小さいと考えて低ランク近似を実施し、行列  $\mathbf{B}'$  を計算する。

$$\mathbf{B}' = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 100 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 10 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (5.37)$$

(5.37)式の左特異ベクトル 3 列目及び右特異ベクトル 3、4 行目のベクトルは無視できる。

$$\mathbf{B}' = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 100 & 0 \\ 0 & 10 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (5.38)$$

$$\mathbf{B}' = \begin{pmatrix} \frac{50}{4} & \frac{50}{4} & \frac{50}{4} & \frac{50}{4} \\ \frac{10\sqrt{2}}{4} & -\frac{10\sqrt{2}}{4} & \frac{10\sqrt{2}}{4} & -\frac{10\sqrt{2}}{4} \\ \frac{10\sqrt{2}}{4} & \frac{10\sqrt{2}}{4} & -\frac{10\sqrt{2}}{4} & \frac{10\sqrt{2}}{4} \\ -\frac{10\sqrt{2}}{4} & \frac{10\sqrt{2}}{4} & -\frac{10\sqrt{2}}{4} & \frac{10\sqrt{2}}{4} \end{pmatrix} \quad (5.39)$$

$$\approx \begin{pmatrix} \frac{50}{4} & \frac{50}{4} & \frac{50}{4} & \frac{50}{4} \\ \frac{11\sqrt{2}}{4} & -\frac{9\sqrt{2}}{4} & \frac{9\sqrt{2}}{4} & -\frac{11\sqrt{2}}{4} \\ \frac{9\sqrt{2}}{4} & \frac{11\sqrt{2}}{4} & -\frac{11\sqrt{2}}{4} & \frac{9\sqrt{2}}{4} \\ -\frac{9\sqrt{2}}{4} & \frac{11\sqrt{2}}{4} & -\frac{11\sqrt{2}}{4} & \frac{9\sqrt{2}}{4} \end{pmatrix} = \mathbf{B}$$

データ損失は多少あるが(5.26)式の行列 $\mathbf{B}$ を概ね再現することができる。

さらに、特異値の成分 10 も落としてみる。

$$\mathbf{B}'' = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 100 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (5.40)$$

(5.40)式の左特異ベクトル 2、3 列目及び右特異ベクトル 2、3、4 行目のベクトルは無視できる。

$$\mathbf{B}'' = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} (100) \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (5.41)$$

$$\mathbf{B}'' = \begin{pmatrix} 50 & 50 & 50 & 50 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.42)$$

これより、最も大きな成分は保存されているが、それより小さな成分が失われている。この結果から分かる通り、低ランク近似の度合いが大きいほど、行列 $\mathbf{B}$ のデータ損失は大きくなる。

(5.33)式を使うと直交基底の寄与率を求めることができる。

表 5.4 各特異値に対応する直交基底の寄与率

特異値	特異値に対応する直交基底の寄与率 [%]
100	99.0001
10	0.9900
1	0.0099

## 6.出力データの次元削減とシミュレーションの簡略化

本章では、シミュレーションで得られた出力データの次元削減方法と、次元削減したデータを用いたシミュレーションの簡略化(surrogate model の作成)について説明を行う。一般的なシミュレーションの流れは、入力データ→シミュレーション→出力データであるが、説明のしやすさの観点から、まず出力データの次元削減とシミュレーションの簡略化について説明する。入力データの次元削減は、次章にて説明する。

### 6.1 例 1:水の加熱

本節では、低ランク近似を用い、簡単なシミュレーション例について、計算結果の次元削減を行う。また、次元削減した計算結果と入力データ(この例では水の重さ)との相関を用いることで、surrogate model の作成を行う。

やかんに水(初期温度  $T_0 = 20\text{ }^\circ\text{C}$ )を注いで加熱させる場合を考える。加熱時間を320秒として、温度変化を80秒ごと観測する。注いだ水の重さを  $m = 1\text{kg}$ 、 $1.5\text{kg}$ 、 $2\text{kg}$  とする。また、水の比熱を  $C = 4\text{ kJ/kg/}^\circ\text{C}$ 、ガスコンロの仕事量を  $Q = 1\text{ kW}$  として仕事量はすべて水の温度上昇に消費されると仮定する。

温度を計算する理論式は以下のようなになる。

$$T = T_0 + \frac{Q \times t}{C \times m} \quad (6.1)$$

t : 時間 [s]

T : t 秒後の水の温度 [ $^\circ\text{C}$ ]

この時の水の温度変化の時系列データは以下の表にまとめることができる。

表 6.1 各水の質量における水の温度変化

水の質量[kg]	時間[s]	0	80	160	240	320
1	水の温度変化[°C]	20	40	60	80	100
1.5		20	33.3	46.6	60	73.3
2		20	30	40	50	60

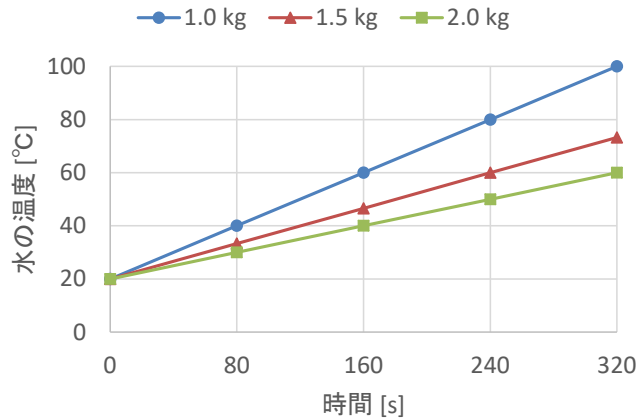


図 6.1 水の温度変化

例えば、水1.2kgの時の温度変化を計算する方法を考える。一般的には、比熱と質量と熱量を使って理論式(6.1)から求める。ここでは、温度変化を計算する別のアプローチとしてROMの理論を用いてみる。

表 6.1 を行列Cに変換すると以下のようなになる<sup>2</sup>。

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 20 & 40 & 60 & 80 & 100 \\ 20 & 33.3 & 46.6 & 60 & 73.3 \\ 20 & 30 & 40 & 50 & 60 \end{pmatrix} \quad (6.2)$$

この行列Cに対して特異値分解 $\mathbf{C} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}^T\mathbf{V}$ を施すと特異値は以下のようなになる。

$$\mathbf{\Sigma} = \begin{pmatrix} 208.763 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 8.44417 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0439405 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.3)$$

3行3列目の特異値の成分が十分小さいので無視し、特異値行列を $2 \times 2$ 行列 $\mathbf{\Sigma}'$ で近似する。この場合、小さい特異値(0.0439405)に対応する左特異ベクトル及び右特異ベクトルを無視することになるため、左特異ベクトル $\mathbf{U}$ 及び右特異ベクトル $^T\mathbf{V}$ は以下のように近似される。

$$\mathbf{U}' = (\vec{u}_1 \quad \vec{u}_2) = \begin{pmatrix} -0.710001 & 0.651234 \\ -0.538726 & -0.257268 \\ -0.453512 & -0.713938 \end{pmatrix} \quad (6.4)$$

<sup>2</sup> この例では、3系列のデータ列(それぞれ5点のデータを含む)を行方向に並べているが、列方向に並べることも出来る。その場合、特異値分解で得られる右特異ベクトルと左特異ベクトルの役割が入れ替わることに留意。ROM関係の文献を読む際には、データ列がどのように並べられているか、最初に確認しておくが良い。

$$\begin{aligned} {}^T\mathbf{V}' &= \begin{pmatrix} {}^T\vec{v}_1 \\ {}^T\vec{v}_2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -0.163079 & -0.287143 & -0.411208 & -0.535532 & -0.659597 \\ -0.757855 & -0.4661 & -0.174345 & 0.114363 & 0.406118 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (6.5)$$

