

統計的機械学習を用いた乱流モデルの開発

東北大学大学院 情報科学研究科 蒲原 将隆
東北大学 流体科学研究所 服部 裕司

Masataka Gamahara
Graduate School of Information Science,
Tohoku University

Yuji Hattori
Institute of Fluid Science,
Tohoku University

1 諸言

Large Eddy Simulation(LES)は計算格子(GS)よりも細かいスケールの運動を sub-grid scale(SGS)として記述し, 計算格子で解像できる大きいスケールの運動を直接的に計算する手法である. LESでは一部の運動をSGSに落とし込む分, 直接数値計算(DNS)より粗い格子で計算が可能である. そのため, DNSより少ない計算量でより高いレイノルズ数まで計算できる. 現在, 工学的な流体解析にはRANSが主として用いられているが, より詳細に乱流場を計算できる点と今後のさらなる計算機の発展からLESによる流体解析が期待されている. LESにおいてモデリングされる量はSGS応力と呼ばれる. スケールの分離にはLow-pass filterが用いられ, 方程式系にフィルタ操作を施すことにより, LESにおいて解かれる系が求まる. SGS応力は厳密にはSGSの物理量で記述されるためGSで計算を行う際にはモデル化が必要になる. そのモデルがSGSモデルである.

SGSモデルは1961年のSmagorinskyモデル[1]に始まり, 現在に至るまで様々なものが研究されてきた. LESにおいて広く使用されるこのモデルは乱流による拡散の効果を分子粘性の働きと同様に扱う渦粘性近似に基づいている. このモデルは乱流エネルギー散逸を良く近似し, 安定性が高いため広く利用されているが, テンソルレベルでのSGS応力の近似精度は低いことが検証されている. [2] また, Smagorinskyモデルにはいくつかの問題点が指摘されている. それを改善するためにモデル係数を動的に決定させるDynamic Smagorinskyモデル[3]など様々なものが開発されている. しかし, 現在開発されているモデルに共通する課題として数値不安定性や半経験的な係数の使用といった点が挙げられ, 乱流場の計算のためにより正確なSGSモデルが求められている.

機械学習は複雑な関係にある入出力を自動的にモデル化する手法である. この手法は様々な分野で利用されようとしている. 本研究は, この技術を乱流モデルに適用することを試みる.

本研究の最終目的は機械学習を用いた新しい乱流モデルの作成である. しかし, 機械学習装置を用いて乱流の学習が可能であるか否かはまだ調べられていない. 本研究はそこから取り掛かる. そのため, 本研究では特定の流れ場に対してニューラルネットワークを用いたSGS応力の学習と回帰を試みる.

2 計算手法

2.1 LES

本研究では機械学習を用いて LES における SGS 応力を回帰することを考える。LES では以下の方程式系を解く。

$$\frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} = -\frac{\partial \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}. \quad (2)$$

$$\tau_{ij} = \bar{u}_i \bar{u}_j - \overline{u_i u_j}. \quad (3)$$

ここで $\bar{f}$ はフィルタ操作により、粗像化されたものを表す。任意の物理量 f に対する一方向の粗像化は以下の式で表される。

$$\bar{f}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x-x', \Delta) f(x') dx'. \quad (4)$$

ここで $G(x, \Delta)$ はフィルタ幅 Δ をもつフィルタ関数であり、フィルタ幅以下のスケールが SGS として扱われる。本研究ではフィルタ関数としてトップハットフィルタを用いる。Navier-Stokes 方程式及び非圧縮性条件にフィルタ操作を施すことで (1), (2) 式が得られる。ここで τ_{ij} は SGS 応力と呼ばれるもので SGS から GS への寄与を表し、GS 成分のみでは表せない項である。LES ではこの項を何らかの SGS モデルによって求める。本研究ではこの τ_{ij} を機械学習を用いて回帰する。学習には乱流の DNS の計算結果から SGS 応力を抽出したものを使用する。

