

ニューラルネットワークによる SGS 応力のモデリングと性能評価

SGS Stress Modeling by Neural Network and its Evaluation

- 宮崎 聡, 東北大院情報, 宮城県仙台市青葉区片平 2-1-1,
E-mail: miyazaki@dragon.ifs.tohoku.ac.jp
服部 裕司, 東北大流体研, 宮城県仙台市青葉区片平 2-1-1, E-mail:hattori@fmail.ifs.tohoku.ac.jp
Satoshi Miyazaki, GSIS, Tohoku University, 2-1-1 Katahira, Aoba-ku, Sendai, 980-8577, Japan
Yuji Hattori, IFS, Tohoku University, 2-1-1 Katahira, Aoba-ku, Sendai, 980-8577, Japan

Neural network (NN) is used to construct an improved Sub-Grid Scale (SGS) stress model for Large Eddy Simulation. Numerical data obtained by direct numerical simulation (DNS) of isotropic homogeneous turbulence are used for training NN and its evaluation (a priori test). We focus on how training data selection and the input variables affect the NN's performance. High correlation coefficients between the correct SGS stress obtained from DNS and that estimated by NN are obtained when the Hessian of the velocity is added to the input variables. Numerical simulation is also performed by using SGS models established by the NNs (a posteriori test). The result is compared with DNS data.

1. 緒言

Large Eddy Simulation (LES)は乱流計算の場面で広く利用されている手法である。LES では流れを Grid scale (GS)と Sub-grid scale (SGS)の2つに分け、大きなスケールであるGSのみを直接的に計算し、SGSの流れの影響をSGS応力としてモデル化する。現在までに数多くのSGS応力モデルが提案されているが、計算精度や計算コスト、数値的安定性などから万能なモデルは存在せず、新たなモデルの登場が期待されている。一方、近年のコンピュータの性能の向上に伴い、統計的機械学習が様々な分野で成果を挙げている。これらの手法の1つである教師あり学習では、未知のシステムの入力と出力の組から構成される教師データを利用して、そのシステムの挙動を自動的にモデリングすることができる。Gamahara and Hattori⁽¹⁾は機械学習装置としてニューラルネットワークを利用し、チャンネル流においてニューラルネットワークによるSGS応力の推定が可能であることを示した。本研究では、Gamaharaらと同様の手法を用い一様等方性乱流においてニューラルネットワークによるSGS応力の推定を行うことにより、SGS応力モデルに必要な入力変数についての知見を得ることや、新たな乱流モデルとして計算に組み込むことを目的とする。

2. 手法

2. 1. LES

LES ではGS 流れをフィルタ操作により求める。任意の物理量 f に対する一方向のフィルタ操作は(1)式となる。

$$f = \bar{f} + f', \quad \bar{f}(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} G(X) f(x - X) dX \quad (1)$$

ここで \bar{f} はGSの物理量、 f' はSGSの物理量を示す。 $G(X)$ はフィルタ関数であり、本研究ではGaussianフィルタを用い、フィルタ幅はDNSの格子幅の8倍とする。非圧縮性流体の支配方程式である非圧縮性Navier-Stokes方程式にこのフィルタ操作を施すと(2)式となり、LESではこの式を支配方程式として計算を行う。

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0, \quad \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \nu \Delta \bar{u}_i \quad (2)$$

$\tau_{ij} = \bar{u}_i \bar{u}_j - \bar{u}_i \bar{u}_j$ はSGS応力と呼ばれGSの物理量のみで表現することができない。このため、方程式を閉じるには、SGS応力をGSの物理量のみで表現するモデル化が必要となる。本研究ではこのSGS応力のモデル化にニューラルネットワークを利用する。

