

# オートエンコーダを用いたチャネル乱流の機械学習

Machine learning of turbulent channel flows using autoencoders

- 中村 太一, 慶大, 横浜市港北区日吉 3-14-1  
 深見 開, 慶大院, 横浜市港北区日吉 3-14-1  
 長谷川 一登, 慶大院, 横浜市港北区日吉 3-14-1  
 村田 高彬, 慶大院, 横浜市港北区日吉 3-14-1  
 難波江 佑介, 慶大院, 横浜市港北区日吉 3-14-1  
 深瀧 康二, 慶大, 横浜市港北区日吉 3-14-1, E-mail : fukagata@mech.keio.ac.jp
- Taichi NAKAMURA, Keio University, Hiyoshi 3-14-1, Kohoku-ku, Yokohama 223-8522  
 Kai FUKAMI, Keio University, Hiyoshi 3-14-1, Kohoku-ku, Yokohama 223-8522  
 Kazuto HASEGAWA, Keio University, Hiyoshi 3-14-1, Kohoku-ku, Yokohama 223-8522  
 Takaaki MURATA, Keio University, Hiyoshi 3-14-1, Kohoku-ku, Yokohama 223-8522  
 Yusuke NABAE, Keio University, Hiyoshi 3-14-1, Kohoku-ku, Yokohama 223-8522  
 Koji FUKAGATA, Keio University, Hiyoshi 3-14-1, Kohoku-ku, Yokohama 223-8522

We use a convolutional neural network autoencoder (CNN-AE) to establish a machine learning based reduced order model (ML-ROM) for three-dimensional turbulent flow. As a preliminary exam, a minimal turbulent channel flow at  $Re_\tau = 110$  is considered. The reconstructed flows with the CNN autoencoder show reasonable agreement with the DNS results though the accuracy falls with smaller latent vector size. We also examine the influence of pressure field as the input and output attributes. The current study suggests the possibility of extending the ML-ROM for three-dimensional turbulent flow by unifying some machine learning models which can follow a temporal evolution of latent vector obtained from the present CNN-AE.

## 1. 背景及び目的

強い非線形を持つ乱流現象の理解や効果的な流れの制御手法の確立のため, 近年 Reduced Order Model (ROM) が注目されている<sup>(1)(2)</sup>. 従来の ROM の手法として, 固有直交分解<sup>(3)</sup> や動的モード分解<sup>(4)</sup> などが用いられているが, これらの手法は線形理論に基づいたものであり, 乱流を始めとする強い非線形現象への適用を考慮した場合, 非線形性を加味した ROM の確立は重要である.

近年その第一歩として, 機械学習に基づく ROM (ML-ROM) に注目が集まっている. 特に, 非線形な活性化関数を持つニューラルネットワークを用いることで, データから特徴量の抽出を試みるケースがいくつか報告されている. 長谷川ら<sup>(5)</sup> は, 2次元円柱周りの流れにおいて, 機械学習モデルがレイノルズ数依存性を獲得することが可能であることを示した. また, Murata et al.<sup>(6)</sup> は, 内部の可視化構造を持つ ML-ROM を用いて得た非線形モードが, POD モードに対し同じ低次元モード数においてエネルギー再現率が高いことを示した. これらの研究は, ROM における機械学習モデル内部の非線形構造の有効性を示しているが, 対象としているのはいずれも 2次元層流であり, 適用用途が限られている.

以上の背景から, 本研究では, ML-ROM の 3次元乱流場への適用の可能性を探るべく, 前段階としてオートエンコーダ型の Convolutional neural network (CNN autoencoder) を構築し, 流れの低次元化を行う. その過程で, 入力する訓練データのサイズ, および, 低次元場のサイズが異なる複数のモデルを作成し, モデルに対する統計的評価を行う.

