

深層学習による粘弾性流体チャネル乱流の代理モデル構築

Construction of surrogate model for turbulent viscoelastic-fluid channel flow using deep learning

- 長町 厚志, 東理大院, 千葉県野田市山崎 2641, E-mail: 7518545@ed.tus.ac.jp
 塚原 隆裕, 東理大, 千葉県野田市山崎 2641, E-mail: tsuka@rs.tus.ac.jp
 Atsushi NAGAMACHI, Tokyo University of Science, Yamazaki 2641, Noda-shi, Chiba 278-8510
 Takahiro TSUKAHARA, Tokyo University of Science, Yamazaki 2641, Noda-shi, Chiba 278-8510

We tested artificial neural networks (ANNs) to predict conformation stress in a turbulent viscoelastic-fluid channel flow using deep learning in order to manage the numerical instability problem in DNS (Direct Numerical Simulation). We constructed two types of ANNs (multi-layer perceptron (MLP) and U-Net) which learned DNS dataset to predict the conformation stress from a given instantaneous field. Two kinds of ANN input data of either velocity or velocity gradient tensor were examined. The ANN predicted accurately the near-wall region in which coherent structures are dominant. The velocity gradient tensor was better than the velocity for the conformation-stress prediction. The MLP using the velocity gradient tensor achieved 0.6 of the correlation coefficient accuracy.

1. 序論

粘弾性流体は非ニュートン流体の一種であり, 水に少量のポリマーや界面活性剤を添加することで得られる粘性と弾性を持つ流体である. この種の流体は, 壁乱流において乱流摩擦抵抗を低減する効果を持つ⁽¹⁾ため工学的に重要であり, 実際に石油パイプラインや地域冷暖房システムにおける流体輸送の省エネルギー化に貢献している. しかし, 上記の抵抗低減効果や弾性乱流などの複雑な流動現象のメカニズムは未解明であるため, 水路実験に加えて FENE-P モデルや Giesekus モデルの構成方程式を用いた直接数値計算 (Direct Numerical Simulation: DNS) による研究が盛んにおこなわれている. さらに構成方程式に内在する数値不安定性のために, DNS が困難⁽²⁾という課題が依然として残っている.

上記の課題解決のため, 深層学習 (Deep Learning) の利用が考えられる. 深層学習は大量のデータを用いて予測モデルを構築し, 予測を行う統計的機械学習の一種であり, 画像認識や自然言語処理の分野で発展してきた⁽³⁾. 深層学習では人工ニューラルネットワーク (Artificial Neural Network: ANN) を予測器に用いることでデータから予測に必要な特徴を抽出し, 汎化性能の高い予測が可能となることから, 乱流予測やモデリングへの応用も進んでいる^(4,5). したがって, 深層学習を粘弾性流体に適用することで, 構成方程式の DNS 以外のアプローチによる流動現象解明と数値不安定性問題の回避が可能になると期待される.

本研究では, 粘弾性流体乱流の規範的な流れ場であるチャネル流れの DNS データを学習し, ANN 予測値と DNS 計算値の比較を行い, 構成方程式の代理モデルとなる ANN の予測可能性を検討する. ここで用いる ANN には, 教師あり学習法の多層パーセプトロン (multi-layer perceptron: MLP) と, 画像認識で用いられる U-Net の 2 種について調査した. 前報⁽⁶⁾では構成方程式によって求められる構成応力の時間微分などを入力として用いた予測を行った. 本報告では構成方程式代理モデルに向け, 構成方程式を用いずに運動量方程式によって求められる速度や速度勾配テンソルを入力として用いた予測結果への影響について議論する.