2.2 Neural Network

SGS 応力の学習に用いる機械学習装置としてニューラルネットワークを使用する。Figure.1 にネットワークの例と一つのニューロンの構造を示す。ニューラルネットワークでは複数の入力にそれぞれ重みづけを行い総和をとり、基底関数に代入する。それをいくつかの層で繰り返すことで様々な関数の回帰を可能にする。ニューラルネットワークによる出力は以下の式によって表される。

$$X_i^n = \mathcal{B}(u_i^n - h_i^n), u_i^n = \sum_j w_{ij}^n X_i^{n-1}. \quad (5)$$

ここで w は結合荷重、 h は閾値、 $\mathcal{B}$ は基底関数であり、ここではシグモイド関数を表す。基底関数を経ることで非線形性を表すことができる。関数は結合荷重と閾値によって表現される。学習の方法、即ち結合荷重・閾値の決定法にはバックプロパゲーション法を用いる。バックプロパゲーション法是最急降下法に基づいた手法である。学習ではある入力パターンに対してネットワークを動かして得られる出力パターンを計算する。その出力パターンと学習データからの望ましい出力パターンとの誤差を計算し、それを学習信号 δ として出力層から入力層へ誤差を伝播させながら結合荷重・閾値を改善する。学習信号は以下のように求められる。

$$\delta_i^N = (d_i - X_i^N) f'(u_i^N). \quad : \text{output layer} \quad (6)$$

$$\delta_i^n = \mathcal{B}'(u_i^n) \sum_j \delta_j^{n+1} w_{ji}^n \quad : \text{hidden layer}. \quad (7)$$

ここで $\mathcal{B}'$ は基底関数 $\mathcal{B}$ の微分を表す。全ての学習信号が求まると結合荷重の修正量が以下の式で求まる。

$$\Delta W_{ij}^{n,t} = \eta \delta_i^n X_j^{n-1} + \alpha \Delta W_{ij}^{n,t-1}. \quad (8)$$

$$\Delta h_{ij}^{n,t} = \eta \delta_i^n + \alpha \Delta h_{ij}^{n,t-1}. \quad (9)$$

ここで $\Delta W, \Delta h$ は一回の修正量である。修正には前回の試行の修正量も用いる。学習のパラメータである η は学習定数で収束の速さに関係する。 α は安定化係数を表していて前回の試行の重みの修正量を用いて収束の振動を抑える効果がある。 η, α は 1.0 以下の正の実数の範囲で適当な値を与える。このプロセスを繰り返すことによって出力層の出力値と学習データの誤差の自乗和の極小値を与える最急降下法が達成される。

2.3 ニューラルネットワークを用いたモデルについて

従来の SGS モデルのほとんどが渦粘性モデルに基づいている。渦粘性は乱流粘性と分子粘性の類似性から、SGS 応力が GS の速度勾配 (歪み速度) に比例するという近似である。この様な仮定は、分子粘性の場合分子の平均自由行程が流れの代表長さと比べて十分小さく、両者のスケールに明確な分離がなされているときに成立する。SGS 運動エネルギーの輸送方程式において、SGS 運動エネルギーの生成と散逸がほぼ等しいとする局所平衡状態の仮定と次元解析を用いることで渦粘性近似は以下の式で与えられる。

$$\tau_{ij} = -\frac{1}{3}\delta_{ij}\tau_{kk} = -2\nu_t\bar{S}_{ij}, \quad (10)$$

$$\nu_t = (C_s\Delta)^2|\bar{S}|, \quad (11)$$

$$\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\bar{u}_j}{\partial x_i}\right), \quad (12)$$

$$|\bar{S}| = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}. \quad (13)$$

