DOI: 10.15514/ISPRAS-2023-35(6)-13

Применение алгоритмов машинного обучения для предсказания турбулентной вязкости

[1, 2] *Д.И. Романова,* ORCID: 0000-0002-5771-4114 <*romanovadi@gmail.com*>
[1] *А.С. Епихин,* ORCID: 0000-0002-6249-4283 <*andreyepikhin@ispras.ru*>
[1] *Д.Ю. Ильина,* ORCID: 0009-0009-6321-7155 <*ilina.diu@ispras.ru*>

[1] *Институт системного программирования РАН,*
Россия, 109004, г. Москва, ул. А. Солженицына, д. 25.
[2] *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1.

Аннотация. В работе проведено исследование алгоритмов машинного обучения для предсказания турбулентной вязкости на примере течения за обратным уступом. Данные для обучения получены с помощью расчёта с применением программного комплекса OpenFOAM и модели турбулентности $\boldsymbol{k-\varepsilon}$. Для предсказания турбулентной вязкости выполнен анализ значимости параметров течения, включающих пульсации скоростей, градиенты давления и скорости, инварианты тензора скоростей деформаций и их комбинации. Произведено сравнение различных алгоритмов машинного обучения и проанализирована значимость входных признаков. Получено, что наиболее оптимальный алгоритм для предсказания турбулентной вязкости в данной задаче является Decision Tree Regressor. С помощью выбранной модели выполнено предсказание распределения турбулентной вязкости в расчётной области для различных чисел Рейнольдса.

Ключевые слова: турбулентная вязкость; машинное обучение; обратный уступ; осреднённые по Рейнольдсу уравнения Навье-Стокса; OpenFOAM.

Для цитирования: Романова Д.И., Епихин А.С., Ильина Д.Ю. Применение алгоритмов машинного обучения для предсказания турбулентной вязкости. Труды ИСП РАН, том 35, вып. 6, 2023 г., стр. 199–212. DOI: 10.15514/ISPRAS–2023–35(6)–13.

Благодарности: Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (проект № 23-71-10091).

Application of Machine Learning Algorithms to Predict Turbulent Viscosity

[1,2] *D.I. Romanova,* ORCID: 0000-0002-5771-4114 <romanovadi@gmail.com>
[1] *A.S. Epikhin,* ORCID: 0000-0002-6249-4283 <andreyepikhin@ispras.ru>
[1] *D.Yu. Ilina,* ORCID: 0009-0009-6321-7155 <ilina.diu@ispras.ru>

[1] *Institute for System Programming of the Russian Academy of Sciences,*
25, Alexander Solzhenitsyn st., Moscow, 109004, Russia.
[2] *Lomonosov Moscow State University,*
GSP-1, Leninskie Gory, Moscow, 119991, Russia.

Abstract. The article discusses machine learning algorithms for predicting turbulent viscosity using the case of flow past the backward-facing step. The training data is obtained by calculations using the OpenFOAM software package and a $\boldsymbol{k-\varepsilon}$ turbulence model. The significance of flow parameters, including velocity fluctuations, pressure and velocity gradients, strain rate tensor and their combinations and invariants are analyzed for predicting turbulent viscosity. Different machine learning algorithms are compared. It is found that the most optimal algorithm for predicting turbulent viscosity in this case is the Decision Tree Regressor. Using the chosen model, the distribution of turbulent viscosity in the computational domain is predicted for various Reynolds numbers.

Keywords: turbulent viscosity; machine learning; backward step; Reynolds-averaged Navier-Stokes equations; OpenFOAM.

For citation: Romanova D.I., Epikhin A.S., Ilina D.Yu. Application of machine learning algorithms to predict turbulent viscosity. *Trudy ISP RAN/Proc. ISP RAS*, vol. 35, issue 6, 2023. pp. 199-212 (in Russian). DOI: 10.15514/ISPRAS-2023-35(6)-13.

Acknowledgements. The research was supported by the Russian Science Foundation, grant No. 23-71-10091.

1. Введение

Алгоритмы машинного обучения (МО) стали мощным подходом для решения проблем во многих областях, таких как обработка и классификация изображений, поисковые и рекомендательные системы, распознавание речи, автопилот и здравоохранение, а также многие другие. Расширение области применения МО привело к созданию новых алгоритмов в гидро- и аэромеханике. Что крайне важно для области, так как позволяет получить более точное решение с использованием меньших вычислительных затрат. Например, в работе [1] используется технология SD (Shallow Decoder) для предсказания точной картины турбулентного течения на основе данных осреднённого моделирования на грубой сетке.

В последнее время физически обусловленные нейронные сети (Physics-Informed Neural Networks (PINN)) получили широкое распространение и показывают хороший результат при гладком решении [2]–[5]. Однако их производительность падает при наличии резких градиентов или разрывов. В работах [6]–[9] нейронные сети используются для предсказания турбулентных напряжений в различных вариантах. В частности, в работе [6] используются TBNN (Tensor Basis Neural Network) для предсказания анизотропного тензора напряжений Рейнольдса.

В работе [7] используются две нейронных сети, первая из которых предсказывает оптимальную турбулентную вязкость, а вторая для предсказания нелинейной части напряжений Рейнольдса. Для обучения нейронной сети используется DNS (Direct Numerical Simulation) расчёт задачи течения над периодическим холмом. Расчёт с помощью полученной модели по своему качеству превзошел RANS моделирование с использованием модели турбулентности.

Кластеризация данных используется в работе [8] для выявления областей для обучения напряжения, позволяя увеличить эффективность обучения нейронной сети, которая предсказывает напряжения Рейнольдса. Такого рода подход позволяет отбросить часть данных, не представляющую интереса для обучения, которая составляет довольно большую часть датасета. Работа [9] посвящена модификациям стандартной нейронной сети для учёта граничных условий при вычислении анизотропной части рейнольдсовых напряжений. Модель также принимает на вход число Рейнольдса, что позволило получить улучшение решения в сравнении с работой [6].