2. DNS データ

学習のため, 図 1 のようなチャネル乱流の瞬時場 DNS データベースを作成した. チャネル流れは一定圧力勾配下の平行平板間で十分発達した流れであり, 壁乱流における規範的な流れ場である. 本研究では先行研究が多く, 数値的に安定して乱流場を得られる摩擦レイノルズ数 $Re_\tau = 180$, 摩擦ワイゼンベルグ数 $Wi_\tau = 10$,

粘性比 $\beta = 0.9$ とした. 境界条件は壁面上で滑り無し, 主流方向 (x : x) とスパン方向 (z : z) に周期境界条件を設定した. 支配方程式は以下の連続の式, 運動量方程式, 及び Giesekus モデル⁽⁸⁾の構成方程式である. スタガード格子を用い, 壁面垂直方向 (x : y) の粘性項に二次精度 Crank-Nicolson 法, その他の項に 3 段 Runge-Kutta 法を用いて離散化を行った. 詳細な計算手法は Tsukahara et al.⁽⁹⁾のものを参照されたい. 計算領域はニュートン流体でみられるストリーク構造より十分大きい $L_x \times L_y \times L_z = 6.4\delta \times 2\delta \times 3.2\delta$ とし, 格子数は $64 \times 96 \times 64$ とした.

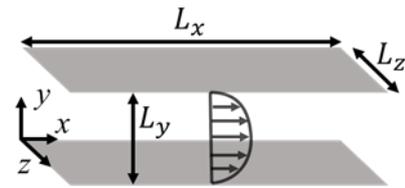


Fig. 1 Schematic of the channel flow field.

$$\frac{\partial u_i^+}{\partial x_i^*} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial u_i^+}{\partial t^*} + u_j^+ \frac{\partial u_i^+}{\partial x_j^*} = -\frac{\partial p^+}{\partial x_i^*} + \frac{\beta}{Re_\tau} \frac{\partial^2 u_i^+}{\partial x_j^{*2}} + \frac{1-\beta}{Wi_\tau} \frac{\partial c_{ij}}{\partial x_j^*} \quad (2)$$

$$\frac{\partial c_{ij}}{\partial t^*} = -u_k^+ \frac{\partial c_{ij}}{\partial x_k^*} + \frac{\partial u_i^+}{\partial x_k^*} c_{kj} - \frac{Re_\tau}{Wi_\tau} \left\{ c_{ij} - \delta_{ij} + \alpha (c_{ik} - \delta_{ik}) (c_{kj} - \delta_{kj}) \right\} \quad (3)$$

3. 深層学習の手法

本研究では, 入力と出力のセットのデータを ANN に学習させる教師あり学習で, 回帰問題を解く. 予測器には, 深層学習で用いられる最も基本的なモデルネットワークである MLP と, 画像のセマンティックセグメンテーションに用いられる U-Net⁽¹⁰⁾を用い, Adam⁽¹¹⁾により平均二乗誤差を最小化した.

入出力物理量の組み合わせを表 1 に示す。入力物理量には速度ベクトル $\mathbf{u}^{(n)}$ 3 成分または速度勾配テンソル $\nabla \mathbf{u}^{(n)}$ の 9 成分と構成応力 $c_{ij}^{(n)}$ 1 成分 (予測する成分における現時刻の値) を用い、1 タイムステップ (3.6×10^4 粘性時間) 後の構成応力 $c_{ij}^{(n+1)}$ 1 成分を予測 (出力) する。MLP (Case M0-M2) では同位置の物理量を入出力に用いることで、データから局所的に次時刻の予測を行う。一方、U-Net (Case U1-U2) では流路断面の瞬時速度場から同位置・同時刻の構成応力を予測するため空間的な情報を利用し予測する。ただし、すべての条件において z-score による正規化を行った。

Table 1 Input and output variables in each case.

Case	Network	Input	Output
M0	MLP	$c_{ij}^{(n)}, \nabla \mathbf{u}^{(n)}$	$c_{ij}^{(n+1)}$
M1	MLP	$\mathbf{u}^{(n)}$	$c_{ij}^{(n+1)}$
M2	MLP	$\nabla \mathbf{u}^{(n)}$	$c_{ij}^{(n+1)}$
U1	U-Net	$(\mathbf{u}^{(n)})_{xz}$	$(c_{ij}^{(n+1)})_{xz}$
U2	U-Net	$(\nabla \mathbf{u}^{(n)})_{xz}$	$(c_{ij}^{(n+1)})_{xz}$