この式が Smagorinsky モデルで用いられる。上式における C_s は Smagorinsky 定数とよばれるモデルパラメータである。 C_s は理論的に 0.2 程度と見積もられるが、混合層流やチャネル乱流においては経験的にそれぞれ 0.15, 0.1 が用いられている。壁を有する流れに関して滑りなし条件から、壁面上で SGS 応力と渦粘性係数は 0 になることが求められるが Smagorinsky モデルでは 0 にならないため、以下の Van Driest 型壁面減衰関数を乗じることで強制的に滑りなし条件を満たさせる。本研究でも渦粘性モデルを参考にすることで入力引数を決定する。まず入力として歪み速度テンソルを与える。また渦の効果を取り入れるために渦度を入力に加え、さらに壁乱流の非等方性を考慮し、壁面からの距離を加える。これは Smagorinsky モデルを壁乱流に用いるときに使われる Van Driest 型壁面減衰関数を意図したものである。ここで、歪み速度テンソルと渦度の和は速度勾配テンソルと同等であるため、入力には速度勾配テンソルと壁面からの距離を与える。作成モデルを式で表すと以下ようになる。

$$\tau_{ij} = \mathcal{F}\left(\frac{\partial\bar{u}_i}{\partial x_j}, y\right). \quad (14)$$

$\mathcal{F}$ はニューラルネットワークによって結びつけられる関数形である。作成モデルは一点の入力データからその点での SGS 応力を求めるものである。即ち本研究のニューラルネットワークを用いたモデルは従来のモデルの中では Test filter を用いないモデルに近い。

2.4 問題設定

問題を簡潔にするために、機械学習を用いて SGS 応力を学習・回帰する上でいくつかの条件を設定する。流れ場は非一様乱流で最も基本的な壁乱流であるチャネル乱流を対象とする。チャネル乱流は統計的に定常状態となるため瞬間の時刻における速度場データを用いて学習を行う。また乱流モデルは様々なレイノルズ数に適用できるものでなければならないが、ここでは SGS 応力を学習できるか否かということに関心があるため学習は固定したレイノルズ数で行う。ニューラルネットワークではシグモイド関数に代入することが必要であり、そのことから出力は一定の範囲内に制限される。ここでは以下の式のように規格化を行う。

$$f^* = \frac{1}{2}\left(\frac{0.7f}{f_{const}} + 1\right). \quad (15)$$

$$f_{const} : \text{Maximum of } |f_{mean} \pm f_{rms}|. \quad (16)$$

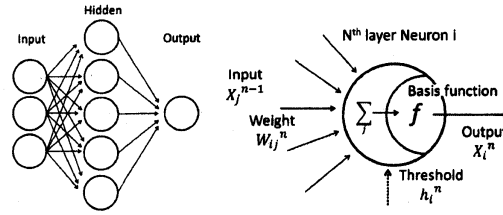


Figure 1: network

この規格化は平均量がある程度の大きさで捉えるために一部のデータをカットする。このことは乱流でまれに起こる現象をカットしてしまう恐れがあるため注意をする必要がある。なおカットするデータ量は全体の5%以下である。

2.5 学習データの取得

学習と性能評価に使う SGS 応力を得るためにチャンネル乱流の DNS を以下の条件で行う。流れ場の概略図は Figure.2 に示される。壁摩擦速度とチャンネルの半値幅に基づき無次元化を行う。計算手法は空間離散化にはスペクトル法と 6 次精度コンパクトスキームを用い、時間進行法は粘性項に 2 次精度クランクニコルソン法を、その他の項に 2 次精度アダムスバッシュフォース法を用いる。レイノルズ数 Re_τ は 180 に設定する。計算領域は流れ方向、壁垂直方向、スパン方向それぞれ $4\pi\delta$, 2δ , $2\pi\delta$ である。DNS は $192 \times 128 \times 160$ の格子で行う。DNS の結果として平均流の速度分布を Figure.3 に示す。この結果からは平均速度が壁近傍で線形速度分布、壁から離れた位置では対数速度分布になっていることが確認され、正しく DNS が行われていることがわかる。SGS 応力は DNS の結果から (3) 式のように抽出される。抽出には (4) 式で示されるフィルタ操作を行う。フィルタ関数にはトップハットフィルタを用い、テーラー展開を用いることで以下のように陽的に計算することができる。

$$\bar{u} = u_i + \frac{\bar{\Delta}^2}{24} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_i + \frac{\bar{\Delta}^4}{1920} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \Big|_i + O(\bar{\Delta}^6). \quad (17)$$