近似された特異値行列 $\Sigma'$ 、左特異ベクトル $\mathbf{U}'$ 及び右特異ベクトル ${}^T\mathbf{V}'$ を用いると、 $\mathbf{C} \approx \mathbf{C}' = \mathbf{U}'\Sigma'{}^T\mathbf{V}'$ となる。

(6.5)式に示された右特異ベクトルをプロットすると、図 6.2 となる。図 6.1 に示された水温の上昇の時間変化の形は、図 6.2 に示された右特異ベクトルの重ね合わせ(重みをつけた後、足し合わせる)で表現できることを示している。例えば、 $v_1({}^T\vec{v}_1)$ の重みを大きくして、 $v_2({}^T\vec{v}_2)$ と足し合わせると、水温の上昇が緩やかになり、これは水の質量が大きくなることに相当する。

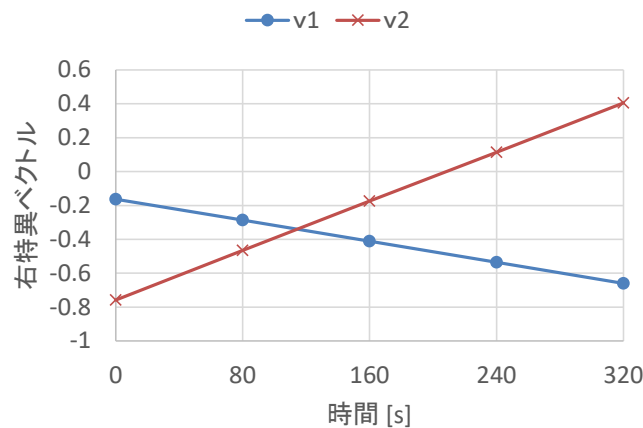
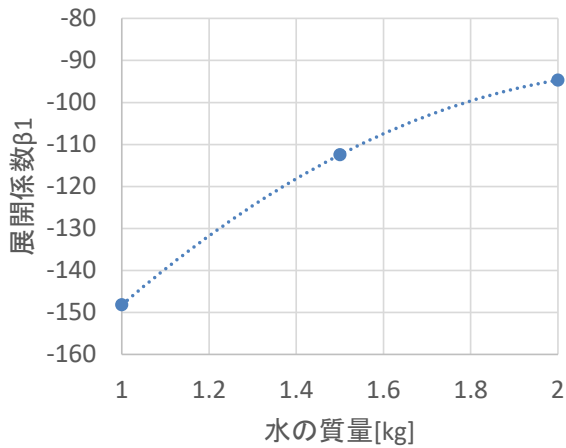


図 6.2 (6.5)式に示す右特異ベクトルの形

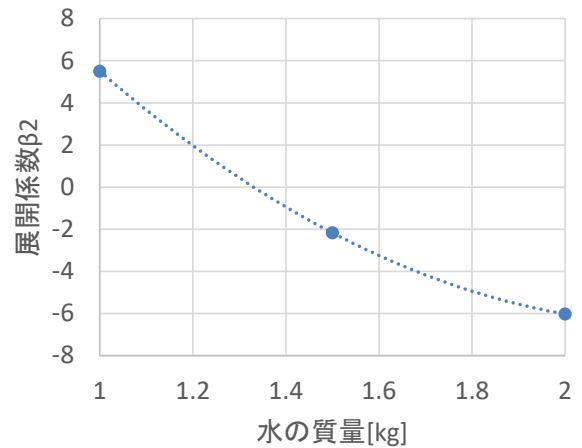
ここで、 $\mathbf{C}' = \mathbf{U}'\Sigma'{}^T\mathbf{V}'$ であることから、 $\mathbf{U}'\Sigma'$ は、 $\mathbf{C}'$ 、すなわち水温の時間変化を右特異ベクトル ${}^T\mathbf{V}'$ で展開した場合の展開係数であるとみることが出来る。この展開係数は左特異ベクトルと特異値を用いて以下のように表される。

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\beta} = (\vec{\beta}_1 \quad \vec{\beta}_2) &= \begin{pmatrix} -0.710001 & 0.651234 \\ -0.538726 & -0.257268 \\ -0.453512 & -0.713938 \\ -148.222 & 5.49912 \\ -112.466 & -2.17241 \\ -94.6766 & -6.02861 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 208.763 & 0 \\ 0 & 8.44417 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -148.222 & 5.49912 \\ -112.466 & -2.17241 \\ -94.6766 & -6.02861 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (6.6)$$

入力パラメータである水の質量と、この展開係数の相関を観察してみる。



展開係数 $\beta_1$



展開係数 $\beta_2$

図 6.3 展開係数の水の質量依存性

$x$ を水の質量とし、図 5.2 の関係を近似曲線で表すと以下ようになる。

$$\beta_1 = -35.933x^2 + 161.345x - 273.634 \quad (6.7)$$

$$\beta_2 = 7.63066x^2 - 34.41971x + 32.28817 \quad (6.8)$$

(6.5)式、(6.7)式、(6.8)式を使えば、水の質量  $1 \leq x \leq 2$  の範囲であれば水の温度変化を瞬時に算出することができる。つまり、サンプルデータの数1kg、1.5kg、2kg の3つから様々な質量の水の温度変化を再現することができる。

求めた展開係数の近似式に水の質量 1.2kg を代入して、対応する右特異ベクトル(6.9)式、 $\beta$  と入力データの関係を示す(6.7)式、(6.8)式を用いて(6.9)式のように $\beta_1^T \vec{v}_1 + \beta_2^T \vec{v}_2$ を計算すると、結果は表 6.2 となる。

$$\begin{aligned} & (-35.933 \times 1.2^2 + 161.345 \times 1.2 - 273.634) \times \\ & (-0.163079 \quad -0.287143 \quad -0.411208 \quad -0.535532 \quad -0.659597) \\ & + (7.63066 \times 1.2^2 - 34.41971 \times 1.2 + 32.28817) \times \\ & (-0.757855 \quad -0.4661 \quad -0.174345 \quad 0.114363 \quad 0.406118) \end{aligned} \quad (6.9)$$

表 6.2 水の質量 1.2kg の時の理論式と ROM の温度変化の比較

時間[s]	水の温度変化[°C]	
	理論式	ROM
0	20	19.99
80	36.6	36.92
160	53.3	53.84
240	70	70.79
320	86.6	87.71





$$\mathbf{U}\boldsymbol{\Sigma}^T\mathbf{V}=\mathbf{m} \left[ \left[ \right] \right] \mathbf{m} \left[ \begin{array}{cccccc} \sigma_1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 & \cdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & 0 & \cdots & \vdots \\ \vdots & \cdots & 0 & \ddots & 0 & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \sigma_m & 0 \end{array} \right] \left[ \left[ \right] \right] \mathbf{t} \quad (6.11)$$

左特異ベクトル $\mathbf{U}$ は $m$ 行 $m$ 列の列直交行列： $\mathbf{U}=(\vec{u}_1, \vec{u}_2, \dots, \vec{u}_m)$

特異値は $m$ 行 $t$ 列： $\boldsymbol{\Sigma}$

$$\text{右特異ベクトルは } t \text{ 行 } t \text{ 列の転置直交行列： } \mathbf{V}=\begin{pmatrix} {}^T\vec{v}_1 \\ {}^T\vec{v}_2 \\ \vdots \\ {}^T\vec{v}_t \end{pmatrix}$$

