

УДК 532.517.4; 519.237.8

СТАТИСТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ РАЗВИТИЯ НЕУСТОЙЧИВОСТИ РЕЛЕЯ–ТЕЙЛОРА, ОСНОВАННЫЙ НА НЕЙРОСЕТЕВОЙ КЛАССИФИКАЦИИ ПРОЦЕССОВ

А. С. Нужный, В. Б. Розанов, Р. В. Степанов, С. А. Шумский

В данной работе ведется нейросетевой анализ процессов перемешивания Релея–Тейлора. Цель такого анализа состоит в том, чтобы показать принципиальную возможность вероятностного предсказания развития гидродинамических неустойчивостей, основываясь на ранее известной выборке процессов.

Изучение процессов турбулентного перемешивания является фундаментальной задачей гидродинамики. Чувствительность таких процессов к начальным условиям и возможность значительного влияния на ход процесса мелких вихрей затрудняет классический статистический подход, связанный с пространственным усреднением мелкомасштабных структур. Для преодоления этих трудностей необходимо разработать способ описания турбулентности, учитывающий существенные мелкомасштабные особенности, возникающие каждый раз в данной конкретной задаче.

Один из методов изучения гидродинамических течений – прямой численный расчет по уравнениям гидродинамики. Однако расчеты, близкие к реальным, можно получить только на достаточно мелкой сетке, что требует больших вычислительных ресурсов. Кроме того, численные схемы зависят от начальных условий, что часто делает невозможным их практическое применение. Отсюда вытекает еще одна проблема: на сегодняшний день существует множество численных методик (как для расчета двумерных, так и для трехмерных течений), однако нет общего правила сравнения этих методик как с реальным физическим экспериментом, так и между собой. В численной схеме невозможно реализовать те же начальные условия, какие были в эксперименте. Таким образом, теоретическим исследованиям часто недостает экспериментальной проверки.

Другой метод описания гидродинамических течений заключается в построении малопараметрических моделей путем осреднения уравнений гидродинамики и последующей корректировки свободных параметров посредством сравнения с экспериментальными данными. Такие модели, в свою очередь, имеют достаточно узкую область применения.

Предлагаемый в данной работе подход заключается в анализе расчетного материала, на основании которого можно строить выводы о поведении подобного рода процессов и, в некоторой степени, осуществлять прогноз развития гидродинамических неустойчивостей. В качестве такого "обучающего" материала использовалось множество расчетов перемешивания Релея–Тейлора (РТ) [3], полученных по программам NUT [4] и MAX [5].

Далее дается описание расчетной базы процессов развития неустойчивости Релея–Тейлора, полученной с помощью численных методик NUT и MAX. Изложен принцип кодирования исходной информации с помощью вейвлет-преобразования и ее последующее сжатие методом главных линейных компонент. Для дальнейшего нелинейного анализа применяется однослойная нейронная сеть – карта Кохонена.

Будет показано, что вейвлет-образы полей плотности расчетов устойчивы во времени. Это позволяет осуществлять их вероятностный прогноз. Найдена величина, линейно выраженная через коэффициенты вейвлет-разложения, зависимость которой от времени близка к линейной. Также получена линейная комбинация вейвлет-коэффициентов, слабо меняющая свое значение на протяжении развития процесса, что дает основание сделать предположение о возможном существовании интегралов движения в задаче РТ-перемешивания. Будет произведено сравнение используемых в работе численных кодов NUT и MAX.

Описание расчетов, полученных по программе NUT. Геометрия системы в расчетах задачи Релея–Тейлора показана на рис. 1 (указаны размеры в мм). Система состоит из двух прямоугольных областей (OABC и OCDE), разделенных горизонтальной плоскостью (контактной границей).

