感度解析に自動微分を用いた非圧縮粘性流体における逆解析手法

Inverse Analysis Technique in Incompressible Viscous Flow
Using Automatic Differentiation for Sensitivity Analysis

高橋佑弥*・川原睦人**

Yuya TAKAHASHI and Mutsuto KAWAHARA

*学生会員 中央大学大学院 理工学研究科 土木工学専攻 (〒112-8551 東京都文京区春日 1-13-27)

**正会員 工博 中央大学教授 理工学部土木工学科 (〒112-8551 東京都文京区春日 1-13-27)

The progress of computer and numerical technique in recent years allows people not only complex numerical simulation but also resolution of inverse problems. In the inverse analysis, it is important to pursue higher quality of gradient computation. It is called as the sensitivity analysis in general. This is the most bone-crushing thema in the analysis. In this study, the authors propose the automatic differentiation as a new approach applied to the optimal control problems. The optimal control and identification problems in incompressible viscous flows are performed in this research. The Navier-Stokes equations with incompressibility constraint is employed as state equation for the viscous flow. The forward mode automatic differentiation computes the partial derivatives according to the differentiation rule of a composite function whenever basic operation is performed. This method is efficiently implemented by operator over-loading technique, which is depending on object oriented programming languages such as C++.

Key Words : Automatic differentiation, inverse analysis, optimization, sensitivity analysis, finite element method, incompressible Navier-Stokes equation

1. はじめに

近年, 計算力学の分野では計算機能力の飛躍的向上により複雑な数値シミュレーションだけでなく, 様々な逆問題に対する関心が非常に高くなって来ている. 土木工学においてもモデルと結果がわかっているが原因がわからなかったり, 原因と結果がわかっているのにモデルが定まらないような状況が多々存在する. パラメータ同定問題や最適制御問題がこれらの例に挙げられるだろう. これらの逆問題をコンピュータ上で扱うことは従来の風洞実験など大規模な実験施設やトライ・アンド・エラーの経験的な設計に比べコスト面, 効率面において大変有益なことといえよう.

このような問題を数値解析であつかう場合, モデルを安定かつ効率的に解くとともに, 最適制御理論に基づいて高精度に感度解析を行なうことが求められる. 有限要素解析においては Tezduyar らによる SUPG/PSPG 法¹⁾や松本らによる安定化気泡関数有限要素法²⁾など目覚ましい発展をみせている. 本研究では, 数値解析には MINI 要素を用いた安定化気泡関数有限要素法を適用した.

しかし, 感度解析においてはその定式化が複雑で最適化計算のアプリケーション開発において大きなボトルネックになっており, また, 一般化された手法は確立されていない. そこで本研究では感度解析に最適化計算において, 近年, 多くの科学技術の分野で関心を集めて

いる³⁾⁴⁾⁵⁾自動微分を用いた, すでに入手可能な自動微分用のライブラリもいくつか存在している⁶⁾⁷⁾. 従来, 感度解析は随伴系や感度方程式などを導入し勾配を求めるための方程式を導きそれを離散化することによって行なわれて来た. 自動微分を用いると離散化されインプリメントされたモデルから自動的かつ精確に勾配を求めることができる. つまり, 順問題を解析するプログラムが開発されていれば感度解析の定式化を行うことなく自動的に感度解析を行うことができる. ここでは前進型自動微分を導入し感度解析を行った. この手法はプログラム全体を基本演算の合成関数とみなし基本演算が実行されるたびに合成関数の微分側に従い偏導関数計算を行う. 前進型自動微分の計算法は感度方程式を導入した場合とほぼ同等の手法となるが, 実行時に偏導関数計算が行われるため感度方程式のように感度の境界条件を必要としない. 感度の境界条件はしばしば物理的に定義できない場合があるがこれを回避することが可能である. 前進型自動微分は演算子の多重定義により容易に実装できるがこれはオブジェクト指向のプログラム言語に大きく依存するので開発言語として C++ を用いた.

