

数理・データ科学の融合による流体制御

中澤 嵩

(大阪大学数理・データ科学教育研究センター)

Flow control by the fusion between mathematical and data sciences

by

Takashi NAKAZAWA

ABSTRACT

This paper presents optimal design using Adaptive Mesh Refinement (AMR) with shape optimization method. The method suppresses time periodic flows driven only by the non-stationary boundary condition at a sufficiently low Reynolds number using Snapshot Proper Orthogonal Decomposition (Snapshot POD). For shape optimization, the eigenvalue in Snapshot POD is defined as a cost function. The main problems are Reynolds Average Navier-Stokes problems and eigenvalue problems of Snapshot POD. An objective functional is described using Lagrange multipliers and finite element method. Two-dimensional cavity flow with a disk-shaped isolated body is adopted. The non-stationary boundary condition is defined on the top boundary and non-slip boundary condition for side and bottom boundaries and for the disk boundary. For numerical demonstration, the disk boundary is used as the design boundary. Using H^1 gradient method for domain deformation, all triangles over a mesh are deformed as the cost function decreases, where the sensitivities in the boundary integration type and the volume integration type are adopted to comparison both. To avoid decreasing the numerical accuracy based on squeezing triangles, AMR is applied throughout the shape optimization process to maintain equal numerical accuracy to that of a mesh in the initial domain.

1. Introduction

現代の工学・産業界において、最適設計というかたちで発展を遂げてきた形状最適化問題は、約 100 年前から数理科学の一分野として研究がされてきた。特に、数値流体力学における形状最適化問題は乱流制御という一分野を築いており、航空宇宙工学分野において重要な役割を担っている。一般的に、このような乱流制御を行う際、時間平均場を用いて目的関数を定義することが多いが、本研究では、データ科学的手法により乱流場を時間平均場と時間変動場に分解し、乱流場の特徴的な時空間構造を持つ時間変動場を用いて目的関数を定義する。それにより、時間平均場を用いて目的関数を定義する従来の手法と比べて、直接的に乱流の時空間構造を制御することが可能となる。

このような最適設計による流体制御の先駆的な研究は、フランス人応用数学者である Pironneau^{1,2)}が Stokes 方程式や Navier-Stokes 方程式が定義された空間において、散逸エネルギー最小化問題に対する感度解析を行うところまで遡る。その後、Haslinger and Makinen³⁾, Moubachir and Zolesio⁴⁾, Sokolowski and Zolesio⁵⁾が形状最適化問題に関する数学・数値解析を行っており、特に航空工学からの要請を受けるかたちで、Mohamadi and Pironneau⁶⁾が乱流モデルや圧縮性 Euler 方程式、Adaptive Mesh 法等だけでなく、遺伝的アルゴリズムや自己組織化マップ(SOM)等を取り込んだ形状最適化問題を定式化し、数値的に検証している。上記に記述したように、形状最適化問題による流体制御に関する研究結果は、既に膨大なまでに存在するが、乱流制御を可能にする形状最適化手法は未だ発展の余地が十分に残されている。

これまで、数値流体力学における形状最適化問題では、時間平均場を用いて目的関数が定義されることが多かった。一方で、Nakazawa⁷⁾は、乱流場の特徴的な時空間構造を持つ時間変動場を効率的に制御するために主成分分析と同様のデータ解析手法である Snapshot Proper Orthogonal Decomposition (Snapshot POD)を考慮した形状最適化問題を定式化した。この Snapshot POD によって、非定常流を時間平均場と時間変動場（平均と分散）にモード分解することが可能となり、それぞれの速度場を区別して目的関数を定

義することが可能となった。更に、Nakazawa and Nakajima⁸⁾では、時間変動場の速度場だけを用いた目的関数を定義し、従来の時間平均を用いた場合と比較して、より直接的に時間変動場を制御することに成功した。