Перпендикулярно контактной границе приложено внешнее поле силы тяжести с ускорением свободного падения $g = 10^4 g_0$, направленным вниз против вертикальной оси OZ , g_0 – ускорение свободного падения вблизи поверхности Земли. В верхней области находится тяжелый газ ксенон (Xe), в нижней области – легкий гелий (He). На верхней (AB) и нижней (DE) границах системы задается условие непротекания (вертикальная компонента скорости равна нулю). На боковых стенках (AE и BD) – периодическое граничное условие.

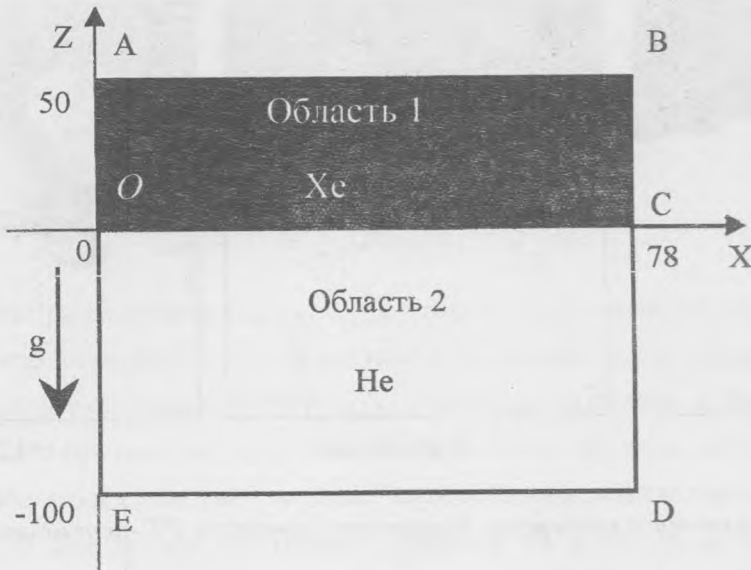


Рис. 1. Геометрия системы в расчетах задачи Релея-Тейлора.

Используемые в работе двумерные расчеты РТ-перемешивания получены с помощью численного кода NUT [5], где для описания термодинамических свойств газов применяется уравнение состояния идеального газа в виде $p = \frac{R}{\mu} \rho T$, $\epsilon = \frac{1}{\gamma-1} \frac{R}{\mu} T$. Начальные распределения давления и плотности соответствуют изоэнтропической конфигурации:

$$\rho_i(z) = \frac{p^{1/\gamma}}{B_i}; \quad p_i(z) = \left(\tilde{p}_0 - \frac{\gamma-1}{\gamma B_i} g z \right)^{\gamma/(\gamma-1)},$$

где $\tilde{p}_0 = p_0^{\gamma-1/\gamma}$; $B_i = \frac{T_0}{M_i p_0}$, M_i – масса частицы i -го газа, $T_0 = 300 \text{ K}$, $p_0 = 0.5 \text{ атм}$.

Расчеты проводились до момента $t = 1250 \text{ мкс}$. Через каждые $\Delta t = 50 \text{ мкс}$ выдавался ряд физических величин, из которых в дальнейшем будет рассматриваться только плотность. Друг от друга расчеты отличаются только начальным возмущением поверхности раздела газов. Оно, фактически, определяет дальнейшую динамику перемешивания.

В данной работе используется база данных, состоящая из 64 процессов, рассчитанных по коду NUT (32 из которых получены путем прямого численного эксперимента, другие 32 являются зеркальными отображениями первых), заданных картинками распределения плотности вещества в 26 моментов времени. На рис. 2 показаны некоторые состояния одного из процессов. Цифрами отмечены моменты времени, которым соответствуют данные состояния.