## 2. 理論

### 2.1 訓練データ

本研究では, 3次元ミニマルチャネル乱流<sup>(7)</sup> を対象とする. 訓練データは, 直接数値シミュレーション (DNS) を用いて作成する<sup>(8)</sup>. 支配方程式は, 非圧縮性の連続の

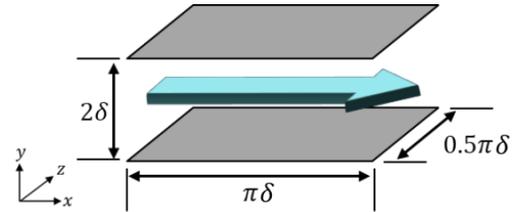


Fig. 1: Computational domain.

式およびナビエ・ストークス方程式,

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla p + \frac{1}{Re_\tau} \nabla^2 \mathbf{u}, \quad (2)$$

である. ここで,  $\mathbf{u}$  および  $p$  は, それぞれ速度ベクトルおよび圧力である. 全ての物理量は動粘性係数  $\nu^*$ , 摩擦速度  $u_\tau^*$ , チャネル半幅  $\delta^*$  により無次元化されている. なお,  $(\cdot)^*$  は有次元量を表す. 本研究では, 摩擦レイノルズ数  $Re_\tau = u_\tau^* \delta^* / \nu^* = 110$  とする. 計算領域は Figure 1 に示す通り,  $(L_x \times L_y \times L_z) = (\pi\delta \times 2\delta \times 0.5\pi\delta)$ , 格子数は  $(N_x \times N_y \times N_z) = (32 \times 64 \times 32)$ , 時間刻み幅は  $\Delta t^+ = 3.85 \times 10^{-2}$  である. チャネル壁面での境界条件は, すべり無し条件を用いる.

本研究における, 各々の瞬時場間の時間幅は  $100\Delta t^+ = 3.85$  であり, 10000 枚を訓練データとして使用する. また入力成分として, 本研究ではチャネル乱流における主流方向速度の確率密度分布を考慮し<sup>(9)</sup>, 変動量  $u'_i$  および  $p'$  を使用する.

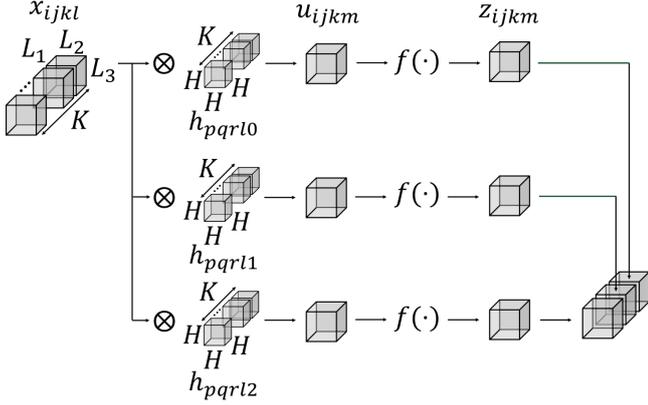


Fig. 2: Schematic of convolutional layer.

## 2.2 Convolutional Neural Network(CNN)

Convolutional neural network (CNN)<sup>(10)</sup> は、画像認識の分野で用いられる機械学習手法の 1 つであり、Multi-layer perceptron<sup>(11)</sup> とは異なり、入力データの局所的な構造をフィルタを介して考慮することができる、近年流体力学の分野でも活用され始めている<sup>(9)(12)</sup>。

CNN は畳み込み層 (Figure 2) とプーリング層の 2 種類の層から構成される。Figure 3 にバイアスを除いた畳み込み演算の概略図を示す。畳み込み層は局所的な特徴を抽出する層であり、

$$u_{ijkm} = \sum_{l=0}^{L-1} \sum_{p=0}^{H-1} \sum_{q=0}^{H-1} \sum_{r=0}^{H-1} x_{i+p,j+q,k+r,l} h_{pqrtl} + b_m, \quad (3)$$