2. 2. ニューラルネットワーク

ニューラルネットワークは神経回路を模擬した構造を持つ機械学習装置であり現在幅広い分野で利用されている。本研究では教師あり学習に分類される、3層のフィードフォワードニューラルネットワークを用いる。Fig. 1にニューラルネットワークの模式図を示す。各ニューロンの出力は(3)式で与えられる。

$$X_i^n = f(w_{ij}^n X_j^{n-1} - h_i^n) \quad (3)$$

ここで X_i^n は出力、 w_{ij}^n は結合荷重、 h_i^n は閾値、 f は基底関数を示す。

本研究では、2層への出力の基底関数にシグモイド関数、3層への出力に線形関数を用いる。学習のアルゴリズムはLevenberg-Marquardt Backpropagation法を利用する。これらのアルゴリズムはMATLABに実装されているものを利用する。

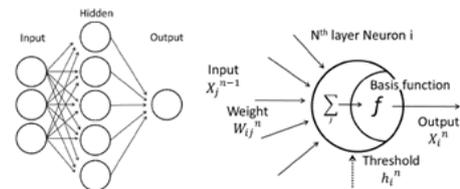


Fig. 1 Structure of neural network

2. 3. シミュレーションの条件

教師あり学習を行うためには、教師データとなる正確なSGS応力やGSの物理量が必要となる。本研究ではこれらの値を取得するために一様等方性乱流の直接数値計算(DNS)を行う。これによりGSの物理量やSGS応力を正確に算出することができる。DNSの格子数は 512^3 とし、Taylorマイクロスケールに基づくReynolds数は $R_\lambda = 167$ とする。空間離散化にはFourierスペクトル法、時間発展には4次精度Runge-Kutta法を利用する。またa posteriori testでは、DNSの計算コードにSGS応力項を加える形で、LESを行う。その際の格子幅は 128^3 とし、初期条件としてDNSにより得られる乱流場にフィルタ操作を施した流れを利用する。

2. 4. 学習条件

教師データとして同時刻の 5000 点の格子点のデータを利用する。この際に 2 つのデータ選択手法を試し、性能の比較を行う。1 つは連続する格子点のデータを選び出す手法 'C' である。SGS 応力の値の確率密度には大きな偏りが存在し、この手法で教師データを取得すると Fig. 2 'C' に示すように SGS 応力の値を複数の区間に分けた際に、区間ごとの教師データの数に大きな違いが生じる。そこで、この区間ごとに、同数の教師データを選び出す手法 'U' を 2 つ目の手法とする。ニューラルネットワークの入力変数は Gamahara らの先行研究で有効性が示されている速度勾配テンソルに加え Table. 1 に示す計 4 つのパターンを試す。出力は τ_{11} , τ_{12} を利用し学習を行う。



Fig. 2 Histograms of the training data

Table. 1 Input variables for τ_{11} , τ_{12}
() inputs are added when τ_{12} is estimated.

Name	D	DD	G	GG
Input	$\partial_j \bar{u}_i$	$\partial_j \bar{u}_i, \partial_j \partial_k \bar{u}_i$	$\partial_i \bar{u}_1, \partial_i \bar{u}_2$	$\partial_i \bar{u}_1, \partial_i \partial_j \bar{u}_1, \partial_i \bar{u}_2, \partial_i \partial_j \bar{u}_2$

2. 5. 性能評価

性能評価指標の一つとして、DNS から得られた正確な SGS 応力とニューラルネットワークにより推定した値の相関係数を用いる。この際に利用する DNS のデータは学習に利用した時刻のデータと相関のない他の時刻のデータである。また入力変数を入れ替えることにより、 τ_{11} により学習したニューラルネットワークを用いて τ_{22} , τ_{33} の推定を行い、それらの値の平均値を性能評価指標として用いる。非対角成分についても同様の調査を行う。

3. 結果

3. 1. 教師データ選択法

Table. 2 に教師データ選択法に注目した a priori test の結果を示す。この調査では、入力変数を $\partial_j \bar{u}_i$ とする。その結果、対角成分と非対角成分の両方で 'U' の手法で学習を行ったニューラルネットワークが 'C' の手法を利用したものと比較して高い相関を示し、'U' の手法がニューラルネットワークの性能向上のために有用であることが分かる。このため以降の調査では、'U' の手法によってニューラルネットワークの学習を行う。Fig. 3 は縦軸をニューラルネットワークによる推定値、横軸を DNS による正確なモデル値をとった結合確率密度分布である。二つの手法を比較すると 'U' の手法を利用することにより特に SGS 応力の絶対値の大きい範囲で推定性能が向上していることが分かる。一方、'U' の手法を用いると対角成分の SGS 応力の値を大きく推定する傾向となる。

Table. 2 Training data dependence of the C.C.