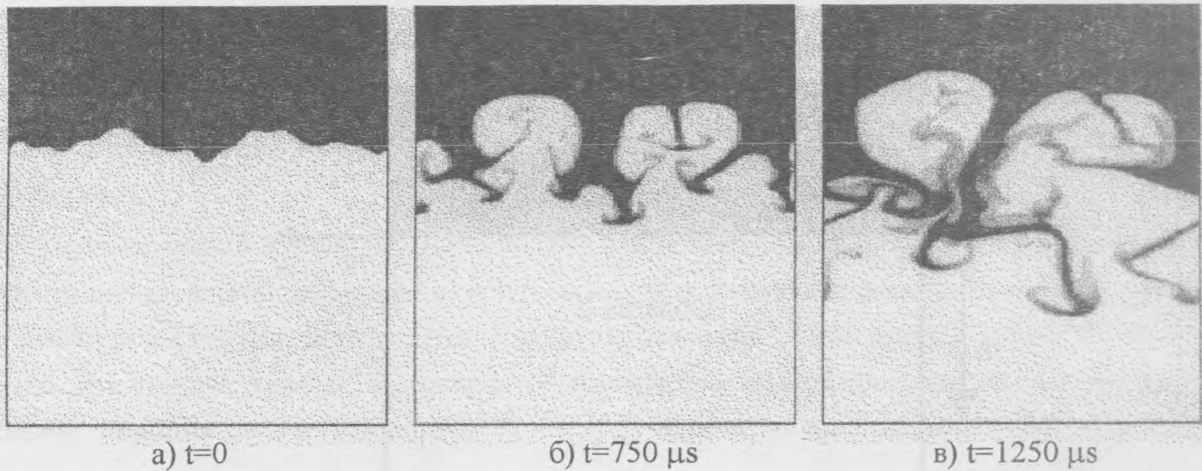


Рис. 2. Эволюция плотности двумерного процесса РТ-перемешивания.

Начальное возмущение s поверхности раздела жидкостей в рассматриваемых процессах задается шестью гармониками $s = \sum_k a_k \cos\left(\frac{2\pi kx}{L} + \varphi_k\right)$, где $k = 2, 3, 5, 7, 11, 13$, L – ширина фрейма (длина отрезка ОС рис. 1). Амплитуды гармоник a_k во всех расчетах одинаковы и подчиняются условию $a_k \frac{2\pi k}{L} = 0.5$. Таким образом, начальные возмущения отличаются между собой только выбором фаз гармоник φ_k . При этом фазы могут принимать одно из восьми значений: $\frac{\pi}{4}n$, где $n = 0, 1, \dots, 7$ и выбираются случайным образом.

Учет пространственной информации с помощью вейвлет-кодирования исходных полей. В задаче РТ-перемешивания часто возникают мелкие, хорошо локализованные структуры, которые в дальнейшем могут оказывать сильное влияние на ход процесса. Учесть такие структуры можно, если перейти от картин распределения плотности к их вейвлет-образам [6]. Вейвлеты (всплески) являются функциями, хорошо локализованными в пространстве, благодаря чему они отслеживают особенности пространственного распределения исследуемой величины на разных масштабах. В отличие от классического Фурье-базиса, в котором базисные функции различаются (в одномерном случае) по одному параметру – частоте, функции вейвлет-базиса имеют два параметра – параметр масштаба a^{-1} , задающий размер всплеска (который можно считать аналогом частоты Фурье-базиса) и определяющий характерный масштаб описываемых им структур, и параметр смещения b , отвечающий за то, в какой области пространства происходит всплеск: $\Psi\left(\frac{x-b}{a}\right)$. Выбрав определенным образом значения параметров $\{a_n, b_m\}_{n,m}$, можно получить полную ортонормированную систему функций, в результате чего мы

придем к так называемому дискретному вейвлет-преобразованию. Применяя дискретное вейвлет-преобразование к двумерным функциям распределения плотности ρ , мы используем двумерный вейвлет-базис, функции которого различаются, соответственно, по четырем параметрам

$$\rho(x, z) = \sum_{i=1}^N \langle \rho | \Psi_i \rangle \Psi_i = \sum_{i=1}^N c_i \Psi_i.$$

Коэффициенты разложения $\{c_1, c_2, \dots, c_N\}$ составляют вейвлет-образ исходной функции ρ и однозначно ее определяют. В результате, каждое поле, характеризующее соответствующий момент времени, будет задано вектор-столбцом вейвлет-коэффициентов $\{c_1, c_2, \dots, c_N\}$. Поля плотности, представленные таким образом, можно трактовать как точки в N -мерном пространстве, по осям которого откладываются значения вейвлет-коэффициентов. В результате состояние процесса на каждый момент времени будет задано точкой в этом пространстве, а процесс в целом, соответственно, ломаной линией.