本研究は数値解析例として非圧縮粘性流体における粘性の同定と同流体中における物体の抗力最小化最適制御を例に挙げ, 自動微分の有限要素法における逆問題解決への有用性を検証し, これからの発展性を探ること

を目的とする。自動微分を有限要素法解析に応用したことが本研究の大きな特徴の一つである。

2. 基礎方程式

非圧縮粘性流れの基礎方程式である非圧縮 Navier-Stokes 方程式は無次元化することにより以下の運動方程式と連続式により表される。

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + \nabla p - \nu \nabla \cdot (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) = \mathbf{f} \quad \text{in } \Omega, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad \text{in } \Omega. \quad (2)$$

ここに、 Ω は境界 Γ で囲まれた解析領域、 $\mathbf{u}$, p は流速および圧力、 $\mathbf{f}$ は外力、また、 ν は無次元の粘性係数でありレイノルズ数 Re の逆数である。境界 Γ は、 Γ_1 と Γ_2 に分けられ、それぞれ以下の Dirichlet 境界条件と Neumann 境界条件が規定される。

$$\mathbf{u} = \hat{\mathbf{u}} \quad \text{on } \Gamma_1, \quad (3)$$

$$\{-p\mathbf{I} + \nu(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)\} \cdot \mathbf{n} = \hat{\mathbf{t}} \quad \text{on } \Gamma_2. \quad (4)$$

ここに、 $\mathbf{I}$ は単位行列、 $\mathbf{n}$ は境界 Γ の外向き法線ベクトルである。初期条件は次のように与えられる。

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{u}^0(\mathbf{x}) \quad \text{in } \Omega \quad (5)$$

3. 有限要素方程式

図-1 MINI 要素

離散化手法としては計算効率と安定性を考慮し、中間流速を導入した分離型解法と安定化気泡関数要素²⁾を導入した。流速場に対して P1b 要素を、圧力場に対して P1 要素をそれぞれ適応した MINI 要素 (図-1) を用いる。

3.1 時間方向の離散化

本研究では計算精度と効率を考慮し陰的解法および分離型解法を用いる。運動方程式は時間方向に関して二次精度である Crank-Nicolson 法を適用し、圧力および連続式は完全陰的に表す。連続式 (2) を完全に満足しない中間流速を導入してから圧力 Poisson 方程式を導くアルゴリズムを導入する。流速場と圧力場の重

み関数と近似関数をそれぞれ $\mathbf{w}_h, q_h, \mathbf{u}_h, p_h$ とすると重み付残差方程式は次のようになる。

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \mathbf{w}_h \cdot \left\{ \frac{\tilde{\mathbf{u}}_h^{n+1} - \mathbf{u}_h^n}{\Delta t} + \mathbf{u}^* \cdot \nabla \tilde{\mathbf{u}}_h^{n+\frac{1}{2}} \right\} d\Omega \\ & + \int_{\Omega} \nabla \mathbf{w}_h \cdot \{-p_h^n \mathbf{I} + \nu(\nabla \tilde{\mathbf{u}}_h^{n+\frac{1}{2}} + \nabla \tilde{\mathbf{u}}_h^{Tn+\frac{1}{2}})\} d\Omega \\ & = \int_{\Omega} \mathbf{w}_h \cdot \mathbf{f}_h d\Omega + \int_{\Gamma_2} \mathbf{w}_h \cdot \hat{\mathbf{t}}_h d\Gamma \quad \text{in } \Omega, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\int_{\Omega} \Delta t \nabla q_h \cdot \nabla (p_h^{n+1} - p_h^n) d\Omega = - \int_{\Omega} q_h \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}_h^{n+1} d\Omega \quad \text{in } \Omega, \quad (7)$$

