1E-01

ニューラルネットワークによる流体界面の曲率計算

笠　晃一
福岡工業大学 情報工学部

1．はじめに

コンピュータグラフィックスにおける液体の表現に流体力学が使用されることが多いが，表面張力の計算は流体力学でも困難な問題の一つとされている．それは表面張力の計算に流体界面における曲率の計算が不可欠であるが，曲率計算の精度を上げることが難しいからである．特に VOF 法は数値流体力学の主流をなしているが，この手法において曲率を精度よく求めることは困難である．そこで本研究ではニューラルネットワークを用いて曲率計算を行うことを試みた．その結果，他の手法に比べ特に曲率が大きい場合に精度よく曲率が求められることが明らかになった．なお，この研究はニューラルネットワークをプログラミングパラダイムやプログラミングツールの一種とみなす考え方 [1] の一例でもある．すなわち，曲率を求めるアルゴリズムを別に開発せずとも，曲率を求め得ることが示されている．

2．これまでの研究

数値流体力学における気液二相流の表現は，レベルセット法を用いるものと VOF 法を用いるものに大別できる．レベルセット法の場合は符号付き距離関数のゼロ点集合として気液界面を表現し，VOF 法の場合は微小セルにおける液体の割合を使用して気液界面を表現する．しかし，レベルセット法を使用すると体積が保存されないことが知られており，VOF 法の方が気液二相流解析手法の主流をなしているため，ここでは分野を VOF 法に限定して研究を実施した．

VOF 法において曲率を求める手法は，VOF 関数を元にしてレベルセット法の符号付き距離関数を作成し，これから曲率を計算するというものが一般的である．すなわち，VOF 関数 $\phi(\mathbf{x},t)$ を元にして次のような関数を作成する．

$$f(\mathbf{x},t)=\phi(\mathbf{x},t)-0.5 \tag{1}$$

そして, 関数 (1) が界面近傍で近似的にレベルセット関数になっているものと見なし，これからさらに符号付き距離関数を作成し，曲率を求めるのである．近似的なレベルセット関数から符号付き距離関数を求める手法は再初期化と呼ばれ，様々な手法が開発されている．代表的な手法に Russo と Smereka によるもの [2] があるが，関数 (2) をレベルセット関数とみなした時点で誤差が混入するため，曲率の精度はあまりよくない．

Cummins らは VOF 関数を使用して各セルにおいて液面を再構築し，これを用いて符号付き距離関数を作成することにより曲率を計算するという手法 [3] を提案した．この手法は再初期化を用いる手法より高精度であるが，精度が液面を再構築する方法に大きく依存し，液面の再構築を高精度で実行するのは大きな負荷となる．

レベルセット法の符号付き距離関数を利用しない手法もある．Meier らは，当該セルを含む３×３のステンシルにおける VOF 関数から特徴量を計算し，特徴量の３次多項式から曲率を求めるという手法 [4] を提案した．２次元の場合の特徴量は 1 番目が当該セルの VOF 値であり，2 番目が当該セルの界面法線ベクトルが水平線または垂直線となす角度である．そして，３番目がステンシル内の VOF 値の総和から，ステンシルの各セルに当該セルの再構築平面を適用したときの VOF 値の総和を引いたものである．したがって，この手法も液面の再構築を必要とするし，精度もそれほど高くない．

高さ関数法 [3] は２次元の場合，３×７のステンシルにおいて長い方向に VOF 値の和を求め，これらの和から曲率を計算するというもので，特に曲率が小さい場合に精度が高くなる．しかし，ステンシルが大きすぎるため，ステンシルの中に２つの界面が入る場合があるし，またパターンによっては曲率が計算不能なこともある．

3．ニューラルネットによる曲率計算

ニューラルネットワークの関数近似能力に関する定理として，Cybenko の普遍性定理がよく知られている．これは，３層ニューラルネットワークの隠れ層の素子数を増やせば任意の関数をいくらでも近似できるというものである．本研究では，当該セルを含む３×３のステンシルにおける VOF 値を入力とし，曲率を出力とする関数を３層ニューラルネットワークを使用して近似することを試みた．図 1 にその様子を示す．隠れ層の素子

Curvature calculation for fluid interfaces using neural network
Koichi Ryu
Fukuoka Institute of Technology