Такое пространство обладает большой размерностью, что затрудняет дальнейший анализ. Во-первых, возникают чисто вычислительные трудности, связанные с необходимостью обрабатывать большие массивы данных, во-вторых, известно, что при нейросетевой обработке данных ошибка нейросети растет с ростом размерности входного вектора [7]. Таким образом, мы приходим к необходимости понизить размерность данных, пусть даже ценой некоторой потери информации. Первое огрубление состоит в отбрасывании мелкомасштабных вейвлет-коэффициентов.

Для дальнейшего сжатия информации использовался метод главных линейных компонент [7], который заключается в линейном преобразовании координат, приводящем к такому их расположению, что первая главная компонента ложится вдоль направления, обладающего наибольшей дисперсией данных, вторая – находит второе по величине дисперсии направление и т.д. Низкодисперсными (т.е. регулярными) компонентами можно пренебречь, оставив первые K координат (где $K \ll N$), при этом основная часть информации будет сохранена. Такое сжатие позволило понизить размерность пространства в нашем случае в сотни раз. По координатным осям в новом представлении будут откладываться линейные комбинации вейвлет-коэффициентов.

На рис. 3 приведены: а) исходная картина 130×250 пикселей; б) картина, восстановленная после сжатия до 200 компонент; в) до 17.

Карта Козонена как способ визуализации многомерного пространства. Кластеризация данных. Состояния процессов обучающей выборки образуют облако точек в

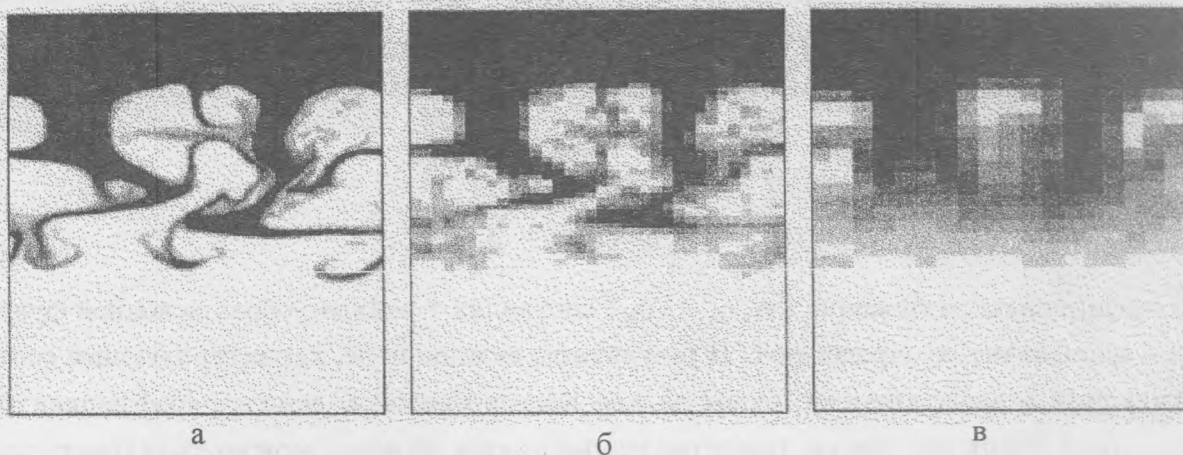


Рис. 3. Восстановление поля плотности после линейного сжатия.