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \mathbf{w}_h \cdot \left\{ \frac{\mathbf{u}_h^{n+1} - \tilde{\mathbf{u}}_h^{n+1}}{\Delta t} + \frac{1}{2} \mathbf{u}_h^* \cdot \nabla (\mathbf{u}_h^{n+1} - \tilde{\mathbf{u}}_h^{n+1}) \right\} d\Omega \\ & + \int_{\Omega} \nabla \mathbf{w}_h \cdot \{-(p_h^{n+1} - p_h^n) \mathbf{I} \\ & + \frac{1}{2} \nu (\nabla \mathbf{u}_h^{n+1} + \nabla \mathbf{u}_h^{Tn+1}) \\ & - \frac{1}{2} \nu (\nabla \tilde{\mathbf{u}}_h^{n+1} + \nabla \tilde{\mathbf{u}}_h^{Tn+1})\} d\Omega \\ & = 0 \quad \text{in } \Omega \end{aligned} \quad (8)$$

ここで、

$$\mathbf{u}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (\mathbf{u}^n + \mathbf{u}^{n+1}) \quad (9)$$

$$\mathbf{u}^* = \frac{1}{2} (3\mathbf{u}^n - \mathbf{u}^{n-1}) \quad (10)$$

である。移流速の線形近似としている $\mathbf{u}^*$ は、二次精度 Adams-Bashforth 公式により得られる。このようにして得られたスキームは、時間に関して二次精度を有する線形スキームとなっている。

3.2 安定化気泡関数

本研究では数値粘性を補うために以下に示す安定化作用を導入する事により不足している数値粘性を適切に与える。

$$\tau_{eB} = \frac{\langle \phi_e, 1 \rangle_{\Omega_e}^2}{(\nu + \nu') \|\nabla \phi_e\|_{\Omega_e}^2 V_e} \quad (11)$$

ここで ν' は安定化作用に対する制御パラメータであり、この値は、次式のように安定化有限要素法において用いられている τ_{eS} と等価となるように決定する。

$$\tau_{eB} = \tau_{eS}, \quad \tau_{eS} = \left[\left(\frac{2|\mathbf{u}|}{h_e} \right)^2 + \left(\frac{4\mu}{h_e^2} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (12)$$

以上に示すような安定化作用パラメータを導入した際、気泡関数の自由度を消去しない有限要素方程式を導くと、結果的にこの有限要素方程式において、重心点のみに、次式のような安定化項を付加した形となる

$$\sum_{e=1}^{N_e} \nu' \|\nabla \phi_e\|_{\Omega_e}^2 b_e \quad (13)$$

N_e と b_e は、それぞれ、総要素数と重心点の自由度を示す。この安定化項 (13) を付加することにより数値的な不安定性を回避するものである。また、この定式化を用いる場合には、気泡関数の形状を変化させずに、安定化作用に対する制御パラメータを変化させることから、適合型の気泡関数であれば、どのような気泡関数を用いても良いことになる。この式 (13) の安定化項と有限要素方程式中の粘性項の重心点における項をまとめると、

$$(\nu + \nu') \|\nabla \phi_e\|_{\Omega_e}^2 \quad (14)$$

となる。式 (11) と式 (12) を用いると

$$\frac{\langle \phi_e, 1 \rangle_{\Omega_e}^2}{(\nu + \nu') \|\nabla \phi_e\|_{\Omega_e}^2 V_e} = \tau_{eS} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} (\nu + \nu') \|\nabla \phi_e\|_{\Omega_e}^2 &= \frac{\langle \phi_e, 1 \rangle_{\Omega_e}^2}{\tau_{eS} V_e} \\ &= \frac{\langle \phi_e, 1 \rangle_{\Omega_e}^2}{V_e} \tau_{eS}^{-1} \end{aligned} \quad (16)$$

$$\tau_{eS}^{-1} = \sqrt{\left(\frac{2|u|}{h_e}\right)^2 + \left(\frac{4\mu}{h_e^2}\right)^2} \quad (17)$$