Method	C	U
Diagonal parts	0.75	0.82
Off-diagonal parts	0.58	0.88

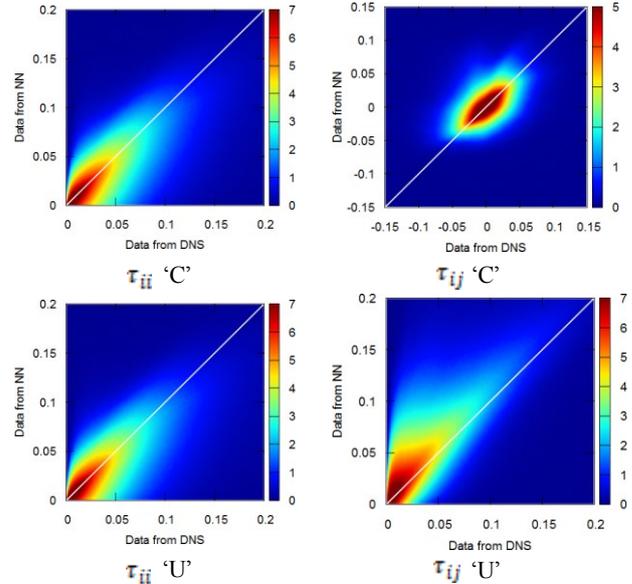


Fig. 3 Joint P.D.F. of SGS stress

3. 2. 入力変数

Table. 3 は入力変数に着目した a priori test の結果である。流速の一階微分のみを入力とする D や G のニューラルネットワークにおいても高い相関が得られているが、入力変数に流速の二階微分を加えることにより、さらに高い相関が得られることが分かる。また D に対して G, DD に対して GG において、より高い相関が得られることから、 τ_{11} の推定には \bar{u}_1 , τ_{12} の推定には \bar{u}_1, \bar{u}_2 が重要な役割を果たしているといえる。この入力の特徴は、フィルタ操作を微分操作に置き換えた際のスケール相似則モデルや、Gradient モデルなどに一致する。Yeo and Bedford⁽²⁾⁽³⁾ や Leonard⁽⁴⁾ は Gaussian フィルタによる SGS 応力が (4) 式で表現できることを示した。

$$\overline{ab} - \bar{a}\bar{b} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\Delta^{2n}}{n!} \partial_x^n \bar{a} \partial_x^n \bar{b} \quad (4)$$

この結果から、ニューラルネットワークは、それらのモデルに近いモデルを構成していると考えられる。本研究では (4) 式を $n = 2$ の項までを利用して算出した SGS 応力をニューラルネットワークによるモデルの比較対象として利用し Extended Gradient モデルと呼ぶ。このモデルにより得られる相関係数は、ニューラルネットワークによるモデルを上回る。Fig. 4 はニューラルネットワークと Extended Gradient モデルから得られる SGS 応力を DNS による SGS 応力と比較した結合確率密度分布である。Fig. 3 と比較すると二階微分を入力として加えることにより、ニューラルネットワークの性能が向上することが分かる。また、Extended Gradient モデルは SGS 応力の対角成分を DNS と比較して小さく算出するが、ニューラルネットワークによるモデルではその偏りが存在しないことが分かる。Fig. 5 は SGS 応力の平面分布である。D と DD を比較すると DD がより DNS の SGS 応力分布に近く、このことから二階微分の入力を加えることの優位性が示される。

Table. 3 Input variable dependence of the C.C.