Глубокая нейронная сеть, обученная на DNS данных, используется в работе [10] для предсказания напряжений Рейнольдса вместо гипотезы Буссинеска. В качестве входных признаков для нейронной сети авторы используют такие RANS данные, как турбулентная кинетическая энергия, диссипация турбулентной кинетической энергии, скорость, градиент скорости, градиент давления, тензор деформаций, и расстояние до стенки. Расчёт с использованием предложенной модели значительно превосходит точностью классический RANS расчёт с использованием модели турбулентности.

В перечисленных работах представлены возможности большого класса моделей машинного обучения, однако прямое использование их затруднено в силу отсутствия реализации описанных алгоритмов в открытом доступе. Таким образом, актуальность настоящей работы заключается в исследовании алгоритмов машинного обучения и выборе оптимальной модели для предсказания турбулентной вязкости, что в дальнейшем позволит предложить новую модель турбулентности. Преимуществом такого рода модели является их универсальность, так как большинство существующих RANS моделей турбулентности имеют достаточно ограниченную область применимости и часто требуют калибровки коэффициентов для точного расчёта той или иной задачи [11]–[16].

2. Обзор форматирования

Рассматривается классическая задача течения за обратным уступом, которая подробно описана в работе [17]. Расчёт потока проводится с использованием осреднённых по Рейнольдсу уравнений Навье–Стокса:

$$\begin{cases} \nabla \cdot U = 0, \\ \frac{\partial U}{\partial t} + (U \cdot \nabla)U = \frac{-1}{\rho}\nabla p + (\nu_m + \nu_t)\nabla^2 U. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь U — средняя по Рейнольдсу скорость, p — давление с учётом турбулентной кинетической энергии, $\rho = \mathrm{const}$ — плотность потока, ν_m — молекулярная кинематическая вязкость, ν_t — турбулентная вязкость, $s = 0.5(\nabla U + (\nabla U)^T)$ — осреднённый тензор скоростей деформаций.

2.1 Расчет турбулентной вязкости

Расчёт турбулентной вязкости проводится с использованием $k - \varepsilon$ модели турбулентности [18], [19]. В данной модели турбулентная кинематическая вязкость вычисляется по формуле (2).

$$\nu_t = \frac{C_\mu k^2}{\varepsilon}, \quad (2)$$

где k — турбулентная кинетическая энергия; ε — диссипация турбулентной кинетической энергии, C_μ — коэффициент турбулентной модели.

Для расчёта k и εсистема уравнений (1) дополняется двумя уравнениями (3).

$$\begin{cases} \frac{\partial k}{\partial t} + (U \cdot \nabla)k = \nabla \cdot (\nu_m \nabla k) - \nabla \cdot \left(\frac{\nu_t}{\sigma_k}\nabla k + P_k\right) - \varepsilon, \\ \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + (U \cdot \nabla)\varepsilon = C_{\varepsilon 1} P_k \frac{\varepsilon}{k} - C_{\varepsilon 2}\frac{\varepsilon^2}{k} + \nabla \cdot \left(\frac{\nu_t}{\sigma_\varepsilon}\nabla\varepsilon\right). \end{cases} \quad (3)$$

Здесь $P_k = \nu_t \nabla U \cdot [\nabla U + (\nabla U)^T]$ — скорость производства турбулентной кинетической энергии средним течением, $C_\mu = 0.09$, $C_{\varepsilon 1} = 1.44$, $C_{\varepsilon 2} = 1.92$, $\sigma_k = 1.0$, $\sigma_\varepsilon = 1.3$ — коэффициенты модели турбулентности.

2.2 Предсказание турбулентной вязкости при помощи алгоритмов машинного обучения

Предсказание турбулентной вязкости с помощью алгоритмов машинного обучения происходит на основе обезразмеренных средних параметров течения, и их комбинаций, перечисленных в следующем разделе, по формуле (4).

$$\nu_t = g\big(f_i(\tilde{U}, \tilde{p})\big), \tag{4}$$

где g — некоторая функция, определяемая используемым алгоритмом машинного обучения. Обезразмеривание проводится с помощью параметров U_0, ν_m и H — характерная длина (в задаче с обратным уступом это высота уступа).

2.3 Начальные и граничные условия

Для замыкания математической модели, приведённой в предыдущем разделе необходимо определить начальные и граничные условия в задаче течения над обратным уступом, показанной на рис. 1. Высота ступеньки $H = 0.025$ м.

В начальный момент времени среда в расчётной области покоится, молекулярная кинематическая вязкость $\nu_m = 1.5114 \cdot 10^{-5}$ м^2/с. На входе в расчётную область (слева на рис. 1) поток имеет постоянную скорость $U_0 = 13.3$ м/с. Тогда число Рейнольдса $\mathrm{Re} = U_0\, H/\nu_m = 22000$. На выходе расчётной области (справа на рис. 1) задано условие нулевого градиента. На верхней и нижней границах канала стоит условие прилипания. Задача рассматривается в двумерной постановке, на передней и задней гранях граничные условия не задаются. Давление во всей расчётной области в начальный момент времени задано $p_0 = 0$ м^2/с^2. Расчётная область содержит 2991 ячеек.