SGS と GS の分離のためのスケールはフィルタ幅 $\bar{\Delta}$ によって決定される。フィルタ幅は計算領域を $64 \times 64 \times 64$ の格子点数で解像したもので DNS の計算格子に比べて各方向 2~3 倍の粗さである。GS は実際の LES を行う際の格子幅であるため、GS を粗くしたときに、SGS 応力を高精度に計算することが要求される。

2.6 学習・回帰の条件

ニューラルネットワークは 3 層式 (入力層, 中間層, 出力層) を使用する。ニューロン数はそれぞれの層に対し 10, 100, 1 個配置する。学習には DNS 中の一部の領域データ ($1 \times 128 \times 160$: yz 断面) を用いて学習する。学習データを用いて 1000 回学習を繰り返した後、DNS の結果から求められる GS の入力値を与え、出力値を計算し、DNS から得た SGS 応力と比較をすることでニューラルネットワークを用いた SGS モデルの性能を調査する。

3 結果

3.1 相関係数

ニューラルネットワークを用いたモデルの評価方法として DNS から計算される SGS 応力との相関係数 (C.C.) を調べる。相関係数はチャンネル流れの均質方向である xz 平面において計算を行う。相関

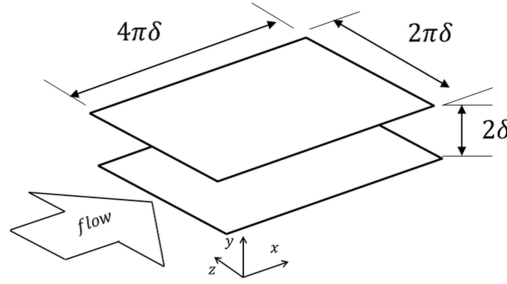


Figure 2: Flow Field

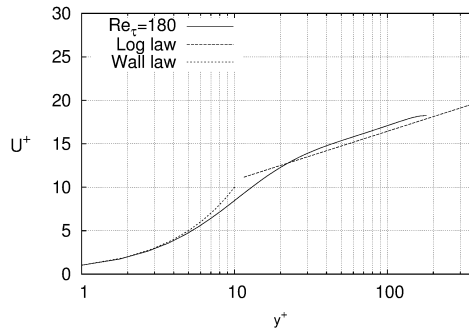


Figure 3: Mean flow

係数は関数 f, g について以下のように表される.

$$C.C.(f, g) = \frac{\sum (f_i - \langle f \rangle)(g_i - \langle g \rangle)}{\sqrt{\sum (f_i - \langle f \rangle)^2} \sqrt{\sum (g_i - \langle g \rangle)^2}} \quad (18)$$

ここで $\langle \rangle$ は平均値を表す. チャンネル全体の相関係数を, xz 平面の相関係数を y 方向に関して平均して求める.

$$C.C.all = \frac{1}{2\delta} \int_0^{2\delta} R dy \quad (19)$$

Figure.4 はニューラルネットワークを用いた SGS 応力の各成分の予測値と DNS の結果から得られる SGS 応力の相関係数を表している. チャンネル全体での相関係数は Table.1 に示す. すべての SGS 応力成分について相関係数が 0.7 以上であり, 高い相関係数が得られていることがわかる. 異なる時刻のチャンネル乱流のデータを学習データにしても同様の結果が得られている. この結果から学習データによって相関係数に多少の差はあるが大きな変化はないことがわかる. このことから学習データに依存せずにニューラルネットワークを用いた SGS モデルが何らかの乱流構造を学習したと考えられる.