ところで、形状最適化問題を解く場合、感度を境界積分として評価することが一般的である。しかし、Nakazawa and Nakajima⁸⁾では、ディリクレ条件で定義された境界を設計境界としており、移流項を感度に反映することが出来ない。また、Time Average Navier-Stokes 方程式(TANS)を主問題と定義していたため、時間変動成分を考慮していなかった。結果的に、時間平均場と時間変動場の移流項を感度として考慮していなかった。

このような状況を鑑みて、本研究では、Reynolds Average Navier-Stokes 方程式(RANS)を主問題と定義し、領域積分型で感度を評価する。その際、初期形状には内部に円盤形の孤立物体を有する 2 次元 Cavity 流れを採用し、数値的に当該形状最適化問題の妥当性を検証する。

2. Domain Variation

ユークリッド空間における、2 次元領域 $\Omega_0 \subset \mathbb{R}^2$ を非有界な凸領域とする。そして、 $\Omega_0 \subset \Omega$ を初期形状とし、位置ベクトルを $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$ と記述する。その際、

$$\begin{aligned}\Omega &= \Omega_{\text{Full}} \setminus \Omega_{\text{m}}, \\ \Omega_{\text{Full}} &= \{\mathbf{x} = (x, y) \mid 0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1\}, \\ \Omega_{\text{m}} &= \{\mathbf{x} = (x, y) \mid (x - 0.5)^2 + (y - 0.5)^2 = 0.1^2\},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\partial\Omega &= \Gamma_{\text{top}} \cup \Gamma_{\text{wall}} \\ \Gamma_{\text{top}} &= \{(x, y) \mid 0 \leq x \leq 1, y = 1\}, \Gamma_{\text{wall}} = \partial\Omega \setminus \Gamma_{\text{top}}.\end{aligned}$$

本研究では、 $\partial\Omega_{\text{m}}$ を設計境界とする。次に、 \mathbb{R}^2 値の関数である Lipschitz transformation $\phi: \Omega \rightarrow \phi(\Omega)$ による領域変形を考える。この写像は、微小パラメータ ϵ を用いて、 $\phi = \phi_0 + \epsilon\phi$ のように記述できると仮定する。ここで、 ϕ_0 は恒等写像であり $\phi_0(\Omega) = \Omega$ となる。また、 ϕ は領域摂動である。 ϕ の関数空間については Kimura⁹⁾の Proposition 1.41 と eq. (1.18)を参照されたい。

これから、汎関数の形状微分公式を導く。まず、 ζ を Ω における物理量（主変数と随伴変数）を表す実数値関数とし、 $G(\mathbf{x}, \zeta)$ を密度関数として以下のような汎関数を定義する。

$$L(\boldsymbol{\phi}_0, \zeta) = \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \zeta) dx.$$

次に、 $L(\boldsymbol{\phi}_0, \zeta)$ に対して物質微分をとると汎関数の領域積分型と境界積分型の形状微分公式が得られる。

$$\begin{aligned} \dot{L}(\boldsymbol{\phi}, \zeta) &= \int_{\Omega} G' dx + \int_{\Omega} \{\boldsymbol{\phi} \cdot \nabla G + G(\nabla \cdot \boldsymbol{\phi})\} dx \\ &= \int_{\Omega} G' dx + \int_{\partial\Omega_0} G\boldsymbol{\phi} \cdot \mathbf{v} dx. \end{aligned}$$

ここで、 $(\dot{\cdot})$ は物質微分、 (\cdot) は形状微分（Frechet 微分）であり、 \mathbf{v} は境界上の外向き単位法線ベクトルである。次に、随伴変数を用いると、

$$\int_{\Omega} G' dx = 0$$

とすることが可能であり、このことは主問題と随伴問題を解くことと同意である。そして、主変数と随伴変数の集合である ζ を \tilde{L} に代入すると、最終的に以下のように領域積分型と境界積分型の感度が得られる。

$$\int_{\Omega} \{\boldsymbol{\phi} \cdot \nabla G + G(\nabla \cdot \boldsymbol{\phi})\} dx, \int_{\partial\Omega_0} G\boldsymbol{\phi} \cdot \mathbf{v} dx.$$