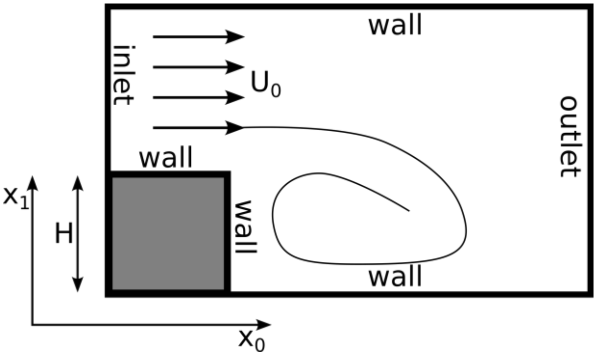


Рис. 1. Задача течения над обратным уступом
Fig. 1. Flow past backward facing step

Турбулентная кинетическая энергия на входе задаётся значением $k = 0.2388$ м^2/с^2, которое получается по формуле $k = 3/2 \cdot (U_0 \cdot I)^2$, где $I = 0.03$ — интенсивность турбулентности. На стенках используются пристеночные функции, на выходе — условие нулевого градиента. Диссипация турбулентной кинетической энергии на входе задаётся значением $\varepsilon = 15.3401$ м^2/с^3, которое вычисляется по формуле $\varepsilon = C_\mu^{3/4} \cdot k^{3/2}/l$, где $l = 0.05 \cdot h$. Так же, как и в случае турбулентной кинетической энергии на стенках используются пристеночные функции, на выходе – условие нулевого градиента (табл. 1).

Для валидации решения использовались расчёты при других числах Рейнольдса – $\mathrm{Re} = 20000{,}15000$, которые достигались увеличением молекулярной кинематической вязкости в расчёте до $\nu_m = 1.6625 \cdot 10^{-5}$ и $2.21667 \cdot 10^{-5}$ м^2/с соответственно.

Табл.1. Граничные условия в пакете OpenFOAM
Table 1. Boundary conditions in OpenFOAM package

	inlet	**outlet**	**wall**
U	13.3 м/с	zeroGradient	noSlip
p	zeroGradient	0 м^2/с^2	zeroGradient
k	0.2388 м^2/с^2	zeroGradient	kqRWallFunction
ε	15.3401 м^2/с^3	zeroGradient	epsilonWallFunction

3 Обучающая выборка

3.1 Начальные и граничные условия

С применением пакета OpenFOAM проведен расчет течения за обратным уступом и получена обучающая выборка в соответствии с математической моделью, приведённой в разделе 2. На рис. 1 приведено сравнение численного моделирования с экспериментом [17].

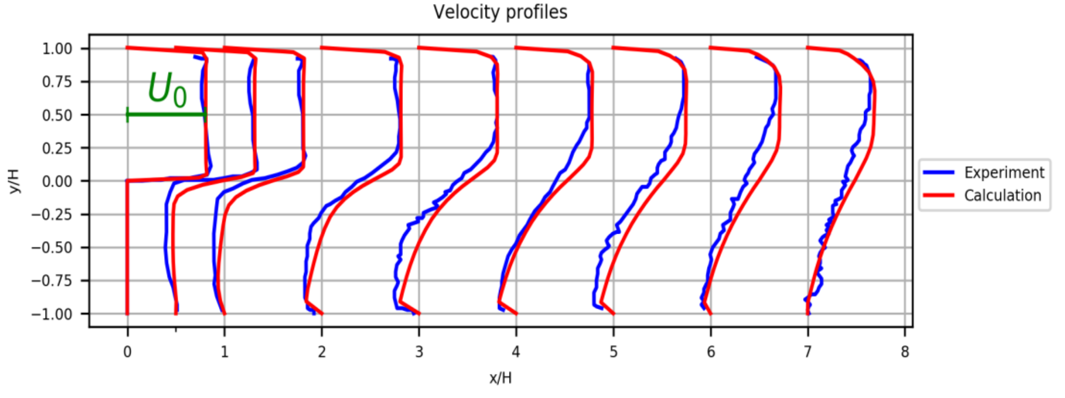


Рис. 2. Профили скорости в различных сечениях за обратным уступом
Fig. 2. Velocity profiles in various sections in flow past backward facing step

Среднеквадратичное отклонение расчётных профилей от экспериментальных, вычисляемое по 270 точкам (по 30 точек в каждом сечении) составило 0.7%. Исходя из этого значения, можно считать полученный расчёт достаточно точным. В настоящей работе полученные расчётные данные будут использованы для обучения моделей, предсказывающих турбулентную вязкость.

В качестве обучающей выборки берутся данные с временных срезов, взятых каждые 0.01 с с нулевого момента времени, по момент времени 0.3 с, когда происходит выход на стационар. Итого получается 30 временных срезов, 29 из которых берутся для обучения и 1 временной срез в момент 0.23 с — для тестирования. Каждый из срезов по времени содержит записи в 2991 пространственной точке, каждая из которых состоит из 130 признаков (всего датасет содержит 89730 строк).

В тестовый момент времени 0.23 с турбулентная вязкость имеет следующее распределение в расчётной области, которое показано на рис. 2.

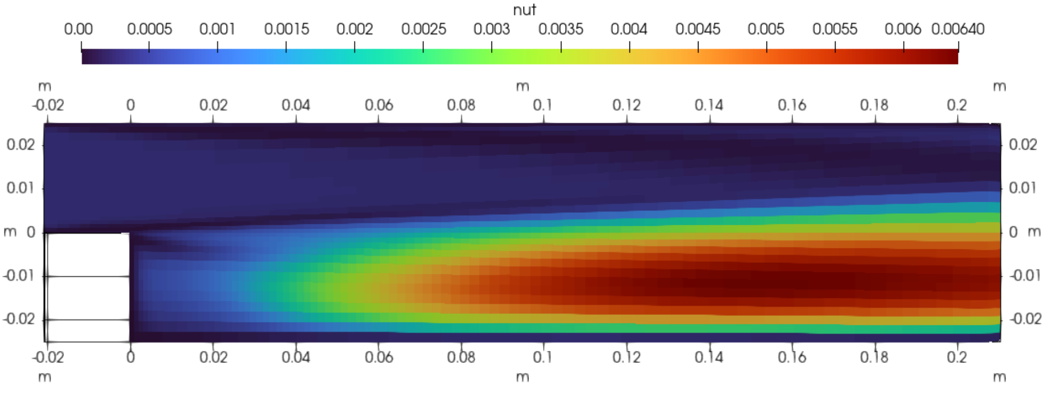


Рис. 3. Распределение турбулентной вязкости в расчётной области в момент времени 0.23 с, полученное с помощью $k-\varepsilon$ модели турбулентности
Fig. 3. Distribution of turbulent viscosity in the computational domain at time 0.23 s, obtained using the $k-\varepsilon$ turbulence model

3.2 Исследование параметров течения, используемых в качестве входных признаков

В настоящем разделе будут перечисленные всевозможные параметры течения и обоснования значимости их использования для предсказания турбулентной вязкости. В следующем разделе будет проведено подробное исследование вклада каждого из параметров в результат предсказания, и часть параметров будет исключена. Параметры течения и их комбинации, которые возможно использовать алгоритмами МО в качестве входных признаков можно разделить на три логические группы.