同一の解析結果は存在しないと仮定するので $\text{rank}\mathbf{A}=m$ 、 $\vec{u}_i$ は $m$ 行 $1$ 列、 ${}^T\vec{v}_i$ は $1$ 行 $t$ 列である。

ここで、低ランク近似を実施し、 $\alpha_{k+1} \cdots \alpha_m (1 \leq k \leq m)$ が $\alpha_1 \cdots \alpha_k$ と比べて小さければ $m-k$ 個の項を無視する近似ができる。

$$\mathbf{U}'\boldsymbol{\Sigma}'^T\mathbf{V}'=\mathbf{m} \left[ \left[ \right] \right] \mathbf{k} \left[ \begin{array}{ccc} \sigma_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \sigma_k \end{array} \right] \left[ \left[ \right] \right] \mathbf{k} \quad (6.12)$$

左特異ベクトル $\mathbf{U}'$ は $m$ 行 $k$ 列の列直交行列： $\mathbf{U}'=(\vec{u}_1, \vec{u}_2, \dots, \vec{u}_k)$

特異値は $k$ 行 $k$ 列： $\boldsymbol{\Sigma}'$

$$\text{右特異ベクトルは } k \text{ 行 } t \text{ 列の転置行直交行列： } \mathbf{V}'=\begin{pmatrix} {}^T\vec{v}_1 \\ {}^T\vec{v}_2 \\ \vdots \\ {}^T\vec{v}_k \end{pmatrix}$$

ただし、 $\text{rank}\mathbf{A}=k$  ( $1 \leq k \ll m$ )、 $\vec{u}_i$ は $m$ 行 $1$ 列、 ${}^T\vec{v}_i$ は $1$ 行 $t$ 列である。

この時、特異値に対応する右特異ベクトルの行成分は時系列データの基底と考えることができる。すると、あるサンプルの時系列データ $\vec{x}$ は右特異ベクトルの基底で展開できる。

$$\vec{x}=\sum_{i=0}^k \beta_i {}^T\vec{v}_i \quad (6.13)$$

基底ベクトル ${}^T\vec{v}_i$ に対応する展開係数： $\beta_i$

(6.13)式における展開係数 $\beta_i$ は、左特異ベクトルと特異値の積から計算できる。展開係数 $\beta_i$ と入力パラメータの相関を用いて、入力パラメータから展開係数 $\beta_i$ の値を推定することによって未知の時系列データを再現することができる。

以上の要点をまとめると、以下のようなになる。

- ①入力パラメータをランダムサンプリングし、シミュレーションコードを用いて計算する。
- ②得られた出力データを行列にまとめる。
- ③その行列に対して特異値分解を用いた低ランク近似を実施する。
- ④左特異ベクトルと特異値の積である展開係数と入力パラメータの相関を用いて ROM を作成する。
- ⑤ROM を用いて未知の入力パラメータの時の出力データを再現することができる。

## 7.入力データの次元削減

本章では、入力データ間の相関及び入力データの感度を用いた次元削減について説明する。

### 7.1 入力データ間の相関を用いた次元削減

本節では、入力データをランダムにサンプリングし、シミュレーションを実施、出力データを統計処理することで、入力データの不確かさが出力データに与える影響を定量評価するランダムサンプリング法を例に取り、入力データ間の相関を用いた次元削減を説明する<sup>3</sup>。

#### 7.1.1 理論

(多変量正規乱数)

ここでは多変量正規乱数について説明する。まず、一変数の正規乱数について考える。平均 0、分散 1(標準偏差 1)の正規分布を標準正規分布と呼び、これを  $N(0,1)$  で表すとすると、任意の正規分布に従う確率変数は  $N(0,1)$  に従う変数を用いて次式で表すことができる。

$$x = \sigma \cdot z + \mu \quad (7.1)$$

ここで、 $\sigma$  は標準偏差、 $\mu$  は平均値である。したがって、何らかの方法により標準正規分布に従う乱数(標準正規乱数)を作成すれば、任意の正規分布  $N(\mu, \sigma^2)$  に従う乱数は(7.1)式の  $z$  に標準正規乱数を代入することによって作成することができる。

次にこれを多変量に拡張する。まず以下の記号を定義する。

$$\vec{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix}, \vec{z} = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \dots \\ z_n \end{bmatrix}, \vec{\mu} = \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \dots \\ \mu_n \end{bmatrix} \quad (7.2)$$

ここで、 $\vec{z}$  を  $n$  次元の各要素( $z_1, z_2, \dots, z_n$ )が独立に標準正規分布  $N(0,1)$  に従う確率変数であるベクトルとする。このとき、ベクトル  $\vec{z}$  の従う確率分布のことを多変量正規分布の中でも特に標準多変量正規分布という。また、 $\vec{\mu}$  の各要素( $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n$ )は定数とする。このとき、標準多変量正規分布に従うベクトル  $\vec{z}$  を任意の行列  $\mathbf{A}$  により一次変換し、定数からなる  $n$  次ベクトル  $\vec{\mu}$  を足すことにより得られるベクトルを  $\vec{x}$  とする。すなわち行列  $\mathbf{A}$  を任意の  $n \times n$  行列とすると、

$$\vec{x} = \mathbf{A}\vec{z} + \vec{\mu} \quad (7.3)$$

と表すことができる。このとき、(7.3)式により得られる確率変数ベクトル  $\vec{x}$  は多変量正規分布に従う。すなわち、ベクトル  $\vec{x}$  の各要素はそれぞれ平均及び分散の異なる正規分布に従う確率変数となる。ここで、例として次のように 2 次元で考える。

$$\vec{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}, \vec{z} = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix}, \vec{\mu} = \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{bmatrix}, \mathbf{A} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \quad (7.4)$$

このとき、(7.4)式の演算を行うと、

<sup>3</sup> 本節は、名古屋大学山本研究室の渡邊友章氏の修論をベースに作成した。

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} az_1 + bz_2 + \mu_1 \\ cz_1 + dz_2 + \mu_2 \end{bmatrix} \quad (7.5)$$

となる。(7.1)式を見ると分かるように、(7.5)式の $x_1$ と $x_2$ は正規分布に従う変数の和になっていることが分かる。そして、互いに独立した正規分布に従う変数の和は正規分布に従うという基本的性質から、 $x_1$ と $x_2$ はともに正規分布に従う変数である。これは一般に $n$ 次元の場合でも成り立ち、ベクトル $\vec{x}_1$ の各要素は全てが正規分布に従う変数となる。

ここで、(7.3)式により得られる多変量正規分布に従うベクトル $\vec{x}_1$ の期待値(平均)と分散(共分散)を調べる。まずベクトル $\vec{x}_1$ の期待値を(7.6)式の記号で表すとする。

$$\mathbf{E}[\vec{x}] = \begin{bmatrix} \mathbf{E}[x_1] \\ \mathbf{E}[x_2] \\ \dots \\ \mathbf{E}[x_n] \end{bmatrix} \quad (7.6)$$

このとき、(7.3)式を用いて、行列 $\mathbf{A}$ およびベクトル $\vec{\mu}$ の各要素が定数であることと、ベクトル $\vec{z}$ の各要素の期待値は0であることに注意すると、 $\mathbf{E}[\vec{x}]$ は次のように変形できる。

$$\begin{aligned} \mathbf{E}[\vec{x}] &= \mathbf{E}[\mathbf{A}\vec{z} + \vec{\mu}] \\ &= \mathbf{E}[\mathbf{A}\vec{z}] + \mathbf{E}[\vec{\mu}] \\ &= \mathbf{A} \cdot \mathbf{E}[\vec{z}] + \vec{\mu} \\ &= \vec{\mu} \end{aligned} \quad (7.7)$$

