

# 深層学習による乱流燃焼モデル構築に向けた基礎解析

中澤 凌太, 源 勇気 (代表者)

東京工業大学 工学院

## 1. 緒言

高効率・低環境負荷燃焼器を短期間・低コストで開発するには、数値解析の活用が重要である。支配方程式を直接解く直接数値計算(DNS)は高精度であるが、莫大な計算コストを必要とする。そのため、実用燃焼器開発における数値解析では、平均化やフィルター操作を施された基礎方程式が一般に用いられている。このような手法では計算コストは低く抑えられるが、乱流燃焼モデルを導入する必要がある、予測精度は採用したモデルの精度に大きく依存する。乱流燃焼は流体運動と化学反応が相互に作用する複雑な現象であるため、高精度なモデル化は非常に困難であり、従来のモデルでは中間生成物やラジカルの定量的な予測は不可能であった。そこで本研究では、画像認識および言語処理などの分野で応用が進んでいる深層学習を用いて乱流燃焼モデルの開発を試み、深層学習による高精度なモデル構築の可能性を検討することを目的とする。

## 2. ニューラルネットワークと乱流予混合火炎のDNSデータ

本研究では、深層学習を用いて乱流燃焼場における平均反応速度のモデル化を行った。深層学習は、平均反応速度に関連すると考えられる平均物理量から、ニューラルネットワーク(NN)により平均反応速度を予測し、その予測値とDNSにより得られた厳密な平均反応速度の誤差が小さくなるようにNNの重みを更新していくことで行う。図1にNNの概略図を示す。NNはノード数100個の全結合層5つで構築し、隠れ層と出力層の活性化関数にそれぞれReLU関数と恒等関数、損失関数に平均二乗誤差、勾配降下法の最適化アルゴリズムにAdam<sup>(1)</sup>、重みの初期化にHeの正規分布<sup>(2)</sup>を用いた。NNに入力する物理量として、乱流エネルギー $\bar{k}$ 、乱流エネルギーの散逸率 $\bar{\varepsilon}$ 、化学種 $i$ の質量分率 $\bar{Y}_i$ 、温度 $\bar{T}$ 、密度 $\bar{\rho}$ 、化学種 $i$ の分子量 $W_i$ 、化学種 $i$ のルイス数 $Le_i$ 、スカラー散逸率 $\bar{\varepsilon}_{c_i}$ を選択した。ここで、 $\sim$ はFavre平均、 $-$ はReynolds平均を示している。また、次式で示される化学種 $i$ の反応速度の0次近似値 $\omega_{0,i}$ も入力として用いた。

$$\omega_{0,i} = W_i \sum_{k=1}^K (v''_{i,k} - v'_{i,k}) A_k \bar{T}^{\beta_k} \exp\left(-\frac{E_k}{R_c \bar{T}}\right) \prod_{i=1}^N \left(\frac{\bar{\rho} \bar{Y}_i}{W_i}\right)^{\nu_{i,k}}$$

ここで、 $v'_{i,k}$ と $v''_{i,k}$ は素反応 $k$ における化学種 $i$ の反応物および生成物としての化学量論係数、 $A_k$ 、 $\beta_k$ および $E_k$ はそれぞれ素反応 $k$ の頻度因子中の定数、頻度因子中の温度の次数および活性化エネルギー、 $R_c$ は一般気体定数である。NNはこれらの入力から化学種 $i$ の平均反応速度 $\bar{\omega}_{Model,i}$ を予測し、DNSから得られた平均反応速度 $\bar{\omega}_{DNS,i}$ と比較する。なお、本研究では異なる化学種群に基づく反応機構に対応可能な手法の開発を視野に入れ、ひとつのNNで対象とする全化学種の平均反応速度のモデル化を行う。