Первая группа содержит основные параметры течения — это давление p, компоненты скорости U_i, магнитуда скорости $|U|$, среднее по Рейнольдсу значение скорости $\overline{U}$ и квадрат пульсаций скорости $\overline{U'}^2$. Здесь и ниже используются обезразмеренные параметры, но знак волны над ними опускается.

Следующая группа входных признаков обусловлена общим видом зависимости турбулентной вязкости от параметров течения наиболее распространённым в настоящее время. Исходя из гипотезы Буссинеска о линейной зависимости турбулентной вязкости от тензора скоростей деформаций s, компоненты последнего используются в качестве входных признаков. Также существует и обобщенная гипотеза, предложенная Поупом [20], которая включает в себя зависимость не только от тензора скоростей деформаций s, но и от тензора завихренности $r = 0.5(\nabla U - (\nabla U)^T)$ и других параметров, приведённых в (5) и (6). Так же к этой группе признаков относится параметр y — расстояние до стенки.

Разрабатываемые алгоритмы имеют своей целью предсказание турбулентной вязкости в каждой из ячеек расчётной сетки, без ограничений на геометрию задачи и её расчётной сетки. В связи с этим появляется необходимость передать информацию о течении в окрестности точки предсказания. Для этого используется третья группа входных признаков, которая содержит градиенты основных параметров и их инварианты: ∇U, $I_1(\nabla U)$, $I_2(\nabla U)$, ∇p, $|\nabla p|$. В этой группе также представлен параметр V — объём ячеек расчётной ячейки.

$$\lambda_1 = Tr(s^2), \lambda_2 = Tr(r^2), \lambda_3 = Tr(s^3),$$
$$\lambda_4 = Tr(r^2 s), \lambda_5 = Tr(r^2 s^2). \tag{5}$$

$$
\begin{aligned}
&T^{(1)} = s, && T^{(6)} = r^2 s + s r^2 - \frac{2}{3} I \cdot Tr(s r^2),\\
&T^{(2)} = sr - rs, && T^{(7)} = r s r^2 - r^2 s r,\\
&T^{(3)} = s^2 - \frac{1}{3} I \cdot Tr(s^2), && T^{(8)} = s r s^2 - s^2 r s,\\
&T^{(4)} = r^2 - \frac{1}{3} I \cdot Tr(r^2), && T^{(9)} = r^2 s^2 + s^2 r^2 - \frac{2}{3} I \cdot Tr(s^2 r^2),\\
&T^{(5)} = r s^2 - s^2 r, && T^{(10)} = r s^2 r^2 - r^2 s^2 r,
\end{aligned}
\tag{6}
$$

Выше был перечислен полный список используемых входных признаков, который в дальнейшем будет сокращён.

4 Анализ входных признаков

Всего среди входных параметров получилось 130 признаков. Данная цифра включает в себя компоненты векторов и тензоров по отдельности. Необходимо произвести оценку значимости каждого из входных признаков для оптимизации работы алгоритмов МО.

Из приведённых признаков лишь 58 являются линейно независимыми (у которых корреляция отлична от ±1), что связано с двумерной постановкой рассматриваемой задачи. Данные признаки будут представлять полную группу уникальных признаков. Среди линейно независимых параметров присутствуют компоненты следующих параметров: $|U|$, U, V, $\overline{U}$, p, y, $|\nabla p|$, ∇p, ∇U, λ_1, $\overline{U'}^2$, λ_5, $T^{(6)}$, $T^{(2)}$, $T^{(7)}$, λ_3, $T^{(10)}$, $T^{(9)}$, $I_2(\nabla U)$, $T^{(5)}$, $I_1(\nabla U)$, $T^{(1)}$. Признаки перечислены в порядке уменьшения корреляции с целевым параметром ν_t. Эти входные признаки будут использоваться далее в исследовании. Стоит также отметить, что данные признаки являются значимыми в двумерной задаче, в случае перехода на трёхмерный вариант, значимые признаки и их корреляции могут отличаться.

Объём ячеек расчётной сетки V хорошо коррелирует с целевым параметром турбулентной вязкости, что связано с принципом построения сетки — измельчение её в местах сложного течения. Таким образом при равномерном построении расчётной сетки алгоритмы плохо предсказывают целевой параметр, так как подгоняются по данному параметру. В следствии чего данный параметр был исключён из входных признаков.

В табл. 2 приведены 9 входных признаков и значение их корреляции с целевой переменной ν_t.

Табл.2. Корреляция входных признаков с ν_t
Table 2. Correlation of input features with ν_t

Признак	$\lvert U\rvert$	U_0	$\bar{U}_0$	p	U_1	y	$\bar{U}_1$	$\lvert\nabla p\rvert$
Корреляция с ν_t	0.51	0.48	0.40	0.37	0.34	0.29	0.28	0.26

Следующие параметры течения имеют корреляцию с целевым параметром выше 0.05: $|U|$, U, $\overline{U}$, p, y, $|\nabla p|$, ∇p, ∇U, λ_1, $\overline{U'}^2$, λ_5. Вышеперечисленные признаки выделяются в группу признаков высокой корреляции с целевым параметром.