で表される畳み込み演算を行う。畳み込み層に入力される  $L_1 \times L_2 \times L_3 \times K$  のデータに対して、データ点をインデックス  $(i, j, k, l)$  で表し、点  $(i, j, k, l)$  における値を  $x_{ijkl}$  と表す。  $h_{pqrtl}$  は、畳み込み層における  $m$  個の  $H \times H \times H \times L$  のフィルタを表し、  $b_m$  はバイアスを表す。  $u_{ijkm}$  は畳み込み演算により出力される 3 次元データの  $(i, j, k, m)$  成分である。畳み込み演算の出力は、その後活性化関数  $f(\cdot)$  により、

$$z_{ijkm} = f(u_{ijkm}), \quad (4)$$

とすることで畳み込み層の出力となる。通常、単調増加する非線形関数が活性化関数として使用される。本研究では活性化関数として、深層学習における勾配消失問題など、重みの更新に関する問題へのロバスト性があることが知られている、Rectified linear unit (ReLU) を使用する<sup>(13)</sup>。一方、プーリング層は次元の縮約および拡大に使用され、本研究では局所部の最大値を抽出する Max pooling および、局所部の値を高次データにコピーする Upsampling を用いる。

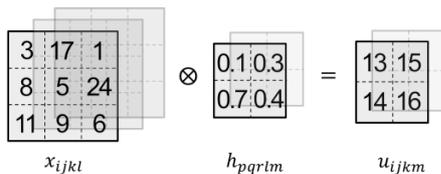


Fig. 3: Illustration of the convolutional operation.

Case	Attributes	$\eta_c$	Latent vector
VP1	$\mathbf{u}', p'$	0.125	(16, 32, 16, 4)
VP2	$\mathbf{u}', p'$	$1.56 \times 10^{-2}$	(8, 16, 8, 4)
VP3	$\mathbf{u}', p'$	$1.95 \times 10^{-3}$	(4, 8, 4, 4)
V1	$\mathbf{u}'$	0.125	(16, 32, 16, 3)
V2	$\mathbf{u}'$	$1.56 \times 10^{-2}$	(8, 16, 8, 3)
V3	$\mathbf{u}'$	$1.95 \times 10^{-3}$	(4, 8, 4, 3)

Tab. 1: The detail of each model in the present study.

## 2.3 CNN autoencoder

CNN autoencoder<sup>(14)</sup> は、教師なし学習手法の 1 つであり、入出力に同じデータ  $\mathbf{q}$  を用意することから、

$$\mathbf{q} \approx \mathcal{F}(\mathbf{q}; \mathbf{w}), \quad (5)$$

と定式化される。ここに  $\mathcal{F}$  は機械学習モデル、  $\mathbf{w}$  は重みである。CNN autoencoder は内部でデータの次元を縮約する構造を持っており、低次元化に用いられる部分を Encoder  $\mathcal{F}_e$ 、高次元化に用いられる部分を Decoder  $\mathcal{F}_d$  と呼ぶ。したがって、低次元化マップ  $\boldsymbol{\eta}$  を用いれば、

$$\boldsymbol{\eta} = \mathcal{F}_e(\mathbf{q}), \quad \mathbf{q} = \mathcal{F}_d(\boldsymbol{\eta}), \quad (6)$$

と定式化される。つまり、機械学習モデルの出力  $\mathcal{F}(\mathbf{q})$  が入力  $\mathbf{q}$  と近い場合、  $\boldsymbol{\eta}$  は高次元データ  $\mathbf{q}$  の低次元マップであると言える。本研究では、3 つのサイズのフィルタを持つ Multi-scale CNN<sup>(15)</sup> と、層が深い場合の勾配消失や勾配発散を防ぐ skip connection<sup>(16)</sup> を組み合わせた hybrid Skip-Connection/Multi-Scale (SC/MS) model を機械学習モデルとして使用する。また、類似のコンセプトは Fukami et al.<sup>(12)</sup> による 2 次元乱流の機械学習超解像に使用されており、その有用性が示されている。Figure 4 に hybrid SC/MS model の概略図を示す。入力データは、SC モデルと MS モデルのそれぞれで畳み込み、およびプーリングが施され、低次元化される。低次元化されたデータは再び SC モデルと MS モデルのそれぞれにおいて入力と同じ次元まで拡張される。