Figure.4 はすべての相関係数が壁の極近傍で下落する傾向を示している. 壁近傍について, wall unit $y^+ = y \times Re_\tau$ で示したものを Figure.5 に示す. チャンネル乱流の境界層では壁座標に応じて粘性底層 ($y^+ \leq 5$), バッファ層 ($5 \leq y^+ \leq 40$), 対数層 ($40 \leq y^+$) の 3 つの層に分けられる. 粘性底層はレイノルズ応力が無視できる程度で粘性応力が支配的な領域であり, 流れは層流の領域である. 粘性底層ではチャンネル内の平均速度は位置に比例する. 対数層はレイノルズ応力が支配的な領域であり, 平均速度分布は対数分布で与えられる. ここでは流れは乱流である. バッファ層は 2 つの層の遷移領域で乱流エネルギー生成が最も盛んに行われ乱流強度も大きい. これらの層との関係を見ると, ニューラルネットワークを用いたモデルは $y^+ \geq 10$ で相関係数が一定に近づき, 粘性底層の外側において良く回復が来ていることがわかる. 粘性底層では流れは層流のため, 乱流の情報は少なく, その強度も小さいことから学習が上手くいかないものと思われる.

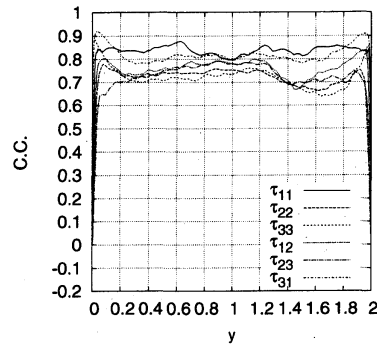


Figure 4: Correlation coefficients along wall normal direction

Training data	τ_{11}	τ_{22}	τ_{33}	τ_{12}	τ_{23}	τ_{31}
1st	0.796	0.696	0.750	0.760	0.731	0.826
2nd	0.802	0.711	0.693	0.753	0.734	0.784
3rd	0.835	0.715	0.743	0.834	0.750	0.832
4th	0.768	0.709	0.708	0.792	0.732	0.826
5th	0.816	0.732	0.747	0.815	0.703	0.839
Average	0.804	0.713	0.728	0.791	0.730	0.821

Table 1: Correlation coefficients in entire channel from various training data

3.2 空間分布

乱流の擾乱強度が最も大きくなる $y = 0.1$ においてニューラルネットワークを用いたモデルから帰される SGS 応力と DNS の SGS 応力 (τ_{11}, τ_{12}) のカラーコンターマップを Figure.6 に示す. DNS から計算される SGS 応力は主流方向に細長く分布していることがわかる. 図は規格化した値を示している. Figure.6 に示されるようにニューラルネットワークを用いて非常に近い分布が得られている. ニューラルネットワークを用いたモデルは出力する値が若干小さくなっている所が見られる. これは規格化の際に平均値がある程度の大きさになるようにするため一部をカットオフしてしまうことによる.

3.3 平均値

一様方向に関して平均を取った SGS 応力の値を示す. 平均値は相関係数では判断できないものである. DNS からのデータを見ると τ_{11} が一番大きな値を取っていることがわかる. また $\tau_{11}, \tau_{22}, \tau_{33}$ は全域で正の値を取っている. τ_{12} はその定義から乱流のレイノルズ応力と同じ分布を取っている. τ_{23}, τ_{31} はチャネル流の一様方向であり, 平均値は 0 となるためここでは省略する. Figure.7 におけるニューラルネットワークによる出力値は一定の範囲に限られるため, 出力値に規格化に用いた値を使い修正を行う. ニューラルネットワークの出力は全体的に DNS のものと非常に近いプロファイルであることがわかる. しかし, ニューラルネットワークは分布のパターンを学習しているが, 値を 0 から 1 までの範囲に割り当てているだけなので, 厳密には一致せず若干平行移動してずれた値を示している. そのため, 壁では SGS 応力の値が 0 に収束しているように見えるが滑りなしの条件を壁で厳密に満たさない. このことは実用化を考える際には注意が必要となる.