このように、ベクトル $\vec{x}$ の各要素の期待値は、定数ベクトル $\vec{\mu}$ の各要素と等しいことが分かる。

次に、ベクトル $\vec{x}$ の分散共分散行列を $\mathbf{var}[\vec{x}]$ とする。このとき、 $\mathbf{var}[\vec{x}]$ はその定義から次のように変形することができる。

$$\begin{aligned} \mathbf{var}[\vec{x}] &= \mathbf{E}[(\vec{x} - \mathbf{E}[\vec{x}])(\vec{x} - \mathbf{E}[\vec{x}])^T] \\ &= \mathbf{E}[(\mathbf{A}\vec{z} + \vec{\mu} - \mathbf{E}[\mathbf{A}\vec{z} + \vec{\mu}])(\mathbf{A}\vec{z} + \vec{\mu} - \mathbf{E}[\mathbf{A}\vec{z} + \vec{\mu}])^T] \\ &= \mathbf{E}[(\mathbf{A}\vec{z} + \vec{\mu} - \vec{\mu})(\mathbf{A}\vec{z} + \vec{\mu} - \vec{\mu})^T] \\ &= \mathbf{E}[(\mathbf{A}\vec{z})(\mathbf{A}\vec{z})^T] \\ &= \mathbf{E}[\mathbf{A}\vec{z}\vec{z}^T\mathbf{A}^T] \\ &= \mathbf{A} \cdot \mathbf{E}[\vec{z}\vec{z}^T]\mathbf{A}^T = \mathbf{A} \cdot \mathbf{var}[\vec{z}]\mathbf{A}^T = \mathbf{A}\mathbf{A}^T \end{aligned} \quad (7.8)$$

なお、(7.8)式の変形では、ベクトル $\vec{z}$ の各要素が独立な標準正規分布に従う変数であり、そのためその共分散行列が単位行列になることを用いている。(7.8)式より、ベクトル $\vec{x}$ の共分散行列は行列 $\mathbf{A}$ とその転置行列 $\mathbf{A}^T$ の積の行列となる。

さて、ここで任意の平均値ベクトルを $\vec{\mu}$ 、共分散行列を $\mathbf{\Sigma}$ として、それらを満足する多変量正規分布に従う乱数、すなわち多変量正規乱数を作成することを考える。このとき、(7.1)式に示した一変数の正規乱数の場合と同様に考えると、(7.3)式の $\vec{z}$ の要素に互いに独立な標準正規乱数を代入することで、任意の多変量正規乱数が作成可能である。ただ(7.8)式より、(7.3)式で得られる多変量正規乱数の共分散行列は $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ であるため、任意の共分散行列 $\mathbf{\Sigma}$ を満足する多変量

正規乱数を作成するためには、以下の式を満足する必要がある。

$$\Sigma = \mathbf{A}^T \mathbf{A} \quad (7.9)$$

したがって、(7.3)式の演算を行うためには、共分散行列 $\Sigma$ から(7.9)式を満たす行列 $\mathbf{A}$ を求める必要がある。

以上より、多変量正規乱数に基づいたランダムサンプリングを実施するには、基本的には(7.3)式を用いればよいが、そのためには(7.9)式を満たす行列 $\mathbf{A}$ を求める必要がある。その方法はいくつか存在するが、特異値分解を用いることができる。

(特異値分解の適用)

ここでは、多変量正規乱数に基づくランダムサンプリングを実施するために用いた特異値分解法について改めて説明する。

行列 $\Sigma$ を任意の $n \times p$ 行列としたとき、次式で表される行列の分解を特異値分解という。

$$\Sigma = \mathbf{U} \mathbf{S}^T \mathbf{V} \quad (7.10)$$

ここで $\mathbf{U}$ は行列 $\Sigma$ の左特異ベクトルを列に持つ $n \times n$ 行列、 $\mathbf{S}$ は対角成分に行列 $\Sigma$ の特異値を持ち、非対角成分が0の $n \times p$ 行列、 $\mathbf{V}^T$ は行列 $\Sigma$ の右特異ベクトルを行に持つ $p \times p$ 行列である。ここで、特異値および特異ベクトルは次のように言い換えることができる。

行列 $\Sigma$ の非零特異値  $\Leftrightarrow$  行列 $\Sigma^T \Sigma$ (または $\Sigma \Sigma^T$ )の固有値の平方根

行列 $\Sigma$ の左特異ベクトル  $\Leftrightarrow$  行列 $\Sigma^T \Sigma$ の固有ベクトル

行列 $\Sigma$ の右特異ベクトル  $\Leftrightarrow$  行列 $\Sigma \Sigma^T$ の固有ベクトル

したがって、特異値分解とは、ある行列をその特異値および特異ベクトルから成る行列に分解する手法であり、言い換えると、ある行列 $\Sigma$ を行列 $\Sigma^T \Sigma$ 及び $\Sigma \Sigma^T$ の固有値と固有ベクトルから成る行列に分解する手法である。一般に(7.10)式の行列 $\mathbf{S}$ の対角成分の特異値は大きい順に並べられ、それに伴い、 $\mathbf{U}$ と $\mathbf{V}$ の特異ベクトルも特異値に対応した順に並べられる。また、特異ベクトル(固有ベクトル)の直交性から、 $\mathbf{U}$ と $\mathbf{V}$ はどちらもユニタリ行列であり、以下の式が成り立つ。

$$\mathbf{U}^T \mathbf{U} = \mathbf{I} \quad (7.11)$$

$$\mathbf{V}^T \mathbf{V} = \mathbf{I} \quad (7.12)$$

ここで、 $\mathbf{I}$ は単位行列を表す。

以上は特異値分解に関する一般的な説明であり、ここからは本研究での利用方法に焦点を当てる。まず上記の説明において、任意の行列 $\Sigma$ が共分散行列の場合を考える。このとき、行列 $\Sigma$ は共分散行列の性質である対称行列( $\Sigma = \Sigma^T$ )となり、以下が成り立つ。

$$\Sigma^T \Sigma = \Sigma \Sigma \quad (7.13)$$

この性質により行列 $\Sigma$ の左特異ベクトルと右特異ベクトルは一致し、それにより行列 $\mathbf{U}$ と行列 $\mathbf{V}$ は等しくなる。したがって、行列 $\Sigma$ が共分散行列のとき、(7.10)式は次式のように書き直すこと

ができる。

$$\Sigma = \mathbf{U} \mathbf{S}^T \mathbf{U} \quad (7.14)$$

また、行列 $\mathbf{S}$ は行列 $\Sigma$ の特異値を対角に持つ対角行列であり、特異値は行列 $\Sigma \Sigma^T$ (または $\Sigma^T \Sigma$ )の固有値の平方根であるという性質から、行列 $\mathbf{S}$ の対角成分はすべて非負である。ここで、行列 $\Sigma$ の特異値の平方根を対角にもつ対角行列を $\mathbf{S}_2^1$ とすると、(7.14)式は次のように変形できる。

$$\Sigma = \mathbf{U} \mathbf{S}^T \mathbf{U} = \mathbf{U} \mathbf{S}_2^1 \mathbf{S}_2^1{}^T \mathbf{U} = \left( \mathbf{U} \mathbf{S}_2^1 \right) \left( \mathbf{S}_2^1{}^T \mathbf{U} \right) = \left( \mathbf{U} \mathbf{S}_2^1 \right)^T \left( \mathbf{S}_2^1 \mathbf{U} \right) = \mathbf{A}^T \mathbf{A} \quad (7.15)$$