本研究では、入力として、流れ場の速度および圧力の変動成分 ( $u', v', w', p'$ ) を用いる場合 (Case VP) と、速度の変動成分のみ ( $u', v', w'$ ) を用いる場合 (Case V) を検討し、圧力成分が出力に与える影響を調査する。また、これら 2 つのケースに対して、低次元場のサイズを 3 種類、計 6 種類のモデルを作成する。各モデルの入力サイズは  $(N_x, N_y, N_z, N_\phi)$  であり、ここで  $N_\phi$  は物理量の次元数を示し、速度変動モデル (Case V1, V2, V3) では 3、圧力を含んだモデル (Case VP1, VP2, VP3) では 4 である。ケースごとの入力データの物理量、低次元場サイズ、高次元場に対する低次元場サイズの割合  $\eta_c$  を Table 2 に示す。ここで  $\eta_c$  は、

$$\eta_c = \frac{N_x^\# \times N_y^\# \times N_z^\# \times N_\phi^\#}{N_x \times N_y \times N_z \times N_\phi}, \quad (7)$$

と定義される。  $\#$  は低次元場におけるサイズを示す。本研究では、DNS により準備された 10000 枚の瞬時場のうち、70% を Training data, 30% を Validation data として学習に用いる。また、誤差関数には  $L_2$  ノルムを使用する。したがって、  $\mathbf{w}$  は、

$$\mathbf{w} = \operatorname{argmin}_{\mathbf{w}} \|\mathbf{q}_{\text{DNS}} - \mathcal{F}(\mathbf{q}_{\text{DNS}}; \mathbf{w})\|_2^2, \quad (8)$$

と表され、重み  $\mathbf{w}$  に関する最適化問題に帰着する。ここで、  $\mathbf{q}_{\text{DNS}}$  は DNS から得られた入出力データである。

