

令和 6 年 6 月 12 日現在

機関番号：11301

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2022～2023

課題番号：22K18764

研究課題名（和文）流れの超解像再構成を活用した散逸・駆動モデリングによる超粗格子LESへの挑戦

研究課題名（英文）Coarse-grid LES modeling based on machine-learning-based super-resolution reconstruction of under-resolved LES flows

研究代表者

河合 宗司（Kawai, Soshi）

東北大学・工学研究科・教授

研究者番号：40608816

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 5,000,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、本来large-eddy simulation (LES)として解像する必要があるエネルギーの高い乱流成分の一部を意図的に解像しない非常に粗い格子（ここでは粗格子と呼ぶ）を用いてもLESとしての予測精度を保つことを可能とする粗格子subgrid-scale (SGS)モデルの確立を目指し研究を進めた。粗格子SGSモデルの構築には、非物理的な流れ場となる粗格子LESから、粗格子上で効果的なSGS応力を与える教師なし学習と教師あり学習を繋いだ機械学習パイプラインモデルによる流れの超解像再構成に基づく粗格子SGSモデルを提案し、その有効性を検証した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

高忠実に様々な乱流現象を再現可能とするLESは、近年は学術研究だけでなく、複雑な乱流現象を扱う必要がある産業界からの期待も非常に大きくなってきている。一方で、実際の設計開発におけるLESの活用は限定的なものもまた事実である。本研究がターゲットしているLESの飛躍的な低コスト化を目指した粗格子LESモデルの確立は、LESの利用を困難にしている高い計算コストの壁を取り除こうと試みるものであり、学術・応用の両面からLESの活用を大きく広げることに貢献することを目指して実施した。

研究成果の概要（英文）：This study investigated a coarse-grid subgrid-scale (SGS) model that can maintain prediction accuracy as large-eddy simulation (LES) even when using a very coarse grid that intentionally does not resolve some high-energy turbulent components that should be resolved as LES. To establish the coarse-grid SGS model, we proposed a machine-learning-based pipeline model, which connects unsupervised and supervised learning, for super-resolution reconstruction of very coarse-grid under-resolved LES flowfields to provide effective SGS stresses for a coarse-grid LES. The proposed coarse-grid SGS model was validated through the a priori and a posteriori tests of turbulent channel flow.

研究分野：流体工学

キーワード：数値流体力学 機械学習 LES 流体力学 乱流

1. 研究開始当初の背景

高忠実に様々な乱流現象を再現可能とする large-eddy simulation (LES)は、流体现象を調べるツールとして特に学術研究では幅広く利用されている。また近年、複雑な乱流現象を扱う必要がある産業界からの LES に対する期待も非常に大きくなってきてはいるが、実際の設計開発における LES の活用は限定的なものもまた事実である。LES の利用を困難にしている大きな要因の一つに、計算コストの高さがあげられる。計算コストの高さは、エネルギー散逸な乱流スケールを直接的に(細かい)格子で解像する必要がある LES 手法そのものの設計に起因する。特に、実際の工学応用問題で取り扱う必要があることが多い、壁乱流現象では壁面近傍のエネルギー散逸な乱流スケールが非常に小さくなり、膨大な計算コストを有する。

本研究では、LES の活用においてネックとなっている計算コストの抜本的な削減に向けて、本来 LES として解像する必要があるエネルギーの高い乱流成分の一部を意図的に解像しない非常に粗い格子(ここでは粗格子と呼ぶ)を用いても LES としての予測精度を保つことを可能とする粗格子 LES モデル(粗格子 subgrid-scale (SGS)モデル)の開発を目指し研究を推進した。ここでの課題は、エネルギー散逸な乱流の一部を解像しない粗格子を用いた場合、計算される流れ場自体が非物理的な流れ場となるため、通常の物理的な考察に基づくモデリングが困難となることである。そこで本研究では、物理的な考察に基づく従来のモデリングではなく、機械学習による人工的な超解像画像生成技術を活用し、流れの非解像成分を超解像再構成で物理的に正しい形で補足し、その補足した非解像成分で評価する SGS 成分の効果を適切に LES モデルに反映できれば、遥かに粗い格子でも高忠実な LES (ここでは粗格子 LES と呼ぶ)を実現できるのではと考えた。

本研究が達成されれば、学術・応用研究の両面から LES の活用が大きく広がることが期待でき(例えば LES による多目的最適化など)、さらには LES が産業界での設計開発主要ツールに取って変わるなど、学術・応用研究から実用まで乱流シミュレーションの方向性を変革させる潜在性を有するものになると考えている。