なお、

$$\mathbf{A} = \mathbf{U} \mathbf{S}_2^1 \quad (7.16)$$

である。(7.15)式は(7.9)式と同じ形となっており、そして行列 $\mathbf{A}$ は(7.16)式で表される。つまり、共分散行列に対して特異値分解を行うことによって行列 $\mathbf{A}$ を求めることができる。

行列 $\mathbf{S}$ の対角成分は共分散行列 $\Sigma$ を構成するデータに対して特殊な意味を持つ。共分散行列 $\Sigma$ に従うデータ点をランダムサンプリングし、プロットすると、ある広がりを持つ「雲」の様なデータ点の集合を作ることが出来る。この「雲」(データ点の集合)は様々な方向に広がりを持つことになる。ここで、行列 $\mathbf{U}$ の*i*列目のデータからなる特異ベクトルを考える。このとき、この特異ベクトルの方向に対する「雲」の広がりが行列 $\mathbf{S}$ の*i*番目の対角成分に対応している。具体的には、特異ベクトル方向におけるデータ点の集合の分散が行列 $\mathbf{S}$ の*i*番目の対角成分に、標準偏差が行列 $\mathbf{S}_2^1$ の*i*番目の対角成分に対応する。この点については、7.1.2節で具体例を用いて説明する。

最終的に、(7.16)式を(7.3)式に代入することで、次式を用いて多変量正規乱数に基づくランダムサンプリングが実施可能である。

$$\vec{x} = \mathbf{U} \mathbf{S}_2^1 \vec{z} + \vec{\mu} \quad (7.17)$$

先に説明したように、行列 $\mathbf{S}_2^1$ の*i*番目の対角要素は、行列 $\mathbf{U}$ の*i*列目のデータからなる特異ベクトル方向の分散(ばらつき)を示している。従って、行列 $\mathbf{S}_2^1$ の*i*番目の対角要素が十分に小さければ、対応する方向への摂動(ランダムサンプリング)は行う必要がない。特異値分解を行った場合の特異値は、降順に並んでいることから、例えば*i*番目の対角要素が十分に小さければ、それ以降の特異値は考慮する必要が無い。言い換えると、最初から*i*-1番目の方向についてのみ、ランダムサンプリングを行えば良いことになる。つまり、*i*番目以降のデータ(次元)を削減することが出来る。

なお、本研究では特異値分解を用いたが、(7.15)式の分解の方法は一意ではない。すなわち、(7.15)式を満たす行列 $\mathbf{A}$ は他の分解方法によっても計算可能である。例えば、コレスキー分解という行列分解法を用いることもできる。

### 7.1.2 具体例

ここでは、特異値分解を用いたランダムサンプリング法について、具体例を用いて考察する。簡単のため 2 次元のパラメータを考える。平均値ベクトル  $\bar{\mu}$  は無視して(7.17)式を展開すると、次式のように書ける。

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = [\bar{u}_1 \quad \bar{u}_2] \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & \sigma_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = [\sigma_1 \bar{u}_1 \quad \sigma_2 \bar{u}_2] \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \sigma_1 z_1 \bar{u}_1 + \sigma_2 z_2 \bar{u}_2 \quad (7.18)$$

ここで、 $\bar{u}_1$  及び  $\bar{u}_2$  が共分散行列  $\Sigma$  の特異ベクトルで、 $\sigma_1^2$  及び  $\sigma_2^2$  が共分散行列  $\Sigma$  の特異値である。(7.18)式を見ると、ランダムサンプリングにより得られる変数ベクトル  $\vec{x}$  は、特異ベクトルの線形和で表されることが分かる。つまり、ベクトル  $\vec{x}$  の向きは特異ベクトルの方向の足し合わせによって決定する。また、特異値の平方根である  $\sigma_1$  と  $\sigma_2$  も同様に  $\bar{u}_1$  と  $\bar{u}_2$  それぞれに掛かっているが、これらは各方向の固有のばらつきの度合いを表しており、特異値の平方根はそれに対応する特異ベクトルの標準偏差に相当していると考えられる(特異値が分散に相当する)。以上をまとめると、以下のようになる。

- 特異ベクトル: ランダムサンプリングで与えられるばらつきの向きを決定する。
- 特異値: 各ばらつきの向き(特異ベクトル)のばらつきの固有の大きさ(変動量の平均)を決定する。

そして、標準正規乱数  $z_1$  がベクトル  $\bar{u}_1$  に掛かり、 $z_2$  はベクトル  $\bar{u}_2$  に掛かっていることから、標準正規乱数ベクトル  $\vec{z}$  は各特異ベクトルの向きの変動量を決定しているといえる。

次に、以上の性質を簡単な例によって確認する。以下の二つの共分散行列をそれぞれ与えてランダムサンプリングを実施した。

$$\Sigma_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0.8 \\ 0.8 & 1 \end{bmatrix}, \Sigma_2 = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 4 \end{bmatrix} \quad (7.19)$$

$\Sigma_1$  は共分散(非対角成分)が正であるため正の相関があるケースで、 $\Sigma_2$  は逆に負の相関があるケースである。このときの  $\Sigma_1$  及び  $\Sigma_2$  の特異値分解の結果として得られる特異ベクトル行列  $\mathbf{U}_1$  及び  $\mathbf{U}_2$  と特異値行列  $\mathbf{S}_1$  及び  $\mathbf{S}_2$  を示す。

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_1 &= \begin{bmatrix} 0.71 & -0.71 \\ 0.71 & 0.71 \end{bmatrix}, \mathbf{S}_1 = \begin{bmatrix} 1.80 & 0.00 \\ 0.00 & 0.20 \end{bmatrix} \\ \mathbf{U}_2 &= \begin{bmatrix} -0.53 & 0.85 \\ 0.85 & 0.53 \end{bmatrix}, \mathbf{S}_2 = \begin{bmatrix} 2.60 & 0.00 \\ 0.00 & 0.38 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (7.20)$$

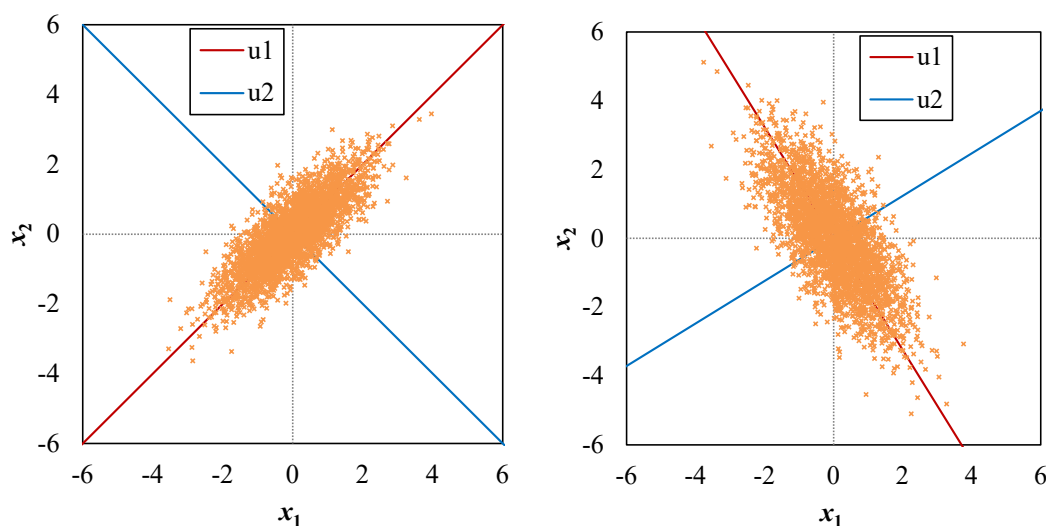
それぞれの共分散行列を用いて、(7.17)式によりサンプル数 3000(標準正規乱数ベクトル  $\mathbf{z}$  を 3000 個作成)としてランダムサンプリングをおこなったときの  $\vec{x}$  の散布図を図 7.1 に示す。なお、標準正規乱数はプログラミング言語やアプリケーションによっては初めから実装されていることもあるが、本研究では Box-Muller 法という方法により一様乱数を正規乱数へ変換している。