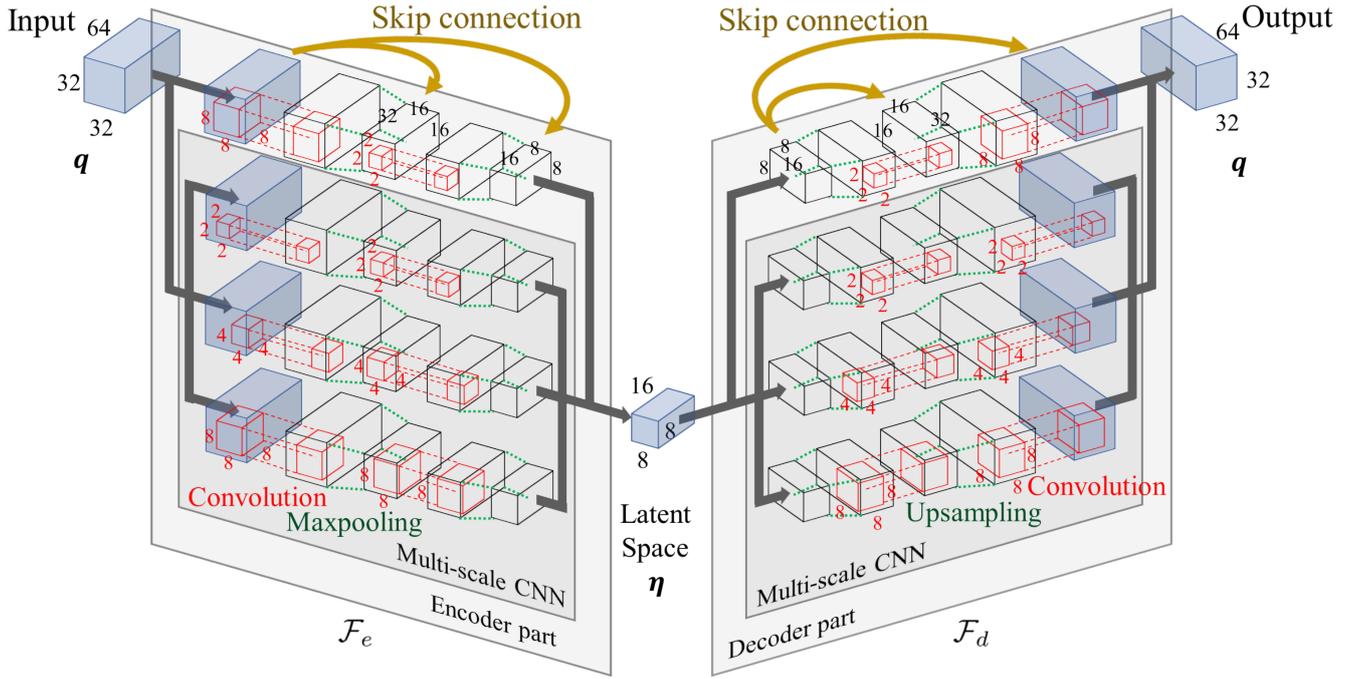


Fig. 4: Schematic of the hybrid Skip-Connection Multi-Scale (SC/MS) model.

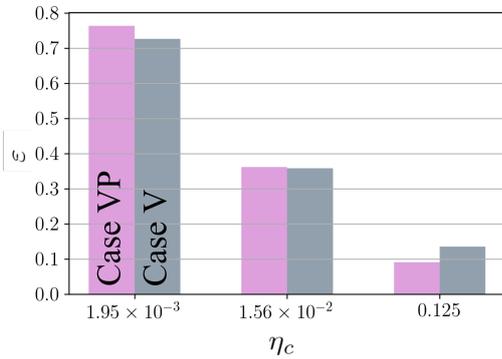


Fig. 5: The  $L_2$  error norms of Case V and VP with various  $\eta_c$ .

### 3. 結果

#### 3.1 入力における物理量の選択

まず、全てのモデルにおける、出力の速度変動成分  $u_i'$  と入力から計算された  $L_2$  エラーノルム  $\varepsilon = \|\mathbf{q}_{ML} - \mathbf{q}_{DNS}\|_2^2 / \|\mathbf{q}_{DNS}\|_2^2$  を Figure 5 に示す。ここで Case V は、速度変動成分を用いたモデル、Case VP は、Case V に圧力変動成分が加わったモデルである。Figure 5 より、双方のモデルにおいて  $\eta_c$  を小さくすると誤差が大きくなる事が確認できる。これは低次元 POD モードによる再構築エラーが高次元のそれよりも大きくなることと一致している<sup>(17)</sup>。また入力成分で比較すると、 $\eta_c = 0.125$  の場合は Case VP の誤差が Case V よりも小さくなっているが、 $\eta_c = 1.95 \times 10^{-3}$  ではこれが逆転し、Case VP の方が誤差が大きくなっている。これより  $\eta_c$  が大きい場合は、圧力成分  $p'$  が速度成分の再構築に何らかの情報を与えていると考えられる。

Figure 6 に、 $\eta_c = 0.125$  のモデルから出力された速度成分の RMS 値を示す。灰色の線は入力に用いた DNS データから算出されたものである。 $u_{rms}^+$  で比較すると、Case V1 および VP1 で大きな差はないことが分かる。一方  $v_{rms}^+$  や  $w_{rms}^+$  については、Case V1 よりも Case VP1 の方がやや DNS に近づいている。

以上より、 $\eta_c$  が大きい場合（即ちデータサイズの圧縮率が低い場合）は Case V よりも Case VP の方が予測性能が高いことが確認された。しかし前述の通り、 $\eta_c$  の低下（圧縮率の上昇）に伴って、その差は小さくなっていくことが確認される。今後  $\eta_c$  の低下を目指すことを考えると、計算コストの小さい Case V を選択することが適切と考えられる。従って、以下のモデルでは Case V を使用する。