3. Main Problems

3.1. The Non-Stationary Navier-Stokes Problem

まず初めに、主問題を設定するために非定常 Navier-Stokes 方程式を用意する。

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \frac{1}{\text{Re}} \Delta \mathbf{u}, \nabla \cdot \mathbf{u} = 0,$$

そこで、 $\{\mathbf{u}, p\}$ は速度ベクトルと圧力である。次に、 $\{\mathbf{v}, q\}$ を $\{\mathbf{u}, p\}$ に対するテスト関数（随伴変数）とすると下記の弱形式が得られる。

$$\int_{\Omega} \left\{ \frac{D\mathbf{u}}{Dt} \cdot \mathbf{v} - (\nabla \cdot \mathbf{v})q - (\nabla \cdot \mathbf{u})p + \frac{1}{\text{Re}} \nabla \mathbf{u}^T : \nabla \mathbf{v}^T \right\} dx = 0.$$

そして、有限差分法により時間方向の離散化を行い、物質微分項に特性曲線法¹³⁾を用いることで、各時間ステップにおける弱形式

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} G_1^n(x, \zeta_1) dx &= 0, \\ G_1^n(x, \zeta_1) &= \frac{\mathbf{u}^{n+1}(x) - \mathbf{u}^n(x - \Delta t \mathbf{u}^n(x))}{\Delta t} \cdot \mathbf{v}^{n+1} \\ &\quad - (\nabla \cdot \mathbf{v}^{n+1})q^{n+1} - (\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1})p^{n+1} \\ &\quad + \nabla(\mathbf{u}^{n+1})^T : \nabla(\mathbf{v}^{n+1})^T, \end{aligned}$$

が得られる。ここで、時間ステップ n 、時間間隔 Δt 、 N_1, N_2 を初期、最終時間ステップ、 $m = N_2 - N_1 + 1$ 、 $\zeta_1 =$

$\{\mathbf{u}^n, p^n, \mathbf{v}^n, q^n\}$ とする。最後に、形状最適化問題における制約関数 $L_1(\boldsymbol{\phi}, \zeta_1)$ を以下のように定義する。

$$L_1(\boldsymbol{\phi}, \zeta_1) = \sum_{n=N_1}^{N_2} \int_{\boldsymbol{\phi}(\Omega)} G_1^n(x, \zeta_1) dx,$$

3.2. Snapshot Proper Orthogonal Decomposition

非定常 Navier-Stokes 方程式を時間積分した後、相関係数行列 $R(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{\mathbf{u}}) \in \mathbb{R}^{m \times m}$ を構成する。

$$\begin{aligned} R(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{\mathbf{u}}) &= \int_{\Omega} \tilde{\mathbf{u}}^T \tilde{\mathbf{u}} dx, \\ \tilde{\mathbf{u}} &= [\mathbf{u}^{N_1}, \dots, \mathbf{u}^n, \dots, \mathbf{u}^{N_1}] \end{aligned}$$

そして、Snapshot Proper Orthogonal Decomposition (Snapshot POD) の固有値問題は解のように定義される。

$$\begin{aligned} R(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{\mathbf{u}})\tilde{\mathbf{u}} &= \omega \tilde{\mathbf{u}}, \\ \omega &= [\omega^1, \dots, \omega^i, \dots, \omega^m], \\ \tilde{\mathbf{u}} &= [\tilde{\mathbf{u}}^1, \dots, \tilde{\mathbf{u}}^i, \dots, \tilde{\mathbf{u}}^m] \end{aligned}$$