MLP と U-Net の構成を図 2, 3 に示す。図 3 のように、U-Net は畳み込み層で低次元の特徴を得た後逆畳み込み層により高次元の出力を得るネットワークに、連結構造を加えたネットワークである。連結構造により、畳み込みで得た流れ場の局所的な構造に全体の空間情報を加えて予測することができるため、壁面からの距離で構造が変わるチャネル流れの予測に適していると考えられる。ただし、乱流の微細構造を捉えるため、プーリング層を使用しないネットワークとした。

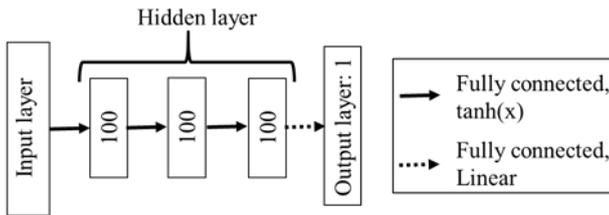


Fig. 2 Schematics of MLP. MLP has 3 hidden layers and each has 100 neurons.

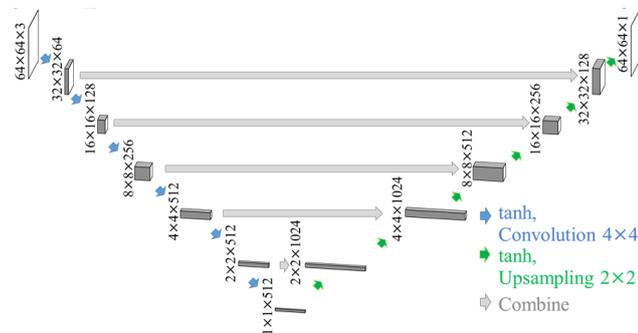


Fig. 3 Schematics of U-Net. U-Net for case U1 and U2 is shown, where the activation function is $\tanh(x)$.

4. ANN による予測結果

図 4-6 にそれぞれ $y^+ = 2.8$ (粘性底層 ($0 < y^+ \leq 5$)), $y^+ = 18.6$ (バッファ層 ($5 < y^+ < 60$)) と $y^+ = 90$ (対数領域 ($y^+ > 60$)) における c_{xx} の瞬時場を示す。図 4 から粘性底層では M1 を除く条件の ANN において DNS と構成応力分布が一致していることがわかる。特に粘性底層にみられるストリーク構造 (主流方向へ伸びる高

速・低速の領域) に起因する構成応力の筋状構造をよく再現していることがわかる。図 5 より、バッファ層では全ての条件で DNS の筋状構造を再現していることがわかる。対数領域においては図 6 より U1 と U2 のみ分布の傾向が一致し、壁面から離れるに連れ、予測が困難になることがわかった。

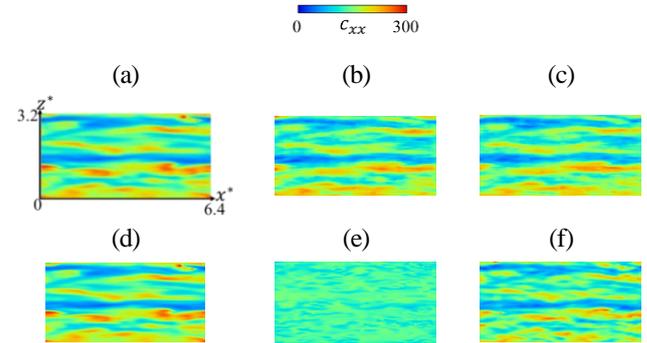


Fig. 4 Instantaneous c_{xx} field at $y^+ = 2.8$. (a) DNS. Case (b) U1, (c) U2, (d) M0, (e) M1 and (f) M2.