以上より有限要素方程式は次のようになる。

$$M \frac{\tilde{u}^{n+1} - u^n}{\Delta t} + S(\tilde{u}) \tilde{u}^{n+1/2} - Bp^n = M_L f, \quad (18)$$

$$\Delta t L(p^{n+1} - p^n) = -B^T \tilde{u}^{n+1}, \quad (19)$$

$$M \frac{u^{n+1} - \tilde{u}^{n+1}}{\Delta t} + \frac{1}{2} S(\tilde{u})(u^{n+1} - \tilde{u}^{n+1}) \quad (20)$$

$$-B(p^{n+1} - p^n) = 0. \quad (21)$$

4. 逆問題の定式化

逆問題は最適制御理論により評価関数の最小化問題に帰着することができる。本研究において評価関数は順解析により求められた状態量と目的値との残差の二乗和で定義する。

$$J(P) = \int_T \int_{\Omega} \frac{1}{2} (u - u_{opt})^2 d\Omega dt \quad (22)$$

ここで、 u_{opt} は目的値となる状態量、 P は制御パラメータである。最小化手法としては Sakawa-Shindo 法⁸⁾に従い、評価関数にペナルティ項を付加した修正評価関数を導入する。

$$\begin{aligned} K(P^{(l)}) &= J(P^{(l)}) \\ &+ \frac{1}{2} \int_T \int_{\Omega} W^{(l)} (P^{(l+1)} - P^{(l)})^2 d\Omega dt \end{aligned} \quad (23)$$

停留条件 $\partial K / \partial \nu = 0$ により、制御パラメータ P を更新する。Sakawa-Shindo 法のアルゴリズムを以下に示す。

1. Set $l = 0$ and assume the initial control value
2. Set the initial state value
3. Solve the state equation and evaluate the performance function J^l
4. Evaluate the partial derivative of J^l by AD
5. Evaluate the control value by
6. Evaluate the error norm $e = \|u_{ctl}^{(l+1)} - u_{ctl}^{(l)}\|$ and if $e < \varepsilon$ then go to 7 else stop
7. Solve the state equation and evaluate the state values $u^{(l+1)}$
8. Evaluate the performance function $J^{(l+1)}$
9. The weighting parameter W is changed as follows;
If $J^{(l+1)} \leq J^{(l)}$ then
 $W^{(l+1)} = 0.9W^{(l)}$ and go to 4,
else $W^{(l+1)} = 2.0W^{(l)}$ and go to 5.

ここで評価関数は有限要素方程式を解くことにより導き出される陰関数であり従来は随伴系や感度方程式法を導入して Sakawa-Shindo 法を適用していたが、本研究ではこの時の勾配計算に自動微分を用いることとする。このことにより飛躍的な開発効率の向上が期待できる。

5. 感度解析

5.1 従来の手法

(1) 感度方程式を用いた方法

感度方程式を用いた手法は基礎方程式を制御量で直接微分して感度方程式を導きその感度方程式を離散化し感度を計算する手法である。この手法の利点は計算容量である。感度の計算が順解析と独立して行うことができるので順解析のたかだか数倍の計算容量しか必要としない。簡単な例として熱伝導方程式

$$\dot{u} - \mu \Delta u = f \quad \text{in } \Omega \times (0, T) \quad (24)$$

を考える。この場合、感度方程式は

$$\dot{u}' - \mu \Delta u' = \frac{\partial f}{\partial x} \quad (25)$$

のようになる。このとき感度方程式を解くために状態量 u の一階微分を境界条件として与えなければならない場合がある。しかし状態量の一階微分は物理的に定義できない場合が多く大きな問題となる。

(2) 随伴系を用いた方法

随伴系を用いた感度解析は基礎方程式を満足しながら評価関数を最小にする拘束条件付きの最適制御問題に帰着させる。基礎方程式の状態変数に対する随伴変数を用いるラグランジュ乗数法 (随伴方程式法) によって拘束条件なしの最小化問題に変換することができる。

ラグランジュ乗数を用いて微分方程式 (基礎方程式) を評価関数に付加・拡張し、変分原理に基づき随伴方程式を導くことができる。

評価関数の制御量に関する勾配は、基礎方程式と随伴方程式を解いたものから、計算できる。

随伴方程式は順解析とほぼ同じ数値解析手法が適用でき計算効率は非常に高いものがある。しかし、問題点としてはその定式化の煩雑さや逆解析のために順解析時に求められた状態量を全て記憶しなければならないことがあげられる。非定常の制御問題では終端条件周辺で制御がうまく行われない例も報告されている。