ここで、固有値 $\omega \in \mathbb{R}^m$ 、固有関数 $\tilde{\mathbf{u}} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ が数値的に求められれば、POD 基底 $\boldsymbol{\phi} = \omega^{-\frac{1}{2}} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\mathbf{u}} \in \mathbb{R}^{d \times m}$ が得られる。

$$\boldsymbol{\phi} = [\boldsymbol{\phi}^1, \dots, \boldsymbol{\phi}^i, \dots, \boldsymbol{\phi}^m].$$

最後に、形状最適化問題における制約関数 $L_2(\boldsymbol{\phi}, \zeta_2)$ を定義する。

$$\begin{aligned} L_2(\boldsymbol{\phi}, \zeta_2) &= \sum_{n=N_1}^{N_2} G_2(x, \zeta_2), \\ G_2(x, \zeta_2) &= \alpha [\delta_{j \rightarrow k} \{\omega \tilde{\mathbf{u}} - R(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{\mathbf{u}})\tilde{\mathbf{u}}\}] \end{aligned}$$

ここで、 $\alpha \in \mathbb{R}^{m \times m}$ は $\tilde{\mathbf{u}}$ に対する随伴変数、 $\delta_{j \rightarrow k}$ は第 j 主成分から第 k 主成分の固有値を抽出するための重み関数、 $\zeta_2 = \{\omega, \tilde{\mathbf{u}}, \alpha\}$ である。また、 $T_1 = \Delta t N_1$ 及び $T_2 = \Delta t N_2$ である。

3.1. The Reynolds Average Navier-Stokes Problem

ここでは、形状最適化問題における制約関数 $L_1(\boldsymbol{\phi}, \zeta_1)$ を再定義する。

$$L_1(\boldsymbol{\phi}, \zeta_1) \cong \int_{\boldsymbol{\phi}(\Omega)} \bar{G}_1(x, \zeta_1) dx,$$

$$\begin{aligned} \bar{G}_1(x, \zeta_1) &= \{(\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{\mathbf{u}}\} \cdot \bar{\mathbf{v}} - \text{C} : \nabla \bar{\mathbf{v}} + \nabla \bar{\mathbf{u}}^T : \nabla \bar{\mathbf{v}}^T \\ &\quad - (\nabla \cdot \bar{\mathbf{v}}) \bar{p} - (\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}}) \bar{q}. \end{aligned}$$

ここで、 $\{\bar{\mathbf{u}}, \bar{p}\}$ は時間平均速度と圧力であり $\{\bar{\mathbf{v}}, \bar{q}\}$ は対応する随伴変数である。

$$\bar{\mathbf{u}} = \sum_{n=N_1}^{N_2} \mathbf{u}^n, \bar{p} = \sum_{n=N_1}^{N_2} p^n$$

また、 $\text{C} : \nabla \bar{\mathbf{v}}$ は Reynolds Average Navier-Stokes 方程式 (RANS) における時間変動項の弱形式であり、POD 基底 $\boldsymbol{\phi}$ と固有値 ω を用いて C は

$$C = \frac{\pi}{4} \left\{ \sum_{i=2}^m (\omega^i)^2 \right\} \left\{ \sum_{i=2}^m \Phi^i (\Phi^i)^T \right\} \in \mathbb{R}^{d \times d}$$

と記述することが出来る．また、 $C = 0_{\mathbb{R}^{d \times d}}$ の場合は Time Average Navier-Stokes 方程式 (TANS) を考慮していることになる．

4. Shape Optimization Problem and Adjoint Problems

当該研究における形状最適化問題の目的関数を下記のよう

$$f(\phi, \omega) = \sum_{i=1}^m \delta_{j \rightarrow k} \omega^i$$

Lagrange 未定乗数法に基づき、目的汎関数を

$$\begin{aligned} L(\phi, \zeta_1, \zeta_2) \\ = f(\phi, \omega) - L_1(\phi, \zeta_1) - L_2(\phi, \zeta_2), \end{aligned}$$