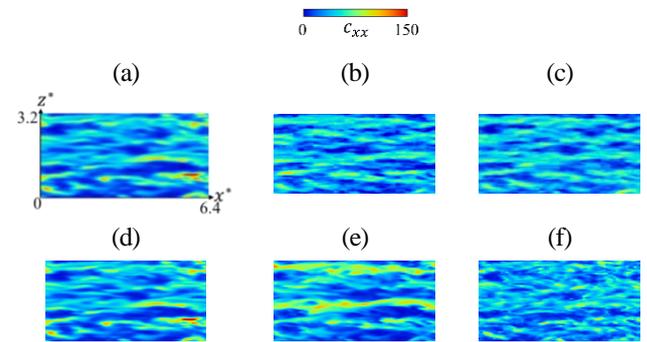


Fig. 5 Instantaneous c_{xx} field at $y^+ = 18.6$. (a) DNS. Case (b) U1, (c) U2, (d) M0, (e) M1 and (f) M2.

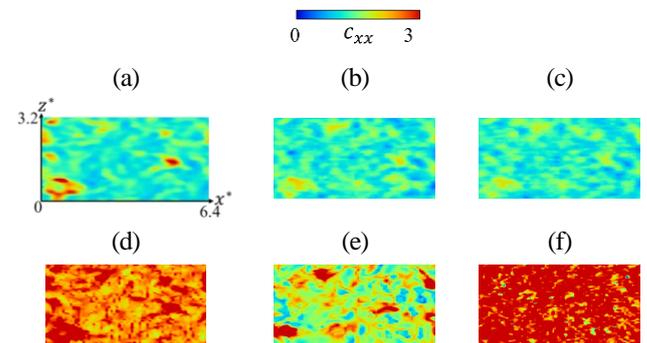


Fig. 6 Instantaneous c_{xx} field at $y^+ = 180$. (a) DNS. Case (b) U1, (c) U2, (d) M0, (e) M1 and (f) M2.

予測結果を定量的に評価するため、各壁面高さにおける構成応力の平均値を図 7 に、各壁面高さにおける DNS と ANN の構成応力場の相関係数 (Correlation Coefficient: C.C.) を図 8 に示す。図 7(a) より c_{xx} についてはどの条件、どの高さにおいても ANN の平均予測値は DNS に近い正確な値を示した。しかし、図 7(b)(c) を見ると c_{yy} については条件 M1 のみ DNS でみられる粘性底層及びバッファ層の平均構成応力を予測できず、0 に近い値を示した。 c_{xz} については全条件でバッファ層より外側で予測平均値が DNS から離れる傾向が見られ、M1 が最も DNS と異なる値を予測した。