2. 研究の目的

高忠実な乱流シミュレーション、LES の飛躍的な低コスト化を目指し、機械学習による人工的な超解像画像生成技術を活用した流れの超解像再構成に基づく粗格子 LES モデルの確立を目的とする。

3. 研究の方法

本研究では、摩擦レイノルズ数 1000 のチャンネル乱流を用いて、まず(1)アプリオリテストとして、粗格子上で実施する LES から得られる非物理的な流れ場を入力とし、流れ場の超解像再構成により direct numerical simulation (DNS)品質の高忠実な流れ場を得ることを可能とする機械学習モデルを確立する。その上で、(2)構築した機械学習に基づく流れ場の超解像再構成に基づく粗格子 LES モデル(粗格子 SGS モデル)を LES ソルバーに組み込んだアポステリオリテストで、構築した粗格子 LES モデルの有効性を詳細に検証する。

4. 研究成果

本研究で得られた研究成果について、上記研究の方法で示した(1)アプリオリテストである機械学習モデルの確立を 4. 1 節で、また(2)構築した粗格子 LES モデルを LES ソルバーに組み込んだアポステリオリテストによる有効性検証を 4. 2 節で記載する。

4. 1 機械学習による超解像画像生成技術を応用した流れの超解像再構成(アプリオリテスト)

図 1 は本研究で提案する粗格子を用いた LES で得られる非物理的な流れ場を、DNS 品質の高忠実な流れ場に超解像再構成する機械学習モデルの概要を示したものである。本提案機械学習モデルは、前半の粗格子 LES→空間フィルターを施した DNS (filtered DNS)相当の高忠実な流れ場に再構成を行う教師なし機械学習パートと、後半の filtered DNS 相当→DNS 品質の流れ場に超解像を行う教師あり機械学習パートの 2 パートに分け、それらの 2 つの機械学習を繋いだ、機械学習パイプラインモデルとなっている。

本研究の特徴は、特にその前半部分にあり、非物理的な粗格子 LES の流れ場→物理的な DNS 相当の流れ場への再構成という、異なる流れ(例えるなら馬→シマウマのような)の再構成には、教師あり学習に必要なペアデータが存在し得ないため、教師なし学習が必須となる点である。これは従来の filtered DNS データから DNS への流れの超解像再構成でしばしば用いられる教師

あり学習を用いる手法とは大きく異なる点であり、非物理的な粗格子 LES データを扱う上で必須となる重要な点でもある。本研究では、ここでの機械学習モデルに人工的な画像生成研究における教師なし学習である、敵対的生成ネットワーク相互変換 (CycleGAN) を応用し、流れ場の再構成を実施する。後半の filtered DNS 相当→DNS 品質の流れ場の超解像は、ペアデータの作成が可能であり、ここでは教師あり機械学習である条件付き敵対的生成ネットワーク (cGAN) を用いる。教師なし機械学習と教師あり機械学習を繋いだ本パイプラインモデルにより、非物理的な流れ場である粗格子 LES データを物理的な DNS 品質のデータに超解像再構成する。

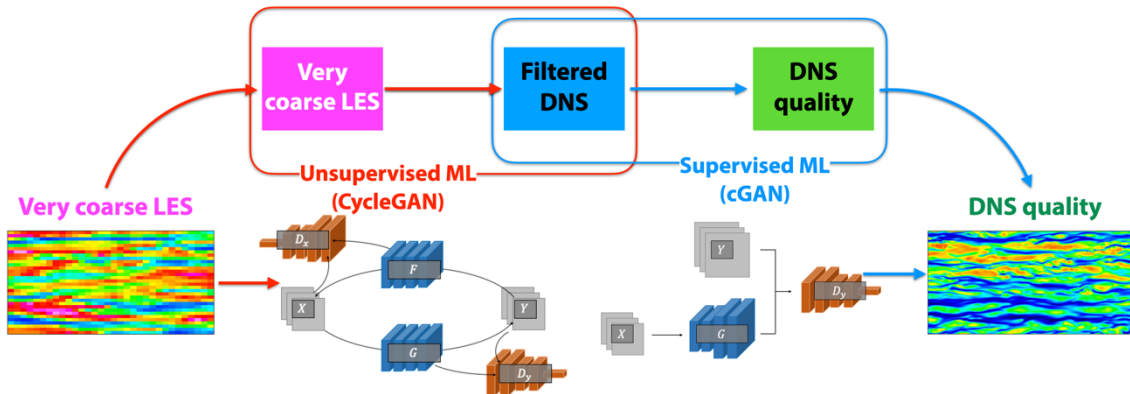


図 1 Proposed machine-learning pipeline model for super-resolution reconstruction of very coarse-grid under-resolved LES flowfields.