Визуализация набора данных для 4 входных признаков: $|U|$, p, U_0, U_1, имеющих значительную корреляцию с целевым параметром ν_t приведена на рис. 4.

Различные признаки имеют сильно отличающиеся распределения, так, например, распределение параметров на рис. 4 значительно более равномерное, чем распределение параметров на рис. 5.

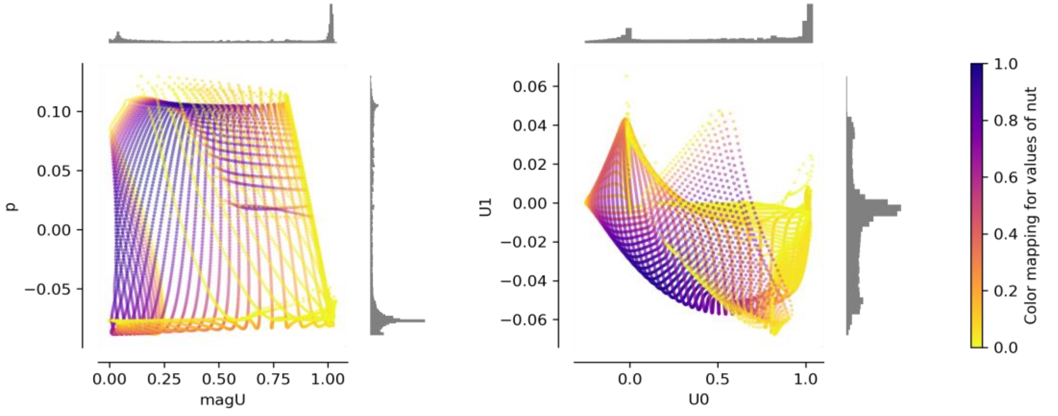


Рис. 4. Зависимость целевой переменной от входных признаков $|U|$, p, U_0, U_1, имеющих значительную корреляцию с целевым параметром

Fig. 4. Dependence of the target variable on input features $|U|$, p, U_0, U_1, having a significant correlation with the target parameter

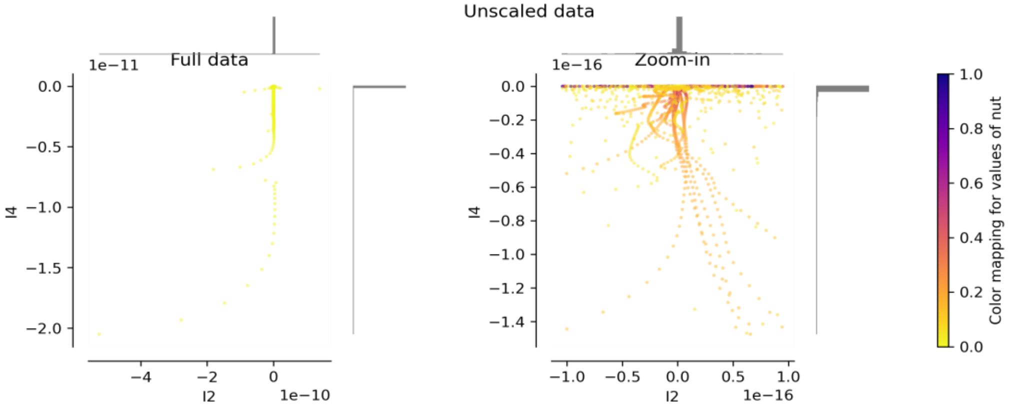


Рис. 5. Зависимость целевой переменной от λ_3 (I2) и λ_5 (I4) входных признаков с плохим распределением

Fig. 5. Dependence of the target variable on λ_3 (I2) and λ_5 (I4) input features with poor distribution

Большое количество выбросов, наблюдаемое на рис. 5 имеет сильное влияние на качество обучения и предсказания моделей. Для действенного уменьшения разброса данных подходят преобразователи данных, основанные на вероятностных характеристиках, такие, как, например, QuantileTransformer и PowerTransformer библиотеки scikit-learn. Однако данные преобразователи не сохраняют расстояний между точками, и в процессе использования будут существенно искажать данные при обобщении решения на другие задачи, в особенности, на задачи с другой геометрией расчётной сетки. В связи с этим было проведено исследование значимости входных параметров, которое показало, что сильно неравномерное распределение параметров плохо сказывается на процесс обучения. Тогда была выделена третья группа входных признаков, которая выбиралась по результатам сравнения распределения конкретного признака с равномерным распределением с помощью теста Колмогорова-Смирнова по двум выборкам. Распределение входного параметра считалось удовлетворительным, если p-value превышало 10^{-6}, либо параметр statistic отличен от единицы. Данная входная группа представлена следующими признаками: U, $\overline{U}$, $\overline{U'}^2$, $|U|$, $I_2(\nabla U)$, p.

Перечисленные три группы входных признаков приведены в табл. 3.

Табл.3. Три группы входных признаков, используемые для предсказания турбулентной вязкости
Table 3. Three groups of input features used for turbulent viscosity prediction

Все линейно-независимые признаки (Unique)	Признаки, обладающие высокой корреляцией с целевым параметром (Correlating)	Признаки с наиболее равномерным распределением (Uniform)
$\|\boldsymbol{U}\|, \boldsymbol{U}, \overline{\boldsymbol{U}}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{y}, \|\boldsymbol{\nabla p}\|, \boldsymbol{\nabla p}, \boldsymbol{\nabla U}, \boldsymbol{\lambda_1}, \overline{\boldsymbol{U'}}^{\boldsymbol{2}}, \boldsymbol{\lambda_5}, \boldsymbol{T^{(6)}}, \boldsymbol{T^{(2)}}, \boldsymbol{T^{(7)}}, \boldsymbol{\lambda_3}, \boldsymbol{T^{(10)}}, \boldsymbol{T^{(9)}}, \boldsymbol{I_2(\nabla U)}, \boldsymbol{T^{(5)}}, \boldsymbol{I_1(\nabla U)}, \boldsymbol{T^{(1)}}$	$\|\boldsymbol{U}\|, \boldsymbol{U}, \overline{\boldsymbol{U}}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{y}, \|\boldsymbol{\nabla p}\|, \boldsymbol{\nabla p}, \boldsymbol{\nabla U}, \boldsymbol{\lambda_1}, \overline{\boldsymbol{U'}}^{\boldsymbol{2}}, \boldsymbol{\lambda_5}$	$\boldsymbol{U}, \overline{\boldsymbol{U}}, \overline{\boldsymbol{U'}}^{\boldsymbol{2}}, \|\boldsymbol{U}\|, \boldsymbol{I_2(\nabla U)}, \boldsymbol{p}$