#### 3.2 低次元場サイズへの依存性

次に、低次元場サイズを変えた場合の予測性能の評価を行う。Figure 7 に、 $y^+ \approx 20$  における  $x-z$  断面の速度の変動成分を DNS と比較した結果を示す。全体的な傾向として、 $\eta_c$  が小さくなるほど、入力の DNS データからの差異が大きくなる。これは、 $\eta_c$  が小さすぎると畳み込みの過程で流れの情報が過度に失われるためである。主流方向成分  $u'$  に注目すると、 $\eta_c$  の低下に伴って DNS よりも値が低く見積もられるが、 $\eta_c$  に関わらず比較的 DNS データの傾向を捉えていると言える。一方、 $v'$  および  $w'$  に関しては、 $\eta_c$  の低下に伴って DNS データとは異なる特徴を復元している。これはチャネル流における主流方向成分が他の 2 つの成分に比べてより支配的な影響を持つことが原因として挙げられる。

次に、各速度成分の RMS 値、および、主流方向エネルギースペクトルを  $\eta_c$  ごとに比較した結果を Figure 8 に示す。Figure 8(a), (b), (c) より、CNN autoencoder はピークの位置など、DNS データの特徴をおおまかに捉えていることが分かる。 $\eta_c$  ごとに比較すると、Case V3 の場合が他の 2 ケースと比較して DNS からの誤差が大きくなっている。また、Figure 8(a) において、 $\eta_c$  の減少に伴い  $y^+ \approx 15$  付近が DNS よりも低く見積もられてい

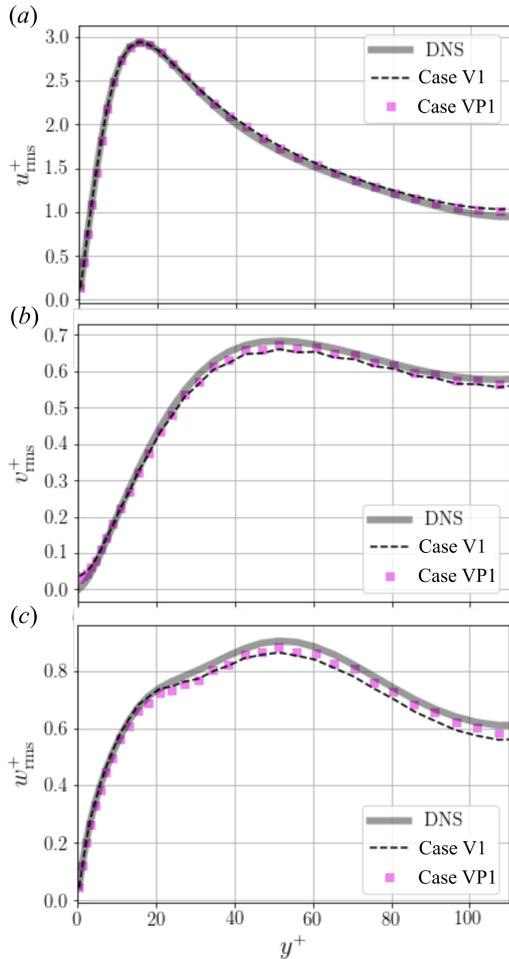


Fig. 6: Root mean squared value of velocity fluctuations  $u_{i,rms}^+$  with  $\eta_c = 0.125$ : (a)  $u_{rms}^+$ ; (b)  $v_{rms}^+$ ; (c)  $w_{rms}^+$ .