図 2 は、摩擦レイノルズ数 1000 のチャンネル乱流を用いて、本提案機械学習パイプラインモデルで粗格子 LES→DNS 品質へ超解像再構成した流れ場から算出した SGS 応力成分の参照解 (実際の DNS データ) との比較を示したものである。ここでは、DNS 品質 (もしくは参照解では DNS) の流れ場に空間フィルターを施すことで SGS 応力成分を抽出している。また図 2 では、比較のため従来手法である教師あり機械学習のみを用いて粗格子 LES→DNS 品質へ超解像再構成した結果も合わせて載せている。提案パイプラインモデルにより、従来手法の教師あり機械学習のみでは予測困難な粗格子 LES における SGS 応力成分を予測できることが示された。

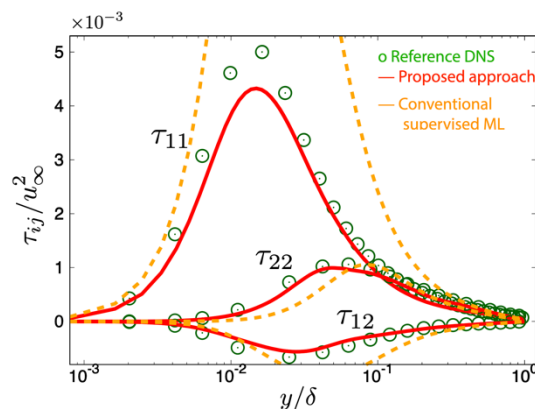


図 2 Predicted SGS stresses using proposed machine-learning pipeline super-resolution reconstruction model compared with reference DNS and conventional supervised machine-learning model.

4. 2 構築した粗格子 LES モデルのアポステリオリテストによる有効性検証

ここでは 4.1 節で構築した機械学習パイプラインモデルに基づく粗格子 LES モデル (粗格子 SGS モデル) を実際に LES ソルバーに組み込み、アポステリオリテストとして摩擦レイノルズ数 1000 のチャンネル乱流を粗格子上で計算し、粗格子 LES モデルの有効性を検証した。

図 3 はアポステリオリテストとして、粗格子を用いて 4.1 節で構築した提案粗格子 SGS モデルおよび従来の SGS モデルを用いて計算した結果である。ここでの粗格子の格子幅は、プラスユニットで流れ方向およびスパン方向に $(\Delta x^+, \Delta z^+) = (72, 36)$ であり、壁面近傍のストリーク構造のスパン方向に格子点 3 点程度が入る非常に粗い格子を用いている。なお計算の空間離散化には非散逸の 2 次精度 KEEP スキームを用い (数値散逸を一切用いていない)、時間積分は 3 段 3 次 TVD Runge-Kutta 法を用いた。また比較のための従来 SGS モデルとして、selective mixed-scale を用いた。図 3 より、本粗格子を用いた場合、従来の物理ベースの SGS モデルでは壁面

近傍でのレイノルズせん断応力の立ち上がりが遅れ、それに伴い、平均主流方向速度も対数則から大きく外れてしまうことがわかる。本来 LES として解像すべきエネルギー含み乱流を解像しない粗い格子を用いた LES では、このような非物理的な解が得られることはよく知られており、粗い格子 LES の課題である。一方、提案機械学習パイプラインモデルに基づく粗格子 SGS モデルを用いることにより、今回用いたような粗い格子であっても平均速度やレイノルズせん断応力が正しく予測できることが示された。

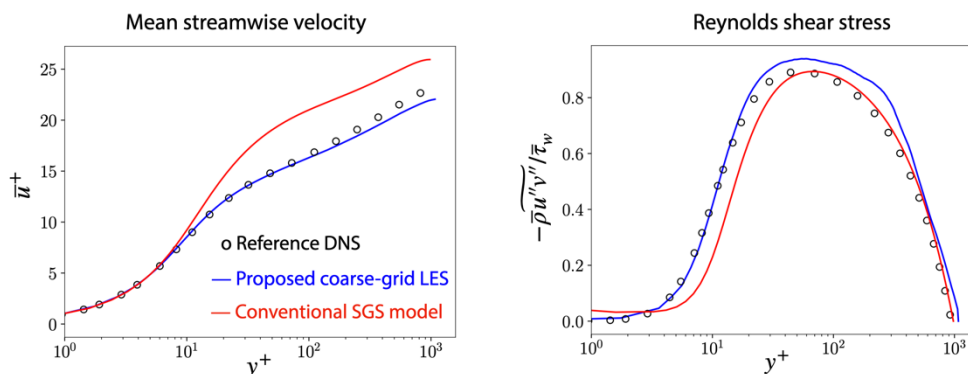


図 3 Predicted mean streamwise velocity and Reynolds shear stress using proposed machine-learning-based coarse-grid LES model compared with reference DNS and coarse-grid LES with conventional SGS model.