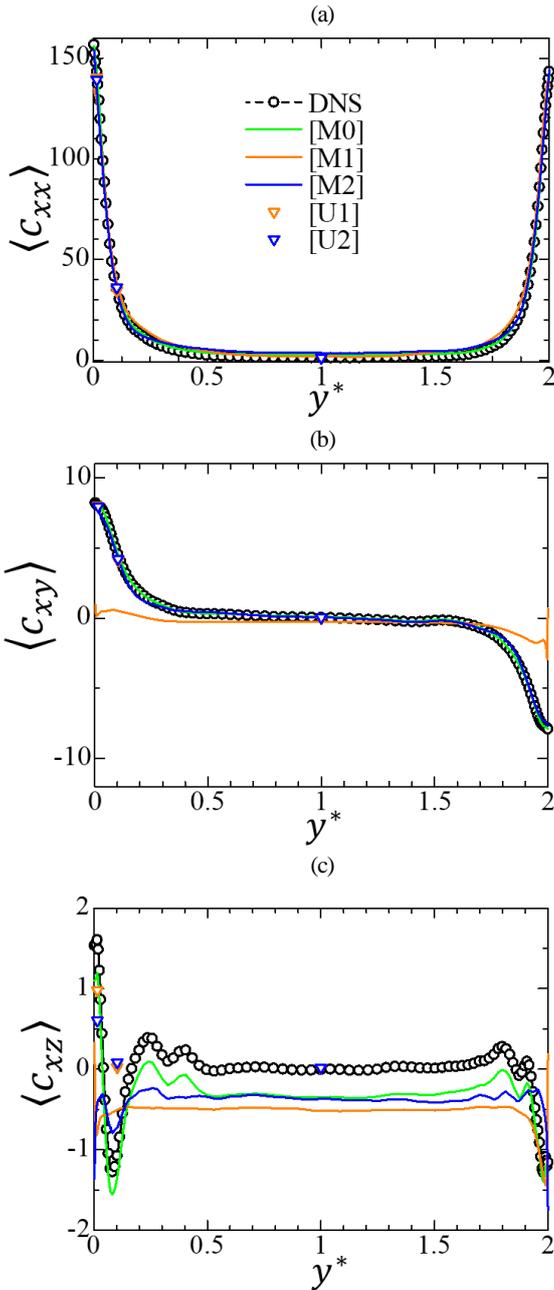


Fig. 7 Spatially averaged conformation stress distribution of (a) c_{xx} , (b) c_{xy} and (c) c_{xz} . Orange and blue inverted triangles is case U1 and U2. U-Net predicted 3 x - z planes.

図 8 を見ると、いずれの構成応力成分においても条件 M0 が最も正確な予測を示している。これは入力に 1 タイムステップ前の構成応力 $c_{ij}^{(n)}$ を用いていることから、 $c_{ij}^{(n)}$ と予測対象の $c_{ij}^{(n+1)}$ が近い値をもつため、予測が容易になったと考えられる。また、いずれの成分や条件においても、壁面近傍、特に粘性底層においては高い相関係数を示すが、チャンネル中央部に向かってに連れて相関係数が下がっている。従って、ANN は壁近傍のストリーク構造などの準秩序構造を持つ領域では正確に予測し、チャンネル中央部の準秩序構造が少ない領域では予測が困難であることが考えられる。また、条件 M0 よりも条件 M1 の相関係数が高いことから、入力物理量が速度 $\mathbf{u}^{(n)}$ よりも速度勾配テンソル $\nabla \mathbf{u}^{(n)}$ の方が構成応力の予測に適していると考えられる。また、U1 と U2 を比較すると、速度 $\mathbf{u}^{(n)}$ のみでも $\nabla \mathbf{u}^{(n)}$ を入力に用いた場合と同等の正確な予測を示していることがわかる。これは U-Net が持つ畳み込みフィルタ

ーが速度場から速度勾配テンソルを計算することが可能なために、速度勾配テンソル場を用いて予測することができたためと考えられる。加えて、入力が速度勾配テンソルのみの条件 M2 においても相関係数 0.6 程度の予測を示すことから、ANN は速度勾配テンソルと構成応力間の非線形な関係を一部再現できたと考えられる。