本研究では、深層学習による高精度な乱流燃焼モデルの開発のためにデータの前処理に焦点

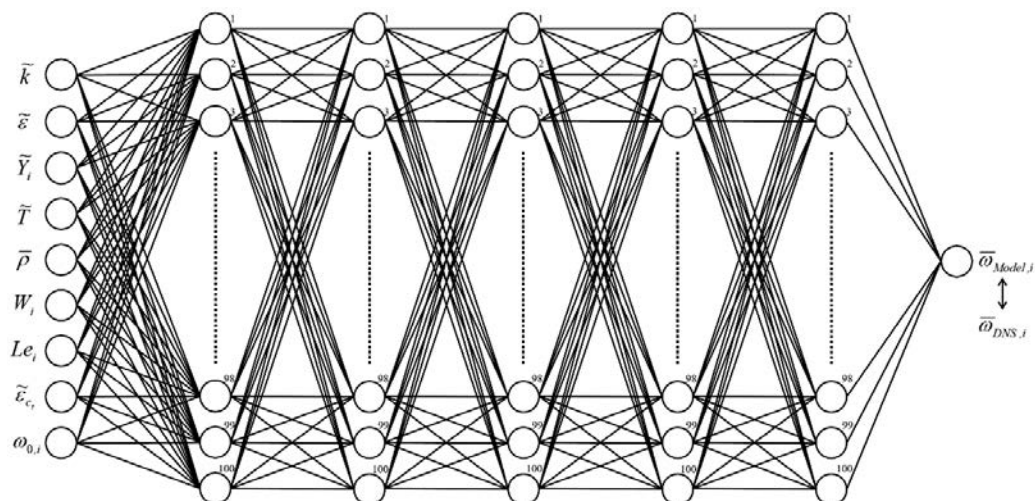


図 1 : ニューラルネットワークの概略図。

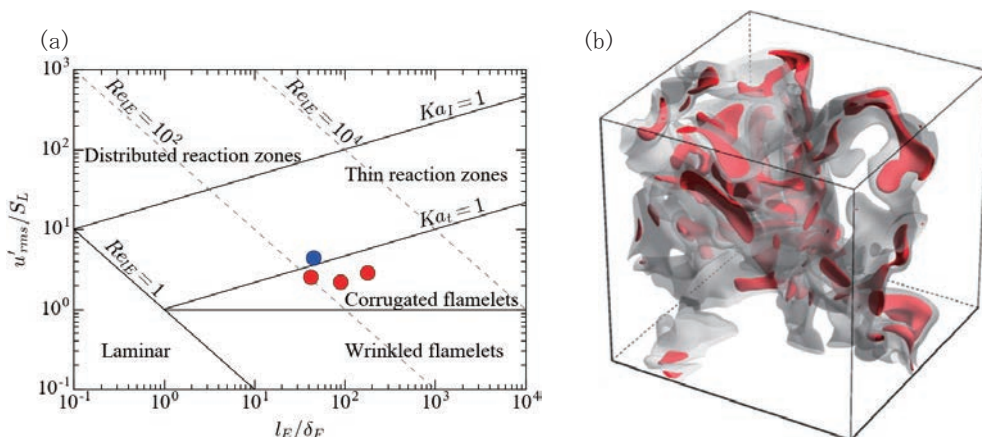


図 2 : (a) 乱流燃焼ダイアグラム<sup>(7)</sup>。(b) DNS から得られた典型的な反応速度等値面。

を当てた。深層学習ではデータの前処理として、物理量それぞれの平均を 0、標準偏差を 1 に正規化する方法 (z-score, ZSC) が広く用いられている。しかし、反応速度は値の大きさだけでなく符号にも物理的意味があるため、平均を 0 にする処理は適切でないと考えられる。また、本研究におけるデータベースでは、 $\bar{Y}_i$ 、 $\omega_{0,i}$  および  $\bar{\omega}_{DNS,i}$  に関して  $i$  の区別なしに全ての化学種について同一の物理量として取り扱っているが、質量分率と反応速度は化学種によって値が大きく異なるため、同一の物理量であっても化学種ごとに処理する必要があると考えられる。そこで本研究では、 $\bar{Y}_i$ 、 $\omega_{0,i}$ 、 $\bar{\omega}_{DNS,i}$  は化学種ごとに、他の物理量は物理量ごとに、絶対値の最大値で割る方法 (Maximum Absolute Scale, MAS) を新たに提案する。本研究では ZSC と MAS の 2 種類の前処理方法をそれぞれ施して深層学習を行った。