図 7.1 において、プロットがサンプリングで得られた各サンプル点の位置を表しており、図内に引かれた直線  $u_1$  及び  $u_2$  はそれぞれ特異ベクトル  $\bar{u}_1$  及び  $\bar{u}_2$  の向きを表している。図 7.1 よ



り、サンプル点は楕円形に集中しており、これは  $x_1$  と  $x_2$  に相関が与えられていることを意味している。そして、サンプル点の最もばらつき(分散)が大きい方向が  $\vec{u}_1$  となっており、 $\vec{u}_2$  はそれに直交する向きとなっている。これは、大きな特異値に対応する特異ベクトルの向きほどその向きのばらつきが大きいという、前述の性質を示している。より具体的に言うと、 $\Sigma_1$  の場合、 $\vec{u}_1 = (0.71, 0.71)$  方向のデータの分散が 1.80 であり、 $\vec{u}_2 = (0.71, -0.71)$  方向のデータの分散が 0.20 である。それぞれに対応する標準偏差は、 $\sqrt{1.8} \approx 1.34, \sqrt{0.2} \approx 0.45$  となり、これがデータのばらつきを示している。

また、特異ベクトルが直交しているのも重要な性質である。これにより、特異値分解によるランダムサンプリングでは、まず相関を無視できる方向への座標の変換が行われ、その方向に対して独立にサンプリングが行われる。ここでは2次元の場合を考えたが、これは多次元の場合でも以上の性質は同様であり、特異値の大きい順に対応して、特異ベクトルが直交かつ分散の大きい方向を表すこととなる。



(a)  $\Sigma_1$  の場合

(b)  $\Sigma_2$  の場合

図 7.1 ランダムサンプリングの結果と特異ベクトル

## 7.2 入力データの感度係数を用いた次元削減

### 7.2.1 概要

本節では、感度解析を例にとり、入力データの次元削減について、説明する<sup>4</sup>。具体的には、ROM の考え方を感度係数評価に適用することで、感度係数評価におけるモデルを単純化(低次元化)し、少ない解析数で近似的な感度係数を評価する手法について解説する<sup>5,6</sup>。

<sup>4</sup> 本節の説明は、名古屋大学山本研究室の横井公洋氏の研究会資料をベースとして作成したものである。

<sup>5</sup> Y. Bang, H. Abdel-Khalik, M. Jessee, et al. "Hybrid reduced order modeling for assembly calculations," Nucl. Eng. Des., 295, pp. 661–666, (2015).

<sup>6</sup> R. Katano, T. Endo, A. Yamamoto, et al., " Estimation of sensitivity coefficients of core characteristics based on reduced-order modeling using sensitivity matrix of assembly characteristics," J. Nucl. Sci.

$m$  種類の核反応( $m$  箇所の放射化量) $\vec{R} = {}^T(R_1, \dots, R_m)$ と  $n$  種類の巨視的核反応断面積 $\vec{\Sigma} = {}^T(\Sigma_1, \dots, \Sigma_n)$ について、 $j$  番目の巨視的核反応断面積に対する  $i$  番目の放射化量の感度係数 $G_{ij}$ を  $i$  行  $j$  列の要素を持つ  $m$  行  $n$  列の感度係数行列 $\mathbf{G}(R \leftarrow \Sigma)$ を用いることにより、放射化量の変化量は次の(7.21)式のように表すことができる。

$$\Delta \vec{R} = \mathbf{G}(R \leftarrow \Sigma) \Delta \vec{\Sigma} \quad (7.21)$$

ここで、式中的変数は以下のものを示す。

$\Delta \vec{R}$ : 放射化量の変動ベクトル、 $\Delta \vec{\Sigma}$ : 巨視的核反応断面積の変動ベクトル

$$\mathbf{G}(R \leftarrow \Sigma) = \begin{pmatrix} G_{11} & \cdots & G_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ G_{m1} & \cdots & G_{mn} \end{pmatrix} \quad (7.22)$$

具体的な例として、巨視的核反応断面積が 3 種、放射化量が 5 種の場合における 5 つの感度係数ベクトル $\vec{g}_{R_1} = (\frac{\partial R_1}{\partial \Sigma_1}, \frac{\partial R_1}{\partial \Sigma_2}, \frac{\partial R_1}{\partial \Sigma_3})$ 、 $\vec{g}_{R_2} = (\frac{\partial R_2}{\partial \Sigma_1}, \frac{\partial R_2}{\partial \Sigma_2}, \frac{\partial R_2}{\partial \Sigma_3})$ 、 $\vec{g}_{R_3} = (\frac{\partial R_3}{\partial \Sigma_1}, \frac{\partial R_3}{\partial \Sigma_2}, \frac{\partial R_3}{\partial \Sigma_3})$ 、 $\vec{g}_{R_4} = (\frac{\partial R_4}{\partial \Sigma_1}, \frac{\partial R_4}{\partial \Sigma_2}, \frac{\partial R_4}{\partial \Sigma_3})$ 、 $\vec{g}_{R_5} = (\frac{\partial R_5}{\partial \Sigma_1}, \frac{\partial R_5}{\partial \Sigma_2}, \frac{\partial R_5}{\partial \Sigma_3})$ について考え、ROM のイメージについて説明する。図 7.2 が 5 つの感度係数ベクトルを図示したものである。

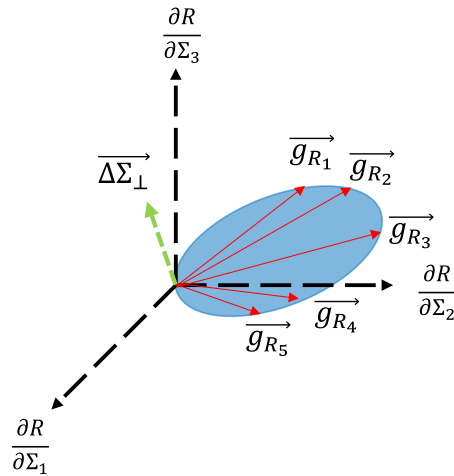


図 7.2 5 つの感度係数ベクトルのイメージ

仮に、5 つの感度係数ベクトルが青色の領域で示した 2 次元平面上におおよそ存在しているとすると、その 2 次元平面に直交する方向へ入力パラメータを摂動させても、感度係数との内積がほぼ 0 となるため、核特性量の変化は微小となる。感度解析は、出力パラメータに対する入力パラメータの感度が大きいものを特定することを目的としているため、核特性量の変化が微小である方向へ入力データを摂動させても感度係数の評価には意味が無い。そのため、この場合、入力データ(巨視的核反応断面積)は図 7.3 で示されるような 2 次元平面上の直