5 Алгоритмы машинного обучения

Для предсказания турбулентной вязкости будут использованы следующие алгоритмы машинного обучения:

- Decision Tree Regressor (DTR),
- Random Forest Regressor (RFR),
- K-Neighbors Regressor (KNR),
- Support Vector Regressor (SVR).

Модель регрессии, основанная на дереве решений (Decision Tree Regressor) имеет древовидную структуру. В процессе обучения она разбивает набор данных на все меньшие и меньшие подмножества, таким образом постепенно разрабатывается соответствующее дерево решений. Модель имеет один параметр — max_depth, оптимальное значение которого для рассматриваемой задачи составило 20.

Модель регрессии, основанная на алгоритме случайного леса (Random Forest Regressor) — это метод ансамблевого обучения, который объединяет прогнозы нескольких деревьев решений для получения более точного и стабильного прогноза. Модель имеет один параметр — max_depth, оптимальное значение которого для рассматриваемой задачи составило 35.

Модель регрессии, основанная на алгоритме k ближайших соседей (K-Neighbors Regressor) предсказывает значение целевого параметра методом интерполяции значений в k соседних точках обучающей выборки. Модель имеет один параметр — n_neighbors, оптимальное значение которого для рассматриваемой задачи составило 2.

Модель регрессии, основанная на методе опорных векторов (Support Vector Regressor) разделяет данные гиперповерхностями. Модель обладает двумя параметрами, требующими оптимизации: C = 2000 и g = 5.

6 Результаты

Выполнены расчёты турбулентной вязкости с использованием различных алгоритмов машинного обучения. В табл. 4 представлено время обучения моделей, время предсказания, ошибка предсказания на тесте и ошибка предсказания на валидационной выборке для случая, вычисленные по формуле (7) Расчёты выполнялись для различных наборов данных: все линейно-независимые признаки (Unique), признаки, обладающие высокой корреляцией с целевым параметром (Correlating), признаки с наиболее равномерным распределением

(Uniform). Подробное описание наборов данных приведено в табл. 3. Расчёты проводятся с использованием различных алгоритмов МО, описанных в разделе 5.

$$\mathrm{MAPE} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\frac{target_i - predict_i}{target_i}\cdot 100\% \quad (7)$$

Табл.4. Результаты различных алгоритмов МО
Table 4. Results of different ML algorithms

Данные	Алгоритм	Время обучения (с)	Время предсказания (с)	Ошибка на тесте (%)	Ошибка на валидации (%)
Unique	DTR	0.373000	0.006295	0.1077	12.5783
	RFR	24.900586	0.173247	1.1171	12.4196
	KNR	0.010028	0.370409	180.8233	360.5632
	SVR	9.517584	4.939535	358.1833	506.1422
Correlating	DTR	0.251941	0.011947	0.0468	12.3927
	RFR	14.159169	0.121596	0.9104	13.1626
	KNR	0.003095	0.085218	0.0054	16.1173
	SVR	15.379704	1.817574	0.5049	29.0284
Uniform	DTR	0.174901	0.006432	0.1331	12.7837
	RFR	11.445493	0.158551	1.2617	12.1861
	KNR	0.013292	0.028157	180.8184	360.4825
	SVR	55.467758	2.267595	382.2995	528.7027

Из табл. 4 можно видеть, что алгоритмы KNR и SVR справились с задачей лишь на хорошо коррелирующем с целевым признаком наборе данных, на котором алгоритм KNR имел минимальное время обучения. В среднем минимальное время обучения и предсказания у алгоритма DTR, имеющим, в то же время, минимальную ошибку. Наилучшее качество предсказания алгоритм DTR выдаёт на хорошо коррелирующем с целевым признаком наборе данных.

Сравнение предсказании турбулентной вязкости различными алгоритмами в характерных сечениях для хорошо коррелирующего с целевым признаком набора данных показано на рис. 6. Видно, что для этого набора данных предсказания хорошо совпадают с целевым признаком.