と記述する．

次に、目的汎関数に対して、 ζ_1, ζ_2 の Frechet 微分をとり、 $\int_{\Omega} G' dx = 0$ から主問題と随伴問題が得られる．具体的には、 $\{\bar{v}, \bar{q}\}$ と α に関して Frechet 微分をとると、主問題として Reynolds Average Navier-Stokes 問題と Snapshot POD の固有値問題が得られる．一方、 $\{\bar{u}, \bar{p}\}$ に関する Frechet 微分をとると Reynolds Average Navier-Stokes 問題の随伴問題として

$$\begin{aligned} (\nabla \bar{u}^T) \bar{v} + (\bar{u} \cdot \nabla) \bar{v} + \nabla \bar{q} - \frac{1}{\text{Re}} \Delta \bar{v} &= 2\sqrt{\omega} \Phi \bar{u}, \\ \bar{v} \cdot \bar{v} &= 0. \end{aligned}$$

が得られる．最後に、主変数と随伴変数を領域積分型と境界積分型の感度に代入する．

5. Numerical Scheme

本研究では、FreeFem++¹¹⁾ を用いて数値計算を行う．速度と圧力 $\{\bar{u}, \bar{p}\}$ の空間方向に対する離散化には、Taylor-Hood (P2-P1) element pair を用いた．その際、レイノルズ数を $\text{Re}=100$ とし、ノード数・要素数は 21945×43290 と固定する．

非定常 Navier-Stokes 方程式を計算する際には、時間方向に有限差分法を用いて離散化した．更に、特性曲線法¹³⁾を用いて物質微分項を評価し、UMFPACK solver¹⁰⁾ を用いて、 $T_1 = 3$ 及び $T_2 = 6$ として各時間ステップの解を求めた．

Snapshot POD の固有値問題については lapack solver を用いた．随伴問題については、UMFPACK solver¹⁰⁾ を用いて解を求めた．

感度を評価した後、感度の滑らかさを回復させるために H^1 勾配法を用いた．その後、Adaptive Mesh Refinement (AMR)¹²⁾ を用いてメッシュを再生成している．

6. Numerical Results

Nakazawa and Nakajima⁸⁾ では、重み関数を $\delta_{2 \rightarrow m}$ として、時間変動場の速度場だけを用いた目的関数を定義し、従来の時間平均を用いた場合と比較して、より直接的に時間変

動場を制御することに成功した．そこで、本研究では、 $\delta_{2 \rightarrow m}$ を固定して、感度を境界積分と領域積分で評価した場合を比較する．更に、領域積分で評価する差には、TANS と RANS での結果もまた比較する．

Table. 1 は、これら 3 ケースにおいて、最適形状における $\sum_{i=2}^m \omega^i$ を示している．この結果から領域積分型で感度を評価し、RANS を制約関数として用いることで、より効率的に時間変動成分を制御できることを確認した．最適形状と形状更新に対する ω^1 と $\sum_{i=2}^m \omega^i$ の変化については、Appendix A と Appendix B を参照されたい．

Table. 1 Comparisons of $\sum_{i=2}^m \omega^i$ in 3 cases.

	Boundary Integration type	Volume Integration Type with TANS	Volume Integration Type with RANS
$\sum_{i=2}^m \omega^i$	0.0205869	0.0203411	0.0203278