本研究で用いたデータベースは、本研究室による 12 化学種 27 素反応から構成される詳細化学反応機構と輸送係数・熱物性値を考慮に入れた 3 次元一様等方性乱流中を伝播する水素・空気乱流予混合火炎の DNS<sup>(3, 4, 5, 6)</sup> を基に構築した。基礎方程式は完全圧縮性の質量、運動量、エネルギーおよび化学種の保存式である。x(主流)方向に流入流出境界条件、y, z 方向に周期境界条件を

適用している。空間離散化には4次精度中心差分法、時間積分には3次精度 Runge-Kutta 法を用いた。図 2(a)に DNS データの乱流燃焼ダイアグラム上の位置を示す<sup>(7)</sup>。これらの条件は一般的な燃焼器の燃焼条件に相当する<sup>(8)</sup>。図 2(a)に示す4条件のうち、3条件(赤)を深層学習に、1条件(青)を深層学習乱流燃焼モデルの検証に用いた。図 2(b)に本研究で用いた DNS における典型的な瞬時の反応速度の等値面を示す。深層学習は、乱流運動と化学反応の相互作用が十分発達している火炎における DNS を用いて行った。本研究では、これらの瞬時の DNS データに対して周期 ( $y, z$ ) 方向に空間平均を施すことで、各条件の Favre 平均値と Reynolds 平均値を求めた。

### 3. 学習評価と深層学習乱流燃焼モデルの検証

学習結果を評価するために、ホールドアウト検証を行った。図 2(a)は学習回数 $E$ に対する平均二乗誤差 $A$ の推移を示している。ただし、学習対象である $\bar{\omega}_{DNS,i}$ を前処理した値は ZSC と MAS で大きく異なるため、それぞれの前処理方法での学習における平均二乗誤差の絶対量の比較は適切ではない。そこで、平均二乗誤差に対して最小値が0、最大値が1となるように正規化を行った。図中の黒線が ZSC、赤線が MAS で前処理した場合の学習結果を示しており、実線と破線は学習誤差(Train)と検証誤差(Validation)を示している。学習誤差はどちらの前処理方法での学習においても減少し続けていることから、学習が順調に進んでいることがわかる。また、それぞれの学習誤差と検証誤差は概ね同じ傾向であることから、過学習は許容範囲内であると考えられる。さらに、MAS で前処理した場合の平均二乗誤差は ZSC の場合より速く収束するため、学習がより効率的であることがわかる。

検証誤差と学習誤差の差の推移を図 2(b)に示す。検証誤差と学習誤差の差が小さい方が過学習の程度は小さく、未知のデータに対する NN の予測性能は高いと考えられる。よって、以降では  $E \leq 1000$  で検証誤差と学習誤差の差が最小となる学習回数(ZSC:  $E = 962$ , MAS:  $E = 632$ )における NN を本研究で開発した深層学習乱流燃焼モデルとする。