図 4 は壁面近傍 $y^+ \approx 15$ における瞬間の流れ方向速度分布であり、左から粗格子を用いた提案粗格子 SGS モデル、従来の SGS モデル、および参照 DNS で得られた流れ場を示している。粗格子では壁面近傍のストリーク構造を十分に格子で解像できないため、従来の SGS モデル（図 4 中央）では、非物理的に大きく伸長したストリーク構造が発生し、それが原因となり平均速度のミスマッチやレイノルズせん断応力の立ち上がりの遅れが発生する。一方、詳細は割愛するが、提案粗格子 SGS モデルでは SGS 逆拡散が生じており、それにより壁面近傍の非物理的に大きなストリーク構造が乱され、壁面近傍から適切にレイノルズせん断応力が発達することにより、正しい平均速度分布が得られることが明らかとなった。

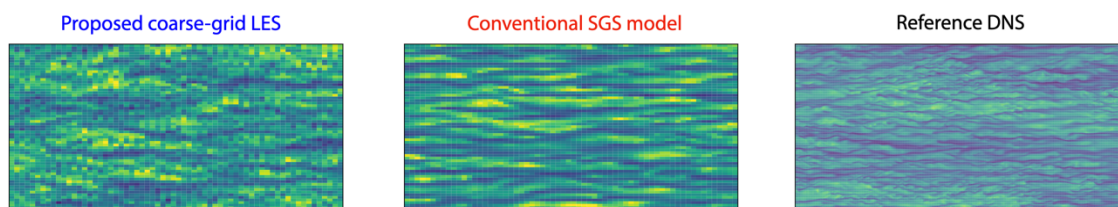


図 4 Instantaneous near-wall streamwise velocity distributions at $y^+ \approx 15$.

以上より、本研究では、非物理的な流れ場となる粗格子 LES から、粗格子上で効果的な SGS 応力を与える粗格子 SGS モデルの構築を可能とする教師なし学習 (CycleGAN) および教師あり学習 (cGAN) を繋いだ機械学習パイプラインモデルを提案した。従来研究とは異なり、ここで重要となるのは、教師なし学習を応用したことにより、粗格子 LES で有効な SGS モデルの構築が可能となった点である。本研究成果は、現在、国際学術論文誌に投稿準備中である。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計9件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 5件）

1. 発表者名 松本康平, 前島颯樹, 河合宗司
2. 発表標題 粗い時間刻み幅を用いた非定常乱流解析に向けた機械学習モデルの構築
3. 学会等名 第55回流体力学講演会/第41回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 前島颯樹, 河合宗司
2. 発表標題 粗格子LESの実現へ向けた機械学習によるSGSモデリング
3. 学会等名 日本流体力学年年会2023
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Soju Mejima, Soshi Kawai
2. 発表標題 Machine-learning-based sub-grid scale modeling for coarse-grid large-eddy simulation
3. 学会等名 20th International Conference on Flow Dynamics (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Soju Mejima, Soshi Kawai
2. 発表標題 Removing the log-layer mismatch in wall-modeled LES using near-wall erroneous flows via physics-informed neural network
3. 学会等名 The 76th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 松本康平, 前島颯樹, 河合宗司
2. 発表標題 大きな時間積分エラーを含む流れの機械学習再構成による高速乱流解析
3. 学会等名 第37回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Soju Mejima, Soshi Kawai
2. 発表標題 Coarse-grid large-eddy simulation by unsupervised-learning-based sub-grid scale modeling
3. 学会等名 AIAA SciTech Forum 2024 (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Soju Maejima and Soshi Kawai
2. 発表標題 Unsupervised machine-learning-based sub-grid scale modeling for coarse-grid LES
3. 学会等名 75th APS Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics (APS-DFD) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Soshi Kawai and Soju Maejima
2. 発表標題 Unsupervised Machine-Learning for Super-Resolution and SGS Modeling of Very Coarse-Grid LES
3. 学会等名 2nd US-Japan Workshop on Data-Driven Fluid Dynamics (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 前島颯樹, 河合宗司
2. 発表標題 教師なし学習CycleGANによる粗格子LESのSGSモデリング
3. 学会等名 第36回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------