交座標 $x_1, x_2$ の方向に摂動させるべきである。

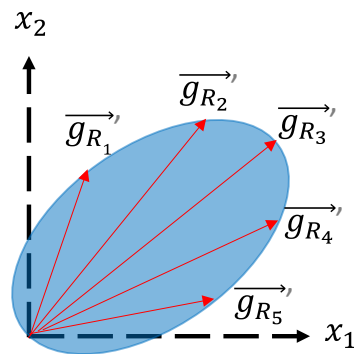


図 7.3 2次元平面上の直交座標 $x_1, x_2$

図 7.3 の $\overrightarrow{g_{R_1}'}, \overrightarrow{g_{R_2}'}, \overrightarrow{g_{R_3}'}, \overrightarrow{g_{R_4}'}, \overrightarrow{g_{R_5}'}$ は、新たな直交座標 $x_1, x_2$ を用いて、3次元座標系における $\overrightarrow{g_{R_1}}, \overrightarrow{g_{R_2}}, \overrightarrow{g_{R_3}}, \overrightarrow{g_{R_4}}, \overrightarrow{g_{R_5}}$ を表したものである。2次元平面上の任意の感度係数ベクトルは $x_1, x_2$ 方向への2回の摂動計算により評価することができる。従って、 $\overrightarrow{g_{R_1}'}, \overrightarrow{g_{R_2}'}, \overrightarrow{g_{R_3}'}, \overrightarrow{g_{R_4}'}, \overrightarrow{g_{R_5}'}$ はいずれも $x_1, x_2$ 方向への2回の摂動計算により評価することができる。その後、図 6.3 のように2次元平面上における感度係数ベクトル $\overrightarrow{g_{R_1}'}, \overrightarrow{g_{R_2}'}, \overrightarrow{g_{R_3}'}, \overrightarrow{g_{R_4}'}, \overrightarrow{g_{R_5}'}$ を元の3次元座標系に座標変換することで、感度係数ベクトル $\overrightarrow{g_{R_1}}, \overrightarrow{g_{R_2}}, \overrightarrow{g_{R_3}}, \overrightarrow{g_{R_4}}, \overrightarrow{g_{R_5}}$ を評価することができる。なお、感度係数ベクトル $\overrightarrow{g_{R_1}}, \overrightarrow{g_{R_2}}, \overrightarrow{g_{R_3}}, \overrightarrow{g_{R_4}}, \overrightarrow{g_{R_5}}$ のうち、2次元平面に直交する成分は、この手法では考慮できず(無視され)、最終的には、感度係数ベクトルの誤差となる。

摂動方向 $x_1, x_2$ がわかっている場合、2回の摂動計算で感度係数を評価することができる。ただし、上述の2次元平面(以後、Active Subspace、AS と呼ぶ)というのは、もともと感度係数ベクトル $\overrightarrow{g_{R_1}}, \overrightarrow{g_{R_2}}, \overrightarrow{g_{R_3}}, \overrightarrow{g_{R_4}}, \overrightarrow{g_{R_5}}$ が分かっていると算出できない。すなわち、ROM を用いて低コストで感度係数を評価するためには、目的とする感度係数ベクトルを評価しなければならないという自己撞着に陥る。そこで、一般的には、比較的低計算コストで実施できる簡易モデル等から、近似的な AS を構築する。

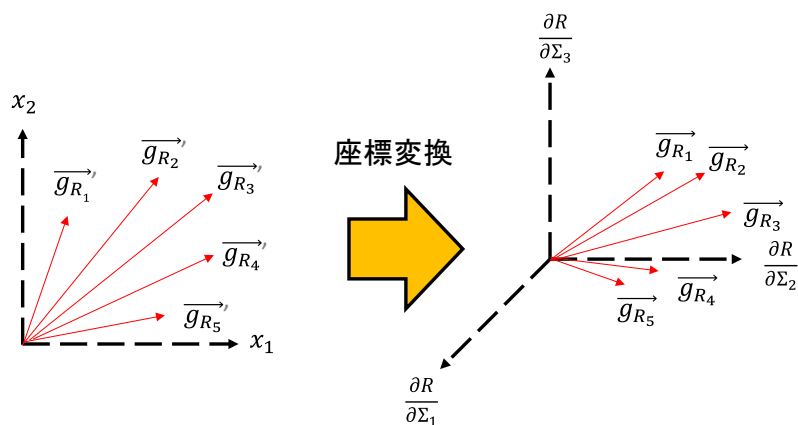


図 7.4 座標変換のイメージ図

一般的な核特性解析においては、入出力パラメータ共に例題よりもはるかに次元が多いが、ROM の考え方は次元が増えても同じである。本例題における計算コストとしては、全種類の

核特性量について感度係数を評価しようとする、直接法では3回、摂動論では4回、ROMでは2回の摂動計算+ASの構築のための計算を実施することとなる。ASの構築を低計算コストで実施することができれば、放射化解析へROMを適用することにより、感度解析の計算コストを低減させることが期待できる。

## 7.2.2 理論

本節ではROMを作成するための具体的な理論について述べる。核特性量の感度係数ベクトルの厳密なASは、(7.22)式で示される感度係数 $\mathbf{G}(R \leftarrow \Sigma)$ を特異値分解することにより評価できる。

$$\mathbf{G}(R \leftarrow \Sigma) = \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{V}^T \quad (7.23)$$

ここで、

$\mathbf{U}$ :  $m$  行  $m$  列の正規直交行列

$\mathbf{D}$ :  $m$  行  $n$  列の $\mathbf{G}(R \leftarrow \Sigma)$ の特異値を対角成分に持つ対角行列

$\mathbf{V}$ :  $n$  行  $n$  列の正規直交行列

特異値分解で得られた $\mathbf{V}$ の縦ベクトルがASの正規直交基底に該当する。この基底方向への入力データの摂動 $\Delta\vec{\Sigma}$ は、その方向への摂動量を成分としたベクトル $\Delta\vec{\alpha}$ を用いて、(7.24)式のようにあらわすことができる。

$$\begin{aligned} \Delta\vec{\Sigma} &= \begin{pmatrix} \Delta\Sigma_1 \\ \Delta\Sigma_2 \\ \dots \\ \Delta\Sigma_n \end{pmatrix} = \Delta\alpha_1 \vec{v}_1 + \Delta\alpha_2 \vec{v}_2 + \dots + \Delta\alpha_k \vec{v}_k \\ &= (\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_k) \begin{pmatrix} \Delta\alpha_1 \\ \Delta\alpha_2 \\ \dots \\ \Delta\alpha_k \end{pmatrix} = \mathbf{V}\Delta\vec{\alpha} \end{aligned} \quad (7.24)$$

(7.23)式、(7.24)式を用いることで、放射化量の変動ベクトル $\Delta\vec{R}$ は次のように変形することができる。ただし、 $\mathbf{V}\mathbf{V}^T = \mathbf{E}$ であることを使用した( $\mathbf{E}$ は単位行列)。

$$\begin{aligned} \Delta\vec{R} &= \mathbf{G}(R \leftarrow \Sigma)\Delta\vec{\Sigma} \\ &= \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{V}^T\mathbf{V}\Delta\vec{\Sigma} \\ &= \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{V}\mathbf{V}^T\Delta\vec{\alpha} \\ &= \mathbf{U}\mathbf{D}\Delta\vec{\alpha} \end{aligned} \quad (7.25)$$