5.2 提案手法

(1) 前進型自動微分

数値解析のプログラムに現れる全ての基本演算および組み込み関数の偏導関数は数学的に定義されている。本研究で用いる自動微分はプログラムをこれら基本演算の合成関数であるとみなして偏導関数値を自動的に計算する手法である。これはプログラムに現れる全ての演算子に偏導関数計算を多重定義することにより実現することができる。演算子の多重定義は C++ などのオブジェクト指向のプログラム言語を用いることで容易に行なえる。以下に多重定義されるべき演算子等の例を示す。

$$\psi_{\text{arithmetic}} = \{+, -, *, /, ++, --\} \quad (26)$$

$$\psi_{\text{relational}} = \{==, !=, <, >, <=, >=\} \quad (27)$$

$$\psi_{\text{math}} = \{\sin, \cos, \log, \dots\} \quad (28)$$

ここに $\psi_{\text{arithmetic}}$ は算術演算子の集合、 $\psi_{\text{relational}}$ は関係演算子の集合、 ψ_{math} は標準ライブラリが提供する組み込み関数の集合をそれぞれあらわしている。以下に前進型自動微分の計算方法を示す。

データ構造 各中間変数 v にたいし、 n 個の作業領域 $S_i(v), i = 1, \dots, n$ を用意する。

入力 入力変数 $x_i, i = 1, \dots, n$ を用意する。

出力 関数 f の値が計算される中間変数 v_r に対応する作業領域 $S_i(v_r)$ に $\partial f / \partial x_i$ が計算される。

(手順 1) 初期化

$$S_l(x_i) \leftarrow 0 \quad (l = 1, \dots, i-1, i+1, \dots, n)$$

$$S_l(x_i) \leftarrow 1 \quad (l = i)$$

(手順 2) 計算

k を $1, 2, \dots, r-1, r$ と変化させながら以下を実行する。

$v_k = \psi_k(u_{k1}, u_{k2})|_{v_{k1}=v_\alpha, v_{k2}=v_\beta}$ について以下を計算する。(実引数 v_α, v_β は入力変数 $x_1, \dots, x_n$, 中間変数 $v_1, \dots, v_{k-1}$, 定数のいずれか、 ψ_k は k ステップ目の基本演算とする。)

$$S_i(v_k) \leftarrow S_i(v_\alpha) \frac{\partial \psi_k}{\partial u_{k1}} + S_i(v_\beta) \frac{\partial \psi_k}{\partial u_{k2}} \quad (29)$$

(2) 実現方法

本研究では計算過程に沿って偏導関数計算を行う前進型の自動微分を用いた。この手法は随伴系を導入した手法や全ての計算過程を記憶しなければならない後退型の自動微分に比べて非常に少ない計算機容量で偏導関数計算をおこなうことができる。リスト 1 に自動微分用ヘッダファイルの一部を示した。このクラスを通常数値計算に用いる `double` などの型の代わりに用いる。リスト 1 のように自動微分のクラスは通常の実数を記憶する変数 `val` と勾配ベクトルを格納する動的配列 `*d1` を含む。ここで用意した自動微分クラスについて偏導関数計算の演算を多重定義することになる。リスト 2 に掛算演算子の多重定義を例として載せる。このように $\psi_{\text{arithmetic}}, \psi_{\text{relational}}, \psi_{\text{math}}$ 全ての基本演算子について演算子を多重定義すれば計算の進行と同時に勾配ベクトルの計算が行われるようになる。

リスト 1 Header file for AD class

```
class fdouble {
    double val; // Normal value
    double *d1; // Gradient vector (dynamic array)
    int size; // Size of Gradient vector
    fdouble(); // Constructor
    ...
};
```