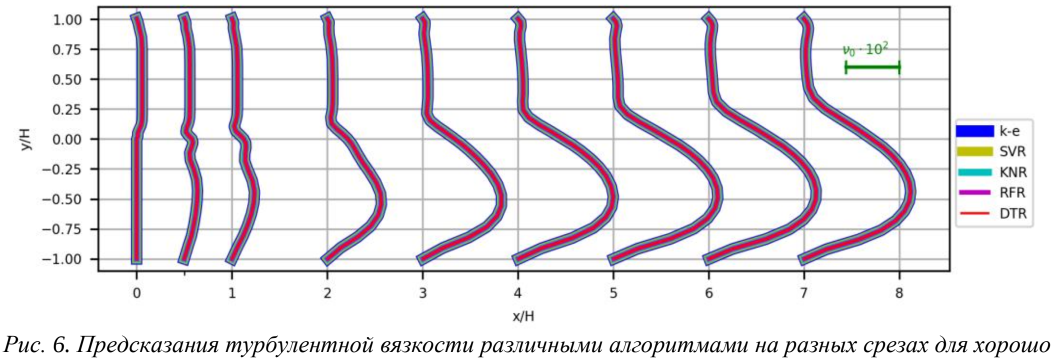
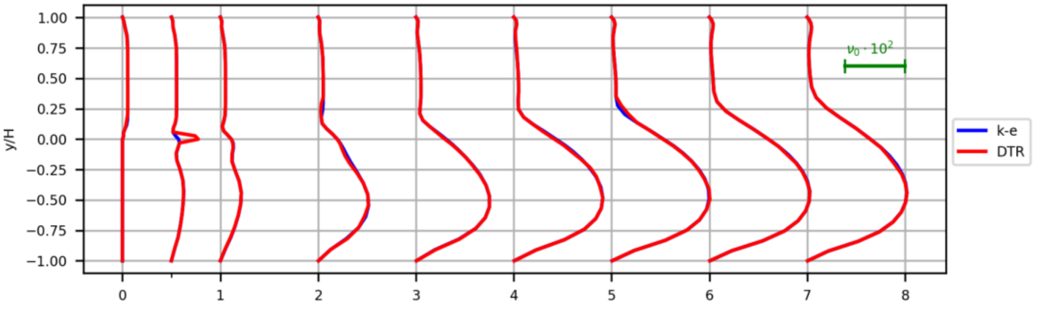
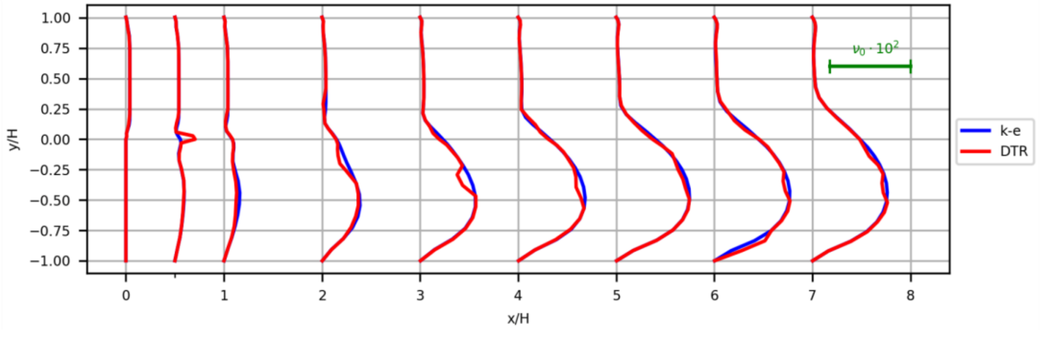


Рис. 6. Предсказания турбулентной вязкости различными алгоритмами на разных срезах для хорошо коррелирующего с целевым признаком набора данных
Fig. 6. Predictions of turbulent viscosity by various algorithms in different sections for a data set that is well correlated with the target feature

Для выбранной задачи и предложенного выше алгоритма машинного обучения проведено предсказание турбулентной вязкости для чисел Рейнольдса 20000 и 15000. Результаты сравнения с расчетом с применением модели турбулентности $k-\varepsilon$ показаны на рис. 7. Видно, что алгоритм DTR удовлетворительно воспроизводит турбулентную вязкость, погрешность в сечениях составляет 1.6% и 2.8%, соответственно.



а)



б)

Рис. 7. Сравнение предсказаний турбулентной вязкости с помощью $k-\varepsilon$ модели турбулентности и алгоритма DTR при: а) $Re = 20000$ и б) $Re = 15000$

Fig. 7. Comparison of turbulent viscosity predictions using the $k-\varepsilon$ turbulence model and the DTR algorithm under: a) $Re = 20000$ and b) $Re = 15000$

7 Выводы

Выполнено исследование методов предсказания турбулентной вязкости с помощью различных алгоритмов машинного обучения. На примере течения за обратным уступом проведён анализ гидродинамических данных с целью получения наилучшего качества предсказания при минимизации требуемых параметров течения. Предложен наиболее быстрый и устойчивый алгоритм — Decision Tree Regressor. В результате анализа значимости входных признаков показано, что наибольшее влияние на качество предсказания оказывает корреляция с целевым параметром. Получено, что алгоритмы, использующие данные, хорошо коррелирующие с целевыми признаками $|U|$, U, $\overline{U}$, p, y, $|\nabla p|$, ∇p, ∇U, λ_1, $\overline{U'}^2$, λ_5, показали наилучшее предсказание целевого параметра. Относительная погрешность между алгоритмом DTR и расчетом с применением модели турбулентности $k-\varepsilon$ составила порядка 0.04% для случая на котором выполнялось обучения модели, для других чисел Рейнольдса ошибка в характерных сечениях не превышала 3%, что говорит о принципиальной возможности использования предложенного алгоритма для предсказания турбулентной вязкости.

Также получено, что ряд признаков мешает обучению моделей. Одним из таких признаков является объём ячейки расчетной сетки. Стоит отметить, что данный параметр подбирается пользователем с учетом общих соображений о характере течения рассматриваемой задачи и не зависит от мгновенной структуры потока. Таким образом данный параметр не является репрезентативным.

Список литературы / References

[1]. N. B. Erichson, L. Mathelin, Z. Yao, S. L. Brunton, M. W. Mahoney, and J. N. Kutz, “Shallow neural networks for fluid flow reconstruction with limited sensors,” Proceedings of the Royal Society A, vol. 476, no. 2238, p. 20200097, 2020, doi: 10.1098/rspa.2020.0097.

[2]. E. Haghighat, A. C. Bekar, E. Madenci, and R. Juanes, “A nonlocal physics-informed deep learning framework using the peridynamic differential operator,” Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol. 385, p. 114012, 2021, doi: 10.1016/j.cma.2021.114012.

[3]. S. Cuomo, V. S. Di Cola, F. Giampaolo, G. Rozza, M. Raissi, and F. Piccialli, “Scientific machine learning through physics–informed neural networks: Where we are and what’s next,” Journal of Scientific Computing, vol. 92, no. 3, p. 88, Jul. 2022, doi: 10.1007/s10915-022-01939-z.