Name	D	DD	G	GG	Ex. Grad.
Diagonal parts	0.82	0.97	0.93	0.98	0.99
Off-diagonal parts	0.88	0.96	0.90	0.97	0.99

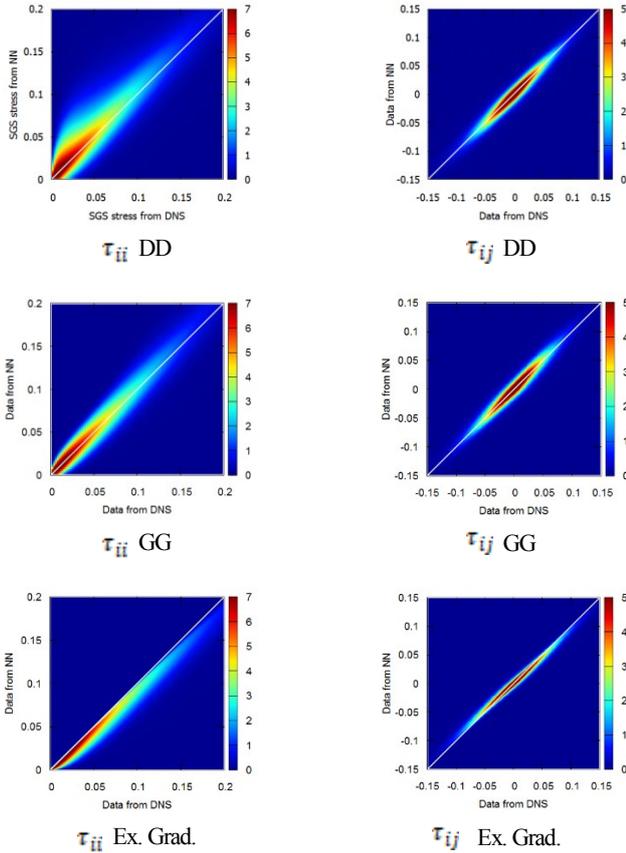


Fig. 4 Joint P.D.F. of SGS stress

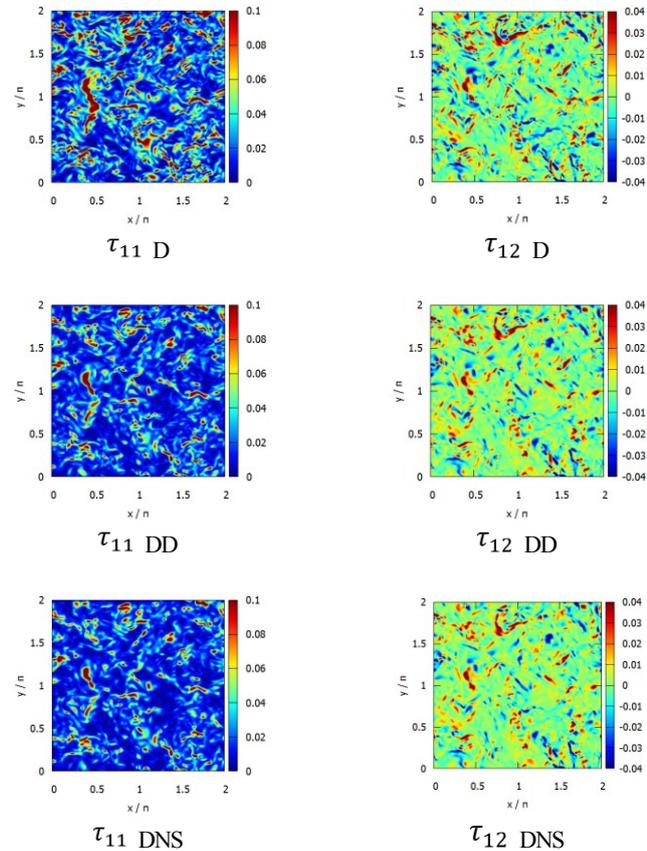


Fig. 5 Spatial distribution of SGS stress

3. 3. a posteriori test

a priori test において最も高い相関を示した, GG のニューラルネットワークを利用して, LES 計算を行う. 積分特性長に基づく eddy turnover time の 2~3 倍の時間, 定常流の計算を行い計算終了時点でのエネルギースペクトルや渦度の確率密度分布, 渦度の平面分布を DNS と比較する. Fig. 6 に DNS と今回の LES エネルギースペクトルを示す. ニューラルネットワークによるモデルは, $k=16$ 付近で DNS によるスペクトルと相違が見られるものの Kolmogorov の $-5/3$ 乗則に沿うスペクトルを持つことが分かる. また, Fig. 7 に示す渦度の確率密度分布からニューラルネットワークによるモデルと DNS の結果にフィルタ操作を行い算出した渦度の確率密度分布が, ほぼ一致することがわかる. 最後に Fig.8 に示す DNS にフィルタ操作を施した際の渦度とニューラルネットワークによるモデルの LES から得られた渦度の平面分布を比較すると, 値の存在確率は同様であるが, 渦構造の長さに着目した際に違いが存在することが分かる.

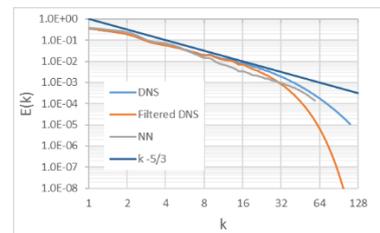


Fig. 6 Energy spectrum

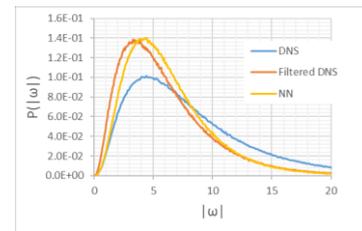


Fig. 7 P.D.F. of vorticity

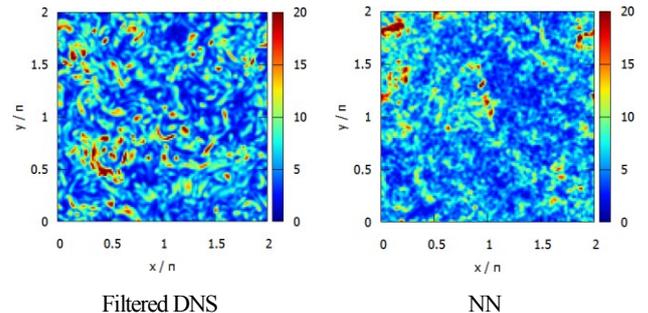