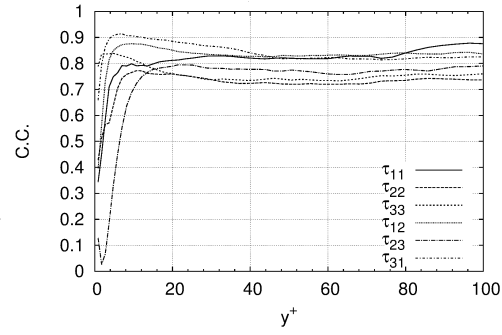


Figure 5: Correlation coefficients near wall region

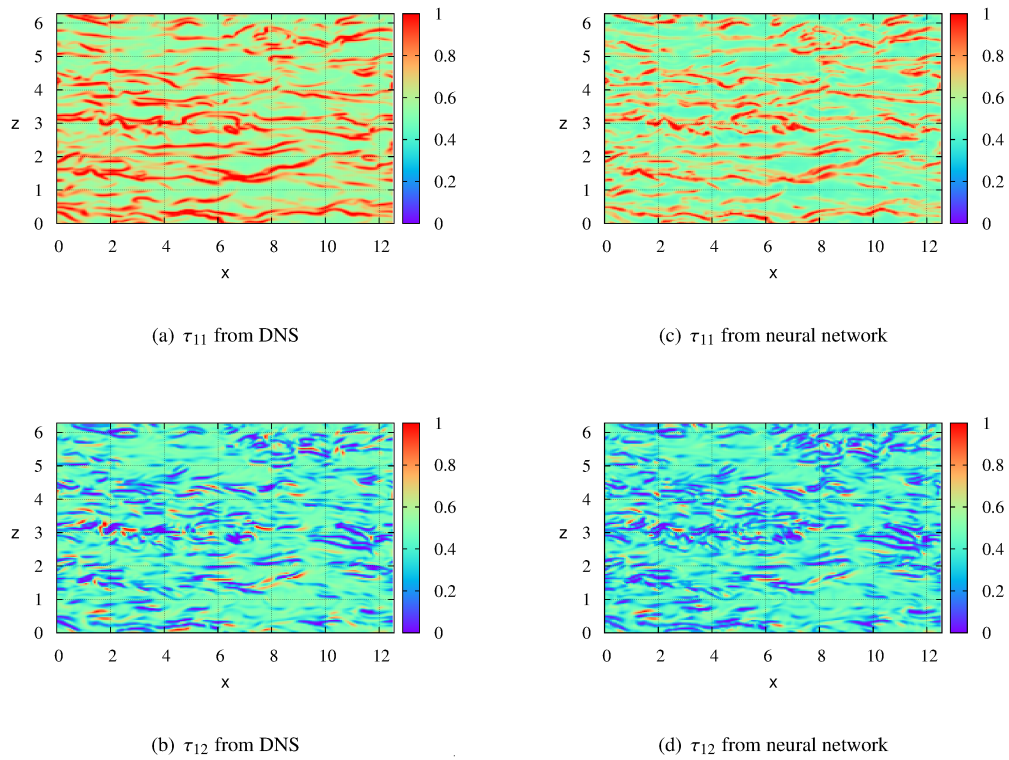


Figure 6: Spatial distributions of τ_{11} and τ_{12} at $y = 0.1$

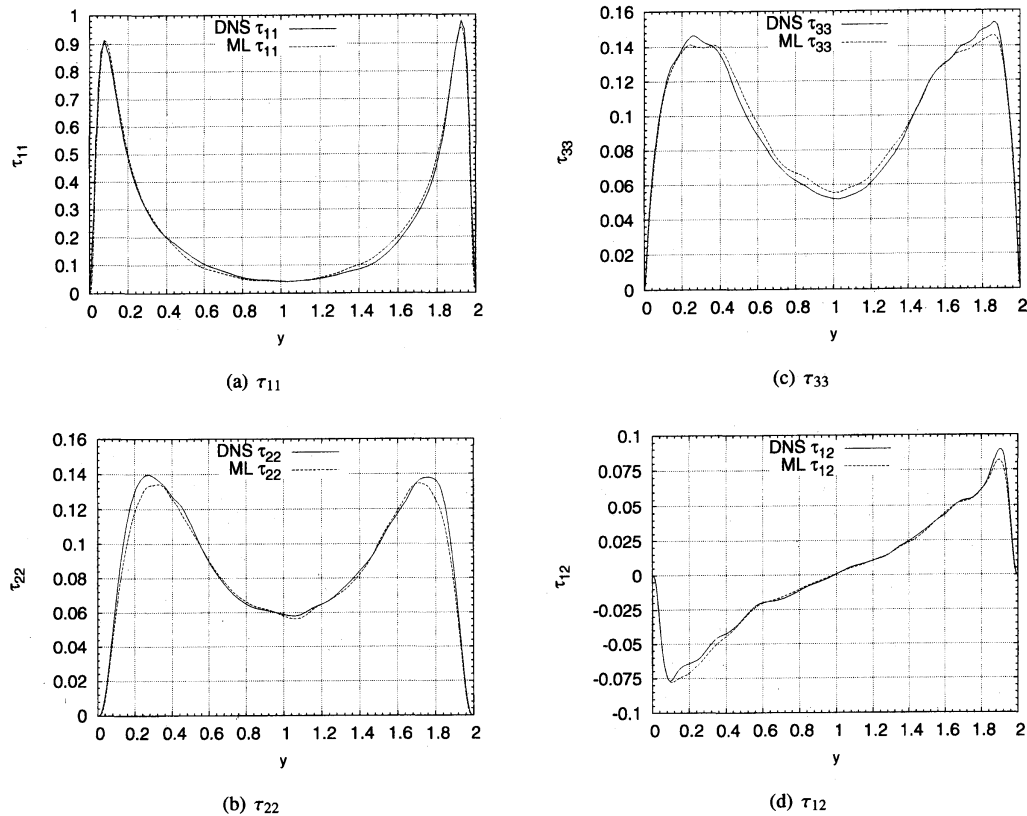


Figure 7: Mean value

4 まとめ

本研究は機械学習という自動的にモデリングを行う技術を使用して乱流モデルを構築することを目的とした。そのための前段階として SGS 応力を学習可能か否かを調べるために、ニューラルネットワークを用いて基礎的な壁乱流であるチャネル乱流における SGS 応力の回帰を試みた。学習はチャネル乱流の DNS を行うことで厳密な SGS 応力を抽出し、GS 上のデータと結び付けた。入力である GS 上のデータは従来の SGS モデルで使用される渦粘性モデルと既存のモデルを参考にし、速度勾配テンソル、壁面からの距離を入力とした。この回帰モデルはある座標の SGS 応力を求めるのにその点での物理量のみを用いている。

その結果、粘性底層に相当する壁近傍で相関係数の低下が見られたが、すべての SGS 応力成分について高い相関係数が得られた。この結果は学習データに依存しないものであり、学習を行ったニューラルネットワークで様々な時刻の SGS 応力を回帰出来た。壁近傍での相関係数の低下は粘性底層内では流れが層流のため、乱流の情報は少なく、その強度も小さいことから学習が上手くいかなかったものと思われる。

本研究ではチャネル乱流という指定した流れにおいてかつ固定レイノルズ数の SGS 応力について限定的であるがニューラルネットワークを用いて SGS 応力を回帰することができるという結果が得られた。

References

- [1] J.Smagorinsky, Mon.Weath. Rev, **91**, 99-164 (1963).
- [2] R. A. Clark, J. Fluid Mech., **91**(1979), 1-16
- [3] M. Germano, J. Fluid Mech., **238**, 325-36 (1992).