深層学習乱流燃焼モデルを用いて図 1(a)に示した乱流燃焼条件(青)での平均反応速度を予測した。モデルの予測値 $\bar{\omega}_{Model,i}$ と DNS により得られた厳密値 $\bar{\omega}_{DNS,i}$ を化学種ごとに比較した結果を図 3(a)-(f)に示す。灰色の太線が DNS から得られた平均反応速度、黒と赤の細線が ZSC と MAS のそれぞれで前処理した場合のモデルの予測値を示している。生成物である  $H_2O$  の平均反応速度の予測は、MAS で前処理した場合のモデルの方がより高精度であることがわかる。 $H_2$  と  $O_2$  のような反応物の平均反応速度の予測においても同様な結果が得られた。 $HO_2$  と  $H_2O_2$  のような平均反応速度の値が小さい化学種では、ZSC で前処理した場合では学習ができていない。これは、ZSC では学習対象である $\bar{\omega}_{DNS,i}$ を、全化学種における平均を0、標準偏差を1に正規化するため、前処理された $\bar{\omega}_{DNS,HO_2}$ と $\bar{\omega}_{DNS,H_2O_2}$ は他の化学種と比べて非常に小さくなってしまい、学習時に十分考慮されなかったと考えられる。また、ZSC で前処理した場合のモデルは、OH の平均反応速度の学習は行えているが、その予測精度は高くない。一方で、本研究で提案した MAS で前処理した場合のモデルでは、これらの中間生成物やラジカルの平均反応速度の全体的な傾向をある程度予測可能であることが示されている。ただし、どの化学種の平均反応速度の予測においても、火炎面( $1.5 < x < 3.5$  mm)で誤差が大きいことがわかる。