Fig. 8 Vorticity distribution

4. 結言

本研究では SGS 応力モデルに必要な入力変数についての知見を得ることや, 新たな乱流モデルとして計算に組み込むことを目的として, ニューラルネットワークによる SGS 応力の推定や作成したモデルを利用した LES 計算を行った. その結果 SGS 応力の推定には速度勾配テンソルを入力として用いることが有用であり, 流速の二階微分を加えることにより性能が向上することが分かった. また入力変数の一部を減らす調査から, ニューラルネットワークが構成するモデルには Gradient モデルや, その発展系のモデルとの関連が推測される. さらに, 本研究ではニューラルネットワークにより構成したモデルを用いて LES 計算を行った. その結

果, ニューラルネットワークに基づくモデルが, エネルギースペクトルや, 渦度の確率密度分布を再現することが分かった. 今後, 更なる統計量の取得を行い DNS の結果や既存の SGS 応力モデルとの比較を行っていく. また今回作成したニューラルネットワークによる LES は, 格子数を 512^3 に増やして計算を行ったところ, 高波数成分の減衰が不十分であり, 安定的な計算が不可能となった. ニューラルネットワークによるモデルが安定的に計算できるようにするための手法についても今後検討していく必要がある.

参考文献

- (1) M. Gamahara, Y. Hattori, *Phys. Rev. Fluids* **2**, 054604 (2017), 1-20.
- (2) W. K. Yeo, Ph.D. thesis, Ohio State University, (1987).
- (3) W. K. Yeo and K. W. Bedford in *Computational methods in flow analysis*, (ed. H. Niki & M. Kawahara), pp. 844-851.
- (4) A. Leonard, *35th Aerospace Sciences Meeting & Exhibit* (1997), AIAA Paper No. 97-0204.