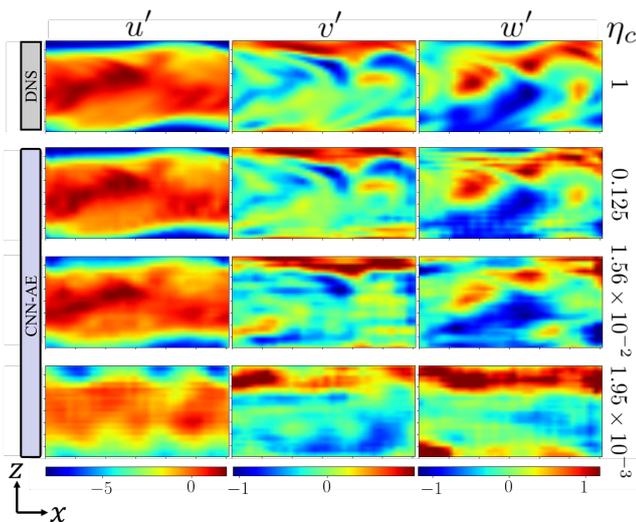


Fig. 7: The comparison between the velocity fluctuations of DNS and that of CNN-AE. The decoded flow fields are shown in lower area.

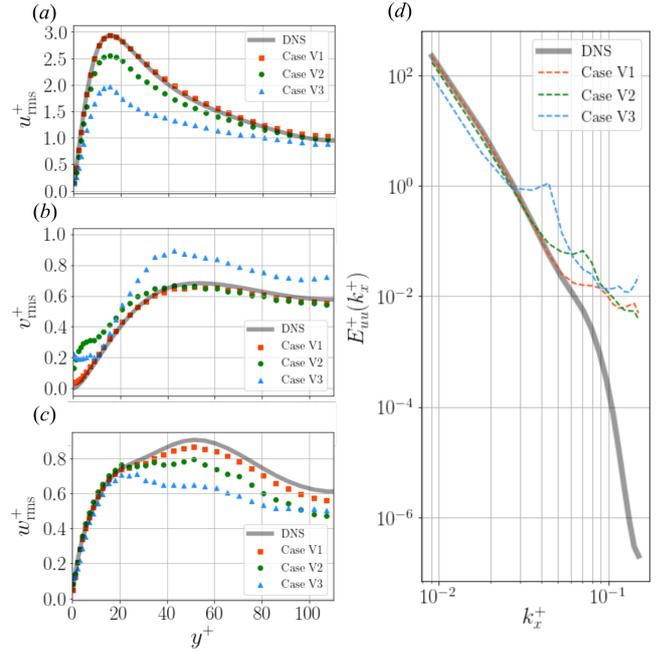


Fig. 8: Turbulence statistics with DNS and Case V: (a)  $u_{rms}^+$ ; (b)  $v_{rms}^+$ ; (c)  $w_{rms}^+$ ; (d) streamwise energy spectrum  $E_{uu}^+(k_x^+)$ .

る。これは、次元削減のために用いる Max pooling の過程で速度情報が失われたためと考えられる。

また、主流方向エネルギースペクトル  $E_{uu}^+(k_x^+)$  を Figure 8(d) に示す。図より、機械学習モデルによって低周波成分は再構築される一方、高波数部分においてエネルギーは大きく見積もられている。これは、Max pooling の過程で高周波成分が失われるためであると考えられる。また、Case V3 は、低波数部分においても DNS との誤差が認められる。したがって、エネルギーの観点から、SC/MS モデルを用いる場合、 $\eta_c = 1.95 \times 10^{-3}$  は低次元写像場として小さいことが確認される。

#### 4. 結論

本研究では、オートエンコーダ型 CNN の作成を行い、3次元乱流のための機械学習縮約モデル作成の第一歩として、3次元ミニマルチャネル乱流の低次元化を行った。高次元場に対する低次元場サイズの割合が大きい場合は DNS データと統計量がよく一致し、速度のみを入力とするよりも圧力と速度の両方を入力の方が予測性能が高いことが示された。一方、高次元場に対する低次元場サイズの割合が小さい場合は予測が難しく、入力に圧力を含めても予測性能はほとんど変わらないことが分かった。今後は、モデルの構造を改良し、低次元場のサイズを小さくした場合でも高い予測性能を示す CNN autoencoder の構築を行う。また、構築された CNN autoencoder により低次元化された流れ場を Long short-term memory (LSTM) に入力することで、3次元乱流のための ML-ROM を構築する。