リスト 2 Operator overloading for multiplication

```
operator*(const fdouble &x, const fdouble &y)
{ // a temporary array is created here
    fdouble tmp(x.size());
    tmp.val() = x.val() * y.val()
    for (int i = 0; i < tmp.size(); i++)
        tmp.d1(i)
            = x.d1(i) * y.val() + x.val() * y.d1(i);
    return tmp;
}
```

6. 数値解析例

6.1 未知係数の同定

一つ目の数値解析例として Cavity 流れを観測し、粘性係数 ν を同定する問題をとりあげる。この場合評価関数は解析で得られた流速と観測データとの残差の 2 乗和となる。

$$J(\nu) = \frac{1}{2} \int_T \int_\Omega (\mathbf{u} - \mathbf{u}^*)^T (\mathbf{u} - \mathbf{u}^*) d\Omega dt, \quad (30)$$

$$\mathbf{u} = (u_1, u_2, \dots, u_n)^T, \quad (31)$$

$$\mathbf{u}^* = (u_1^*, u_2^*, \dots, u_n^*)^T, \quad (32)$$

ここに $\mathbf{u}$ は解析で得られた流速, $\mathbf{u}^*$ は観測された流速をそれぞれ示している. 境界条件, 及び有限要素分割を図-3, 図-2 に示す. 有限要素分割は 1089 節点, 2048 要素で構成されている. なお, 要素分割図中の黒点は観測点を示している.

図-2 境界条件

図-3 有限要素分割

図-4 観測値 1

図-5 観測値 2

(1) ケース 1

観測値として図-4 のような流速が観測されたとき粘性係数を同定する. 粘性係数 ν の初期予測を $\nu = 0.8$ (甲) および $\nu = 1.2$ (乙) とし同定を行った. 甲, 乙

図-6 評価関数 (甲)

図-7 粘性係数 (甲)

いずれも評価関数が 0 に収束し (図-6, 図-8) 粘性係数 $\nu = 1.0$ が同定された (図-7, 図-9).

(2) ケース 2

観測値として図-5 のような流速が観測されたとき粘性係数を同定する. 初期予測を $\nu = 0.005$ とし同定計算を行なった. 図 10, 図 11 より, 評価関数は収束し粘性係数 $\nu = 0.0025$ を同定することができたことがわかる.

図-8 評価関数 (乙)

図-11 粘性係数の収束

図-9 粘性係数 (乙)

図-10 評価関数

6.2 最適制御

最適制御の解析例として非圧縮粘性流体中にある物体の抗力最小化問題を取り上げる。解析領域および有限要素分割を図-13 と図-14 に示す。この解析例では流体中の円柱後方から制御流速 u_{ctrl} を発生させ抗力係数 D の最小化を図る。この場合評価関数には抗力係数 D を直接適用する。

$$J = \int_T \int_{\Omega} (qD^2 + u_{ctrl}^T r u_{ctrl}) d\Omega dt. \quad (33)$$

ここに q, r は重み係数である。この時、重みを $q = 1$ として制御を行うと制御開始時に感度が不連続となり数値解析が発散してしまう。そこで重み q を三角関数を用い連続的に 0 から 1 に変化させた。制御を開始する時間ステップを 0 とするとき重み係数を式 (34) のように変化させる。重み係数は図-12 に示すように変化する。また、この解析では $r = 0$ とした。解析条件として時間増分を 0.05 レイノルズ数を 250 とし、円柱後方に周期解が現れた後制御を開始する。有限要素分割は 1636 節点, 3116 要素から成っている。

$$q = \begin{cases} 0 & (0 \leq n \leq 20) \\ (1 - \cos(\frac{\pi(n-20)}{80}))/2 & (20 \leq n \leq 100) \\ 1 & (100 \leq n) \end{cases} \quad (34)$$