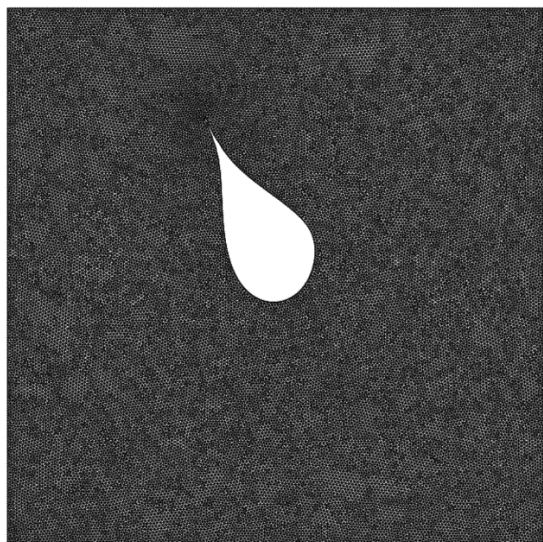
7. Conclusions

本研究では、Reynolds Average Navier-Stokes 方程式 (RANS) を主問題と定義し、領域積分型で感度を評価する．その際、初期形状には内部に円盤形の孤立物体を有する 2 次元 Cavity 流れを採用し、数値的に当該形状最適化問題の妥当性を検証した．その結果、領域積分型で感度を評価し、RANS を制約関数として用いることで、より効率的に時間変動成分を制御できることを確認した．

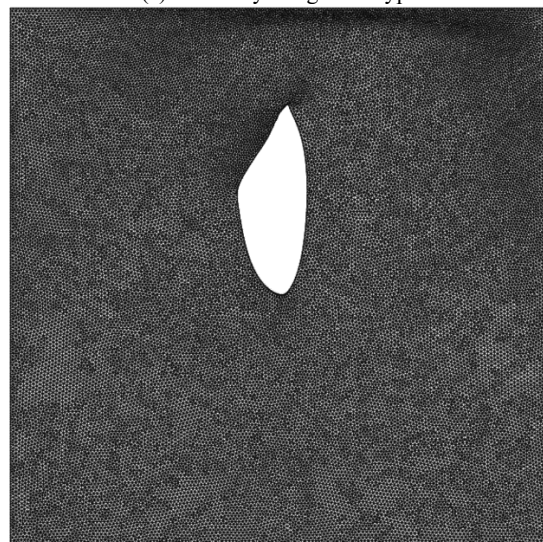
参考文献

- 1) Pironneau, O., On optimum profiles in Stokes flow, JFM, 59, 117-128, 1973.
- 2) Pironneau, O., On optimum design in fluid mechanics, JFM, 64, 97-110, 1974.
- 3) Haslinger, J. and Makinen R, A. E., Introduction to Shape Optimization: Theory, Approximation, and Computation, SIAM, Philadelphia, 2003.
- 4) Moubachir, M and Zolesio, J. P., Moving Shape Analysis and Control: Applications to Fluid Structure Interactions, Chapman and Hall / CRC Pure and Applied Mathematics. Boca Raton, 2006.
- 5) Sokolowski, J., Zolesio, J.P., Introduction to Shape Optimization: Shape Sensitivity Analysis (Springer Series in Computational Mathematics). Springer.
- 6) Mohammadi, B. and Pironneau, O., Applied Shape Optimization for Fluids, Oxford University Press, 2001.
- 7) Nakazawa, T., Shape Optimization of Flow Fields Considering Proper Orthogonal Decomposition, Math.l Anal. of Cont. Mech. and Indust. Appl., 2018.
- 8) Nakazawa, T. and Nakajima, C., Optimal Design by Adaptive Mesh Refinement on Shape Optimization of Flow Fields Considering Proper Orthogonal Decomposition, Interdiscip. Inf. Scie., submitted.
- 9) Kimura, K., Lecture notes Volume IV, Topics in Mathematical Modeling, 1-38, 2008.
- 10) Davis, T., Algorithm 832: UMFPACK, an unsymmetric-pattern multifrontal method, ACM Trans. on Math. Software, 30, 196-199, 2004.
- 11) Hecht, F., New development in FreeFem++, J. of Numerical Math, 20, 251-265, 2012.
- 12) Mohammadi, B. and Hecht, F., Mesh Adaptation for Time Dependent Simulation, Optimization and Control, Revue Europeenne des elements finis, 10, 575-595, 2001.
- 13) Notsu, H., Tabata, M., Error estimates of a pressure-stabilized characteristics finite element scheme for Oseen equations, J. Sci. Comput, 65, 940-955, 2015.