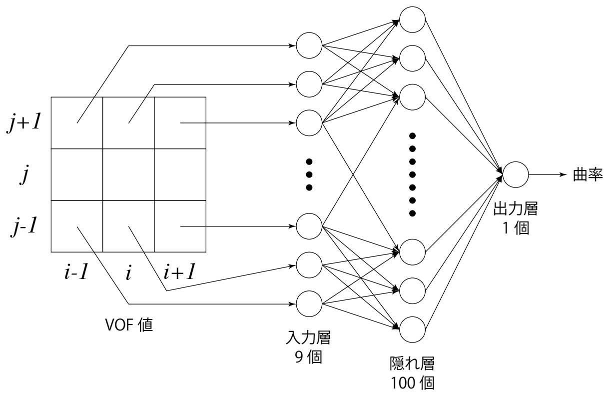

図１ ニューラルネットワークの構成

数は 100 個であるが，まだ最適化されていない．隠れ層の素子の出力の計算式は次の通りである．

$$h_j = S\left(\sum_{i=1}^{9} w_{ji}\, f_i\right) \quad (2)$$

$$S(x) = \frac{1}{1+\exp(-x)} \quad (3)$$

また，出力層の素子の出力の計算式は次のような単なる隠れ層の出力の線形和であり，(3) 式のシグモイド関数は使用していない．それは，連続関数の近似にはその方が適しているからである．

$$o_k = \sum_{j=1}^{100} \tilde{w}_{kj} h_j \quad (4)$$

学習データとして図２に示すものを用いた．これは３×３のステンシルの中心セルの様子を図示したものである．学習に使用した x，y，α および κ の値を次に示す．

$x/\Delta x = 0 \sim 1$（0.2 刻み）
$y/\Delta y = 0 \sim 1$（0.2 刻み）
$\alpha/\pi = 0 \sim 0.25$（0.05 刻み）
$\kappa\Delta x = -1 \sim 1$（0.1 刻み）

ただし，これだけの学習データだと学習不足になることが明らかになったため，学習点 (x,y) を若干追加した．

学習後のニューラルネットワークを用いて，様々な半径を持つ円の曲率計算を試みた．これは学習外データである．結果の L2 誤差を他の手法の L2 誤差とともに図３に示す．特に曲率が大きい場合にニューラルネットワークを用いる手法でよい結果が得られていることが分かる．

４．おわりに

３層のニューラルネットワークを使用した曲率計算法について述べた．今後の課題として計算時間の短縮と３次元への拡張が挙げられる．計算時間の短縮には隠れ層の素子数を減少させることが有効であるが，精度が低下するのを防ぐために，畳み込みニューラルネットワークを使用したり層の数を増加させたりする必要があると思われる．

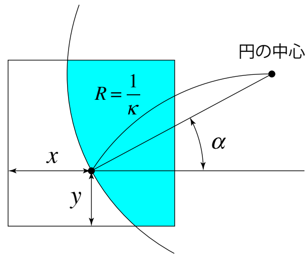

図２ 学習データ

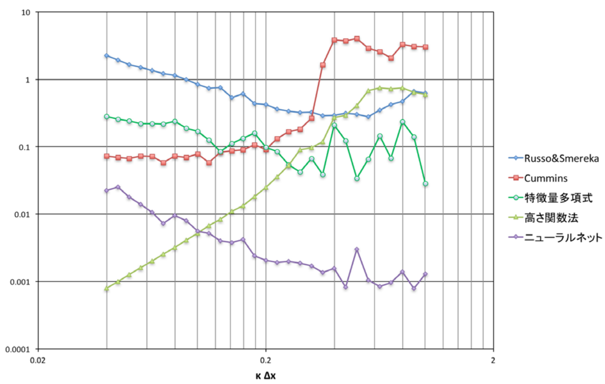

図３ 曲率計算手法の L2 誤差の比較

参考文献

[1] 丸山宏：プログラミングパラダイムとしての深層学習，情報処理，Vol.57, No.10 (2016).
[2] G. Russo and P. Smereka : A Remark on Computing Distance Functions, Journal of Computational Physics, Vol.163, pp.51-67 (2000).
[3] S. J. Cummins, M. M. Francois and D. B. Kothe : Estimating curvature from volume fractions, Computers and Structures, Vol.83, pp.425–434 (2005).
[4] M. Meier, G. Yadigaroglu, B. L. Smith : A novel technique for including surface tension in PLIC-VOF methods, European Journal of Mechanics B/Fluids, Vol.21, pp.61-73 (2002).
[5] G. Cybenko : Approximations by superpositions of sigmoidal functions, Mathematics of Control, Signals, and Systems, 2 (4), pp.303-314 (1989).