図-12 重み係数

(3) 結果のまとめ

解析結果としてケース 1, 2 いずれも正しく同定計算が行われた。本研究では観測点の数、位置を固定して行った。同定するパラメータの自由度を考えると観測点の数はさらに少なくとも計算可能ではないかと考えられる。また、観測点の位置によりパラメータに影響されやすい場所を特定できるのではないだろうか。本研究では粘性係数を同定したが、これは有限要素解析における安定化パラメータとも密接に関係したものと考えられる。安定化パラメータによる解析解への影響や、適切な人工粘性が付与されているかどうかなど今後の課題としたい。

図-13 解析領域

図-14 有限要素分割

図-15 評価関数

図-16 抗力の減少

図-17 圧力 (制御前)

図-18 圧力 (制御後)

図-19 流速 (制御前)

図-20 流速 (制御後)

(1) 結果のまとめ

解析結果として評価関数は図-15 のように減少し約 70 イタレーションで収束した。図-16 を見てわかるように抗力係数は制御流速により抑える事ができた。制御前後の圧力分布を図-17 と図-18 に、制御前後の流速ベクトル分布を図-19 と図-20 にそれぞれ示した。

7. おわりに

本研究の目的は自動微分の有用性および発展性を検証することであった。Cavity 流れの粘性同定と流体力最小化問題の解析例により、自動微分により正しく感度解析が行なわれ勾配法により最小化問題が解決することができた。自動微分の利点は偏導関数値計算が自

動的に行なわれ自動微分のクラスを定義できれば順解析の開発にのみ集中することができ最適制御のアプリケーションの開発が非常に簡便になることである。また、この事により人為的な開発ミスの発生を避けることができる。

また、最小化手法において収束効率を考慮すると 2 次偏導関数は大変魅力的なものである。自動微分を高階偏導関数計算可能に拡張することは非常に重要な研究課題といえるだろう。しかし、そのためには自動微分のクラスにヘッセ行列を格納する 2 次動的配列を用意し、計算規模も大きなものになる。有限要素法における感度解析において自動微分でいかに効率よくヘッセ行列を求めるかが重要であると言えるだろう。

参考文献

- 1) T.E. Tezduyar: *Stabilized Finite Element Formulations for Incompressible Flow Computations*, Advances in Applied Mechanics, 28(1991) 1-44.
- 2) J. Matsumoto, T. Umetsu and M. Kawahara, *Incompressible Viscous Flow Analysis and Adaptive Finite Element Method Using Linear Bubble Function*, Journal of applied Mechanics, vol. 2, 223-232(1999).
- 3) Masao IRI: *Automatic Differentiation in Sensitivity Analysis and Optimization — Computational complexity, guaranteed interval of variation and the role of adjoint systems*, The 44th Nat. Cong. of Theoretical & Applied Mechanics (1995).
- 4) Olivier Pironneau, Nicolas Dicesare: *CONSISTENT APPROXIMATIONS, AUTOMATIC DIFFERENTIATION AND DOMAIN DECOMPOSITION FOR OPTIMAL SHAPE DESIGN*, GAKUTO International Series, Mathematical Sciences and Applications Vol. 16 (2001), Computational Methods for Control Application, pp. 167-178
- 5) Pierre Aubert, Nicolas Di Césaré, Olivier Pironneau: *Automatic Differentiation in C++ using Expression Templates and Application to a Flow Control Problem*, June 7, 1999
- 6) Claus Bendtsen, Ole Stauning: *FADBAD, a flexible C++ package for automatic differentiation*, TECHNICAL REPORT IMM-REP-1996-17, J. No. 1996-x5-94 August 15, 1996 OS
- 7) Andreas Griewank, David Juedes, Hristo Mitev, Jean Utke, Olaf Vogel and Andrea Walther: *ADOL-C: A Package for the Automatic Differentiation of Algorithms Written in C/C++*, ACMTOMS, vol. 22(2), June 1996, pp. 131-167, Algor. 755.
- 8) Y. Sakawa Y. Shindo: *On global convergence of an algorithm for optimal control*, Transactions on automatic control, IEEE, AC-25(6), pp.1149-1153, 1980

(2004 年 4 月 16 日 受付)