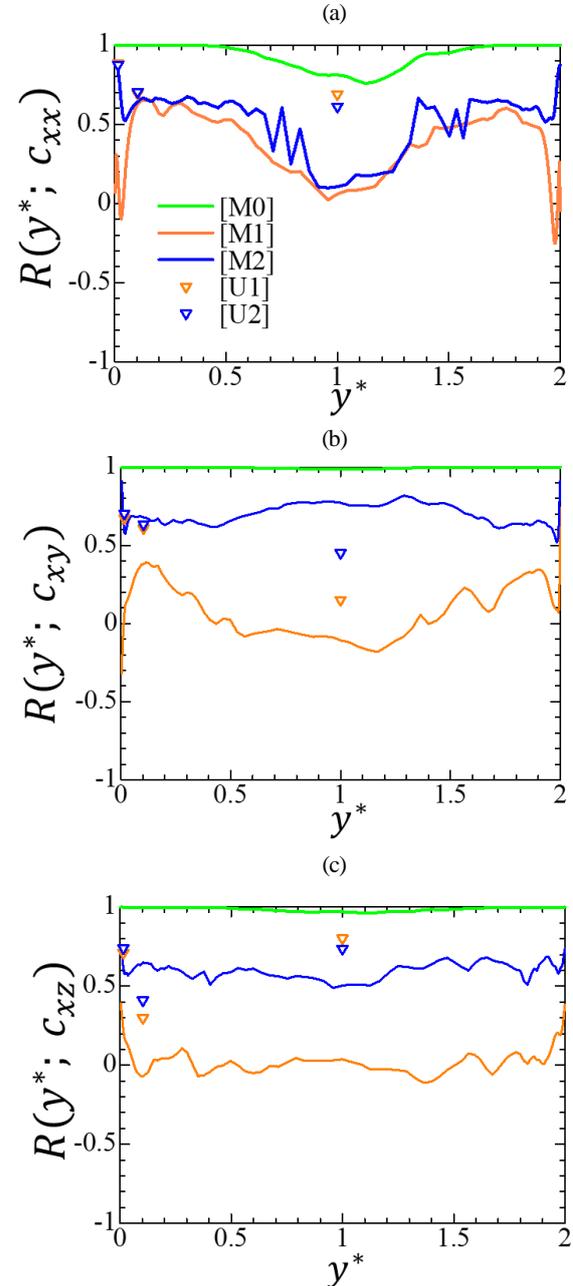


Fig. 8 Correlation Coefficient distribution of (a) c_{xx} , (b) c_{xy} and (c) c_{xz} between DNS's calculation and ANN's prediction on each x - z plane.

5. 結論

粘弾性流体チャンネル乱流における構成応力を MLP と U-Net の二種のネットワークを用い、様々な入力物理量の条件で調査した。入力と出力物理量の値が近い場合に相関係数 0.9 以上の正確な予測が可能であることがわかった。また ANN は壁面近傍においてはストリーク構造などの準秩序構造に起因する構成応力を正確に予測し、DNS を正確に再現したが、チャンネル中央部では比較的予測が困難であることがわかった。また、構成応力の予測には速度

よりも速度勾配テンソルを用いることが有効であることがわかった。ANN に速度勾配テンソルのみの情報を与えた場合にも部分的に正確な予測を示し、ANN が速度勾配と構成応力の非線形な関係を再現し、深層学習による粘弾性流体の流動現象解明の可能性が示された。

謝辞

科学研究費補助金基盤研究(A)「機械学習による乱流ビッグデータの特徴抽出手法の構築」18H03758 の助成を受けた。

参考文献

- (1) Gyr, A., and Bewersdorff, H.-W., *Drag Reduction of Turbulent Flows by Additives*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, (1995), pp. 69-109.
- (2) Yu, B., and Kawaguchi, Y., “Direct numerical simulation of viscoelastic drag-reducing flow: a faithful finite difference method”, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, Vol. 116, (2004), pp. 431-466.
- (3) Krizhevsky, A. et al., “ImageNet classification with deep convolutional neural networks”, *Adv. Neural Inform. Proc. Sys.*, (2012).
- (4) Fukami, K. et al., “Synthetic turbulent inflow generator using machine learning”, *Phys. Rev. Fluids*, Vol. 4, (2019), 064603.
- (5) Gamahara, M., and Hattori, Y., “Searching for turbulence models by artificial neural networks”, *Phys. Rev. Fluids*, Vol. 11, (2017), 054604.
- (6) Ling, J. et al., “Reynolds averaged turbulence modeling using deep neural networks with embedded invariance”, *J. Fluid Mech.*, Vol. 807, (2016), pp. 155-166.
- (7) 長町, 塚原, “深層学習による粘弾性流体乱流の予測可能性に関する調査”, 計算力学講演会講演論文集, (2018), 033.
- (8) Giesekus, H., “A simple constitutive equation for polymer fluids based on the concept of deformation-dependent tensorial mobility”, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, Vol. 11, (1982), pp. 69-109.
- (9) Tsukahara, T. et al., “DNS study on viscoelastic effect in drag-reduced turbulent channel flow”, *J. Turbulence*, (2011), N13.
- (10) Ronneberger, O. et al., “Convolutional networks for biomedical image segmentation”, *arXiv preprint*, (2015), arXiv:1505.04597v1.
- (11) Kingma, D. P. and Ba, J. L., “Adam: a method for stochastic optimization”, *arXiv preprint*, (2014), arXiv:1412.6980.