#### 参考文献

- (1) Taira, K., Brunton, S. L., Dawson, S. T. M., Rowley, C. W., Colonius, T., McKeon, B. J., Schmidt, O. T., Gordeyev, S., Theofilis, V., and Ukeiley, L. S., "Modal analysis of fluid flows: An overview," *AIAA J.*, Vol. 55, No. 12, (2017), pp. 4013–4041.
- (2) Taira, K., Hemati, M. S., Brunton, S. L., Sun, Y.,

- Duraisamy, K., Bagheri, S., Dawson, S., Yeh, C. A., “Modal analysis of fluid flows: Applications and outlook,” *AIAA J.*, (available only online) (2019).
- (3) Lumley, J. L., “The structure of inhomogeneous turbulent flows, in atmospheric turbulence and wave propagation,” eds. Yaglom, A. M. and Tatarski, V. I., Moscow, Nauka (1967), pp. 166–178L
  - (4) Schmid, P., “Dynamic mode decomposition of numerical and experimental data,” *J. Fluid Mech.*, Vol. 656 (2010), pp. 5–28.
  - (5) 長谷川, 深見, 村田, 深瀉, “機械学習を用いた円柱周り流れのレイノルズ数依存性の予測,” *ながれ* 38 (2019), pp. 81–84.
  - (6) Murata, T., Fukami, K., Fukagata, K., “Nonlinear mode decomposition with convolutional neural networks for fluid dynamics,” *J. Fluid Mech.*, (accepted) (2019).
  - (7) Jiménez, J., and Moin, P., “The minimal flow unit in near-wall turbulence,” *J. Fluid Mech.*, Vol. 225 (1991), pp. 213–240.
  - (8) Fukagata, K., Kasagi, N., and Koumoutsakos, P., “A theoretical prediction of friction drag reduction in turbulent flow by superhydrophobic surfaces,” *Phys. Fluids*, Vol. 18 (2006), 051703.
  - (9) Fukami, K., Nabae, Y., Kawai, K., and Fukagata, K., “Synthetic turbulent inflow generator using machine learning,” *Phys. Rev. Fluids*, Vol. 4 (2019), 064603.
  - (10) LeCun, Y. A., Bottou, L., Bengio, Y. and Haffner, P., “Gradient-based learning applied to document recognition,” *Proc. IEEE*, Vol. 86, No. 11 (1998), pp. 2278–2324.
  - (11) D. E. Rumelhart, G. E. Hinton, and R. J. Williams, “Learning representations by back-propagation errors,” *Nature*, Vol. 323, No. 533 (1986), pp. 533–536.
  - (12) Fukami, K., Fukagata, K., and Taira, K., “Super-resolution reconstruction of turbulent flows with machine learning,” *J. Fluid Mech.*, Vol. 870 (2019), pp. 106–120.
  - (13) Nair, V. and Hinton, E. G., “Rectified linear units improve restricted Boltzmann machines,” In Proceedings of the 27th International Conference on Machine Learning, Haifa, Israel (2010), pp. 807–814.
  - (14) Hinton, G. E., and Salakhutdinov., “Reducing the dimensionality of data with neural networks,” *Science*, Vol. 313 (2006), pp. 504–507.
  - (15) Du, X., Qu, X., He, Y., and Guo, D. “Single image super-resolution based on multi-scale competitive convolutional neural network,” *Sensors*, Vol. 18, No. 789, (2018), pp. 1–17.
  - (16) He, K., Zhang, X., Ren, S., and Sun, J. “Deep residual learning for image recognition”, In Proceedings of CVPR, (2016) pp. 770–778.
  - (17) Alfonsi, G. and Primavera, L., “The structure of turbulent boundary layers in the wallregion of plane channel flow,” *Proc. R. Soc. A*, Vol. 463, No. 2078 (2007), pp. 593–612.