ここで、対角行列 $\mathbf{D}$ について特異値が相対的に大きい上から $r$ 個までの成分を残し、それ以外の相対的に十分小さな特異値の成分を0とした対角行列 $\mathbf{D}_r$ を考えると、(7.25)式は(7.26)式のように変形できる。

$$\begin{aligned} \Delta\vec{R} &= \mathbf{U}\mathbf{D}\Delta\vec{\alpha} \\ &\approx \mathbf{U}\mathbf{D}_r\Delta\vec{\alpha} \end{aligned} \quad (7.26)$$

(7.26)式より、 $\Delta\vec{\alpha}$ の最初の $r$ 個の要素以外は放射化量に影響を与えない。つまり、正規直交行列 $\mathbf{V}$ の最初から $r$ 列目までの基底の方向にのみ感度を考慮する形になる。なお、以降、正規直交行列 $\mathbf{V}$ の最初から $r$ 列目までの基底を取り出した正規直交行列を $\mathbf{V}_r$ と表す。

入力データに対する感度係数行列 $\mathbf{G}(R \leftarrow \Sigma)$ を評価するには、基底方向への入力データの摂動

に対する感度係数行列 $\mathbf{G}(R \leftarrow \alpha)$ を摂動計算により評価し、(7.27)式で示される座標変換を行うことにより、実施可能である。

$$\mathbf{G}(R \leftarrow \Sigma) = \mathbf{G}(R \leftarrow \alpha) \mathbf{V}_r \quad (7.27)$$

なお、(7.27)式の座標変換式は以下のような手順により導出される。まず、核特性量の変動ベクトル $\Delta \vec{R}$ は(7.28)式のように変形できる

$$\begin{aligned} \Delta \vec{R} &= \mathbf{G}(R \leftarrow \Sigma) \Delta \vec{\Sigma} \\ &\approx \mathbf{U} \mathbf{D}_r \mathbf{V}_r \Delta \vec{\Sigma} \\ &= \mathbf{U} \mathbf{D}_r \mathbf{V}_r \mathbf{V}_r \Delta \vec{\alpha} \\ &= \mathbf{U} \mathbf{D}_r \Delta \vec{\alpha} \end{aligned} \quad (7.28)$$

また、放射化量の変動ベクトル $\Delta \vec{R}$ は AS の基底方向への摂動量を成分としたベクトル $\Delta \vec{\alpha}$ と、 $\alpha$ に対する感度係数 $\mathbf{G}(R \leftarrow \alpha)$ を用いて(7.29)式のように示される

$$\Delta \vec{R} = \mathbf{G}(R \leftarrow \alpha) \Delta \vec{\alpha} \quad (7.29)$$

(7.28)式と(7.29)式より、 $\mathbf{G}(R \leftarrow \alpha)$ は(7.30)式のように示される。

$$\mathbf{G}(R \leftarrow \alpha) = \mathbf{U}_r \mathbf{D}_r \quad (7.30)$$

以上により、入力データに対する核特性量の感度係数ベクトル $\mathbf{G}(R \leftarrow \Sigma)$ は、基底方向への入力データの摂動に対する核特性量の感度係数ベクトル $\mathbf{G}(R \leftarrow \alpha)$ を用いて(7.31)式のように変形することができる。

$$\mathbf{G}(R \leftarrow \Sigma) = \mathbf{U}_r \mathbf{D}_r \mathbf{V}_r = \mathbf{G}(R \leftarrow \alpha) \mathbf{V}_r \quad (7.31)$$

実際には ROM を実施する前に厳密な AS はわかっていないため、近似的な AS を $\mathbf{V}$ として代用する。

### 7.2.3 具体例

本節では、ROM を簡単なモデルに適用する例について示す。対象とするモデルとしては、(7.32)式で示されるようなモデルを考える。

$$\begin{cases} E = 1a + 5b + 2c \\ F = 2a + 10b + 5c \\ G = 5a + 20b + 8c \end{cases} \quad (7.32)$$

ここで、

$a, b, c$ :入力パラメータ、 $E, F, G$ :出力パラメータ

(7.1)式で示されるモデルの感度係数行列は(7.33)式となる。ここでは、この感度係数行列を ROM により求めることを考える。

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} 1 & 5 & 2 \\ 2 & 10 & 5 \\ 5 & 20 & 8 \end{pmatrix} \quad (7.33)$$

(7.33)式を特異値分解すると、Active Subspace の基底は式(7.34)のようになる。ここで、特異値は、順に 25.4365306, 0.9705102, 0.2025406 である。

$$\vec{v}_1 = \begin{pmatrix} -0.21432 \\ -0.90074 \\ -0.3778 \end{pmatrix}, \vec{v}_2 = \begin{pmatrix} 0.518048 \\ 0.223083 \\ -0.82575 \end{pmatrix}, \vec{v}_3 = \begin{pmatrix} 0.828066 \\ -0.37269 \\ 0.418816 \end{pmatrix} \quad (7.34)$$

ここで、基底 $\vec{v}_1$ のみを用いて、感度解析を行う。まず、(7.1)式において、入力データ( $a, b, c$ )を

(0,0,0)から(-0.21432, -0.90074, -0.3778)に変化させると、出力データ(E, F, G)は(0, 0, 0)から(-5.47362, -11.32504, -22.1088)に変動する。従って、

$$\mathbf{G}(R \leftarrow \alpha) = \begin{pmatrix} -5.47362 \\ -11.32504 \\ -22.1088 \end{pmatrix} \quad (7.35)$$

(7.27)式より、基底 $\mathbf{v}_1$ のみを用いた場合、以下のように近似的な感度係数行列を評価できる。

$$\mathbf{G}(R \leftarrow \alpha)^T \mathbf{v}_1 \approx \mathbf{G}(R \leftarrow \alpha)^T \mathbf{V}_r = \mathbf{G}(R \leftarrow \Sigma) \quad (7.36)$$

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} -5.47362 \\ -11.32504 \\ -22.1088 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -0.21432 & -0.90074 & -0.3778 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1.173100 & 4.930319 & 2.067935 \\ 2.427169 & 10.200938 & 4.278604 \\ 4.738331 & 19.914322 & 8.352711 \end{pmatrix} \\ &\approx \begin{pmatrix} 1 & 5 & 2 \\ 2 & 10 & 5 \\ 5 & 20 & 8 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (7.37)$$

(7.27)式より、感度がおおよそ再現できていることがわかる。直接法では 3 回の感度解析が必要となるが、基底 $\mathbf{v}_1$ が事前に何らかの方法でわかっているならば、ROM を用いることで 1 回の感度解析でおおよその感度係数が評価可能であることがわかる。

## 8. エピローグ

Reduced Order Model の何たるかを理解したあなたは、さっそく上司から仰せつかった仕事に適用してみた。その結果、入力データの感度解析に ROM を適用することで、計算時間を大幅に短縮することに成功し、期限内に仕事を完遂することができたのであった。

「【いい経験をさせてくれた上司】さん、報告書がまとまりました。概要はこちらです。」

「どれどれ……。おお、これは素晴らしい。うまくはまると、ROM はこれだけの威力を発揮するのか！【よく ROM の勉強をしたね】君、大変ご苦労だった。良い経験になっただろう。そういえば、関連する国際学会がカリブ海のリゾート地で来年あるそうだ。顧客と連名で今回の成果を発表したらどうかね？」

「【おお、太っ腹な上司】さん、いいですね。早速、担当の方にコンタクトしてみます。」

そして 10 ヶ月後……。