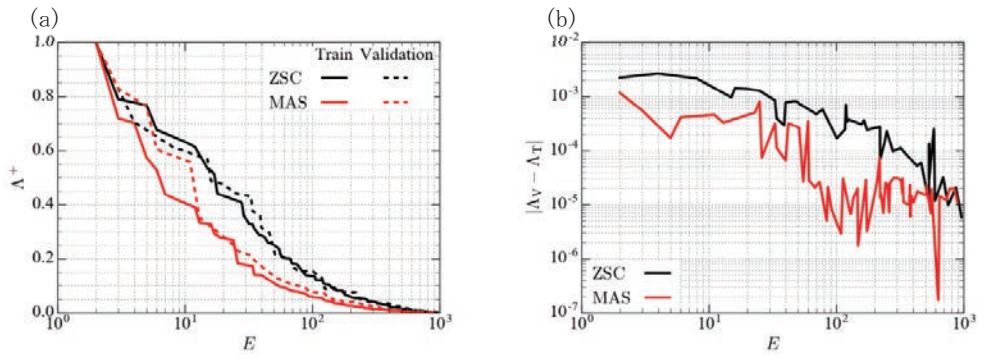


図3 : (a) 正規化した平均二乗誤差の推移。(b) 学習誤差と検証誤差の差の推移。

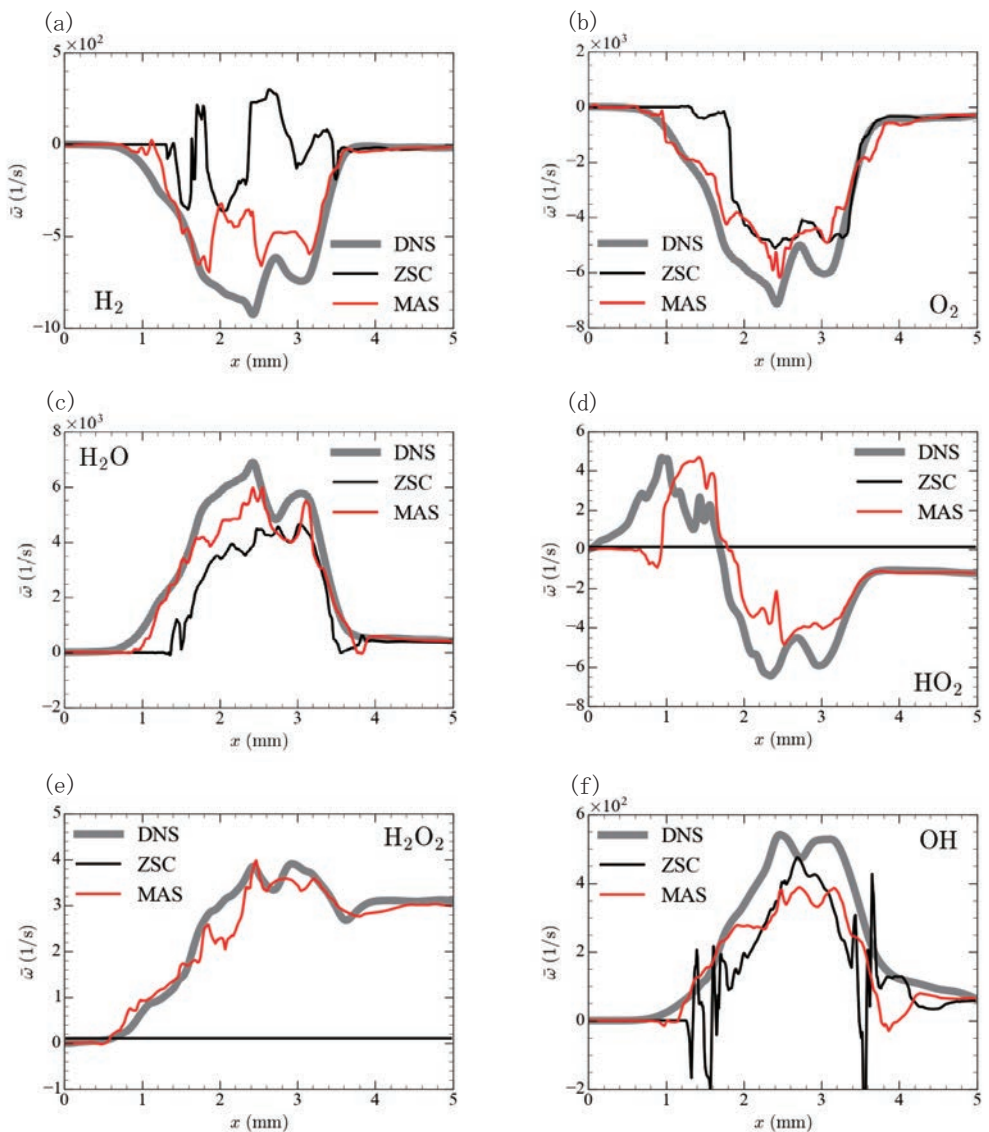


図4 : DNS データと予測結果の比較。(a)  $H_2$ , (b)  $O_2$ , (c)  $H_2O$ , (d)  $HO_2$ , (e)  $H_2O_2$ , (f)  $OH$ 。

特に図 3(a) に示す  $H_2$  の平均反応速度の予測値の誤差が火炎面 ( $1.5 < x < 2.5$  mm) で非常に大きい理由として、隠れ層の活性化関数として用いている ReLU 関数が負の値を出力しないことが挙げられる。出力層の活性化関数には負の値も出力する恒等関数を用いているため、隠れ層最深層と出力層間における重みの調整により負の値の予測は可能であるが、その予測性能には限界があると考えられる。

#### 4. 結論

本研究では、深層学習を用いて高精度乱流燃焼モデルの開発を試み、以下の結論を得た。

- ・乱流燃焼場における平均反応速度のモデル化に深層学習は有効である。
- ・本研究で提案した Maximum Absolute Scale を用いて前処理することで、乱流燃焼場における中間生成物やラジカルの平均反応速度の予測性能を向上させることが可能である。
- ・火炎面 ( $1.5 < x < 3.5$  mm) における平均反応速度の予測精度のさらなる向上には、活性化関数などの最適化が有効であると考えられる。

#### 参 考 文 献

- (1) Kingma, D. P. , et al. , *arXiv:1412.6980v8*, (2015).
- (2) He, K. , et al. , *arXiv:1502.01852v1*, (2015).
- (3) Tanahashi, M. , et al. , *Proc. Combust. Inst.* , 28(2000), 529.
- (4) Nada, Y. , et al. , *J. Turbul.* , 5(2004), 24.
- (5) Shim, Y. , et al. , *Proc. Combust. Inst.* , 33(2011), 1455.
- (6) Shim, Y. S. , et al. , *Proc. Combust. Inst.* , 34(2013), 1383.
- (7) Peters, N. , *J.Fluid Mech.* , 384(1999), 107.
- (8) Swaminathan, N. , and Bray, K. N. C. , *Turbulent Premixed Flames*, (2011), 1.