[4]. X. Jin, S. Cai, H. Li, and G. E. Karniadakis, “NSFnets (navier-stokes flow nets): Physics-informed neural networks for the incompressible navier-stokes equations,” Journal of Computational Physics, vol. 426, p. 109951, 2021, doi: https://doi.org/10.1016/j.jcp.2020.109951.

[5]. L. Lu, X. Meng, Z. Mao, and G. Karniadakis, “DeepXDE: A deep learning library for solving differential equations,” SIAM Review, vol. 63, pp. 208–228, Feb. 2021, doi: 10.1137/19M1274067.

[6]. J. Ling, R. Jones, and J. Templeton, “Machine learning strategies for systems with invariance properties,” Journal of Computational Physics, vol. 318, pp. 22–35, 2016, doi: 10.1016/j.jcp.2016.05.003.

[7]. R. McConkey, E. Yee, and F.-S. Lien, “Deep learning-based turbulence closure with improved optimal eddy viscosity prediction,” Jul. 2021.

[8]. Y. Frey Marioni, E. A. de Toledo Ortiz, A. Cassinelli, F. Montomoli, P. Adami, and R. Vazquez, “A machine learning approach to improve turbulence modelling from dns data using neural networks,” International Journal of Turbomachinery, Propulsion and Power, vol. 6, no. 2, 2021, doi: 10.3390/ijtpp6020017.

[9]. R. Fang, D. Sondak, P. Protopapas, and S. Succi, “Neural network models for the anisotropic reynolds stress tensor in turbulent channel flow,” Journal of Turbulence, vol. 21, nos. 9-10, pp. 525–543, 2020, doi: 10.1080/14685248.2019.1706742.

[10]. H. D. Pasinato, F. D. Gerosa, and E. A. Krumrick, “Reynolds stresses prediction using deep neural networks,” Computational Mechanics, vol. XXXVIII, pp. 905–914, 2021.

[11]. G. Kalitzin, G. Medic, and G. Xia, “Improvements to sst turbulence model for free shear layers, turbulent separation and stagnation point anomaly,” in 54th aiaa aerospace sciences meeting, 2016, p. 1601.

[12]. P. C. Rocha, H. B. Rocha, F. M. Carneiro, M. V. da Silva, and C. F. de Andrade, “A case study on the calibration of the k– sst (shear stress transport) turbulence model for small scale wind turbines designed with cambered and symmetrical airfoils,” Energy, vol. 97, pp. 144–150, 2016.

[13]. P. Rocha, H. Rocha, F. Carneiro, M. Silva, and A. Bueno, “K- sst (shear stress transport) turbulence model calibration: A case study on a small scale horizontal axis wind turbine,” Energy, vol. 65, Jan. 2013, doi: 10.1016/j.energy.2013.11.050.

[14]. D. Romanova et al., “Calibration of the k- sst turbulence model for free surface flows on mountain slopes using an experiment,” Fluids, vol. 7, no. 3, 2022, doi: 10.3390/fluids7030111.

[15]. K. Barkalov, I. Lebedev, M. Usova, D. Romanova, D. Ryazanov, and S. Strijhak, “Optimization of turbulence model parameters using the global search method combined with machine learning,” Mathematics, vol. 10, no. 15, 2022, doi: 10.3390/math10152708.

[16]. Д. И. Романова, “Калибровка k- модели турбулентности в пакете openfoam с помощью методов машинного обучения для моделирования потоков на склонах гор на основе эксперимента,” Труды Института системного программирования РАН, vol. 33, no. 4, pp. 227–240, 2021, doi: 10.15514/ispras-2021-33(4)-16.

[17]. R. Pitz and J. Daily, “Experimental study of combustion in a turbulent free shear layer formed at a rearward facing step,” 19th Aerospace Sciences Meeting, 1981, doi: 10.2514/6.1981-106.

[18]. B. Launder and D. Spalding, “The numerical computation of turbulent flows,” Comput. Methods Appl. Mech. Eng., vol. 103, pp. 456–460, Jan. 1974.

[19]. B. Launder, A. Morse, W. Rodi, and D. Spaldiug, “Spaldiug, the prediction of free shear flows - a comparison of the performance of six turbulence models,” Proceedings of NASA Conference on Free Shear Flows, 1972.
[20]. S. B. Pope, “A more general effective-viscosity hypothesis,” Journal of Fluid Mechanics, vol. 72, no. 2, pp. 331–340, 1975, doi: 10.1017/S0022112075003382.

Информация об авторах / Information about authors

Дарья Игоревна РОМАНОВА – кандидат физико-математических наук, младший научный сотрудник Института системного программирования РАН и Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова. Сфера научных интересов: вычислительная аэро- и гидромеханика, турбулентные течения, склоновые течения, машинное обучение.

Daria Igorevna ROMANOVA – Cand. Sci. (Phys.-Math.), junior researcher at the Institute of System Programming and Lomonosov Moscow State University. Research interests: computational aero and fluid mechanics, turbulent flows, slope flows, machine learning.

Андрей Сергеевич ЕПИХИН – кандидат технических наук, зав. лаб. Института системного программирования РАН. Сфера научных интересов: вычислительная аэро- и гидромеханика, турбулентные течения, струйные течения и аэроакустика, разработка программного обеспечения.

Andrey Sergeevich EPIKHIN – Cand. Sci. (Tech.), head of the laboratory at the Institute of System Programming of the RAS. Research interests: computational fluid dynamics, turbulent and jet flows, aeroacoustics, software development.

Дарья Юрьевна ИЛЬИНА – старший лаборант Института системного программирования РАН, студентка 1-го курса магистратуры ФПМИ МФТИ, кафедра Системного Программирования.

Daria Yurevna ILINA – laboratory assistant at the Institute of System Programming of the RAS, 1st year master's degree student, Faculty of Applied Mathematics and Informatics (MIPT).