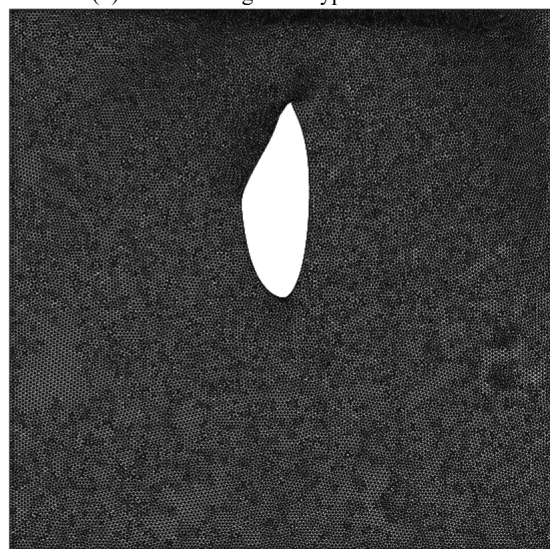
Appendix A



(a) Boundary Integration type



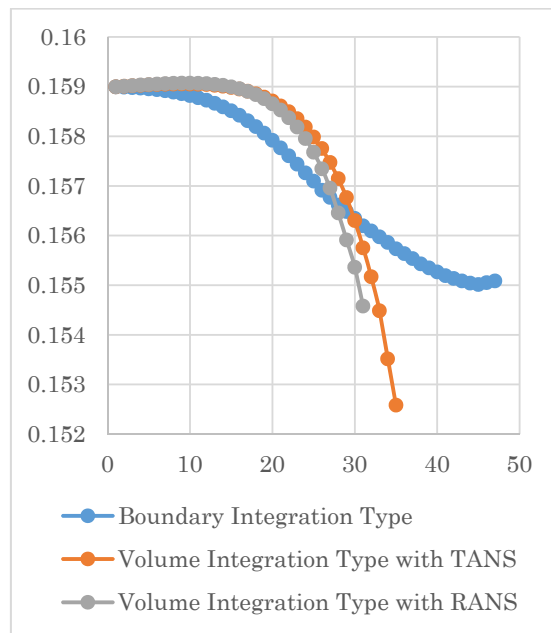
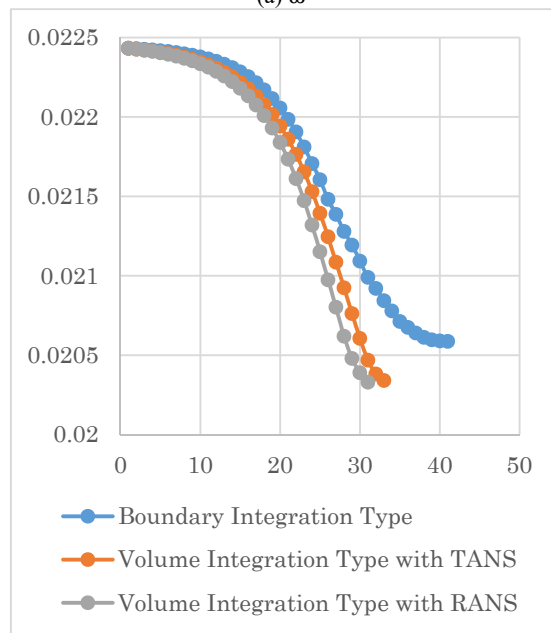
(b) Volume Integration type with TANS



(c) Volume Integration type with RANS

Fig. 1 Optimal shapes.

Appendix B

(a) ω^1 (b) $\sum_{i=2}^m \omega^i$ Fig. 2 ω^1 and $\sum_{i=2}^m \omega^i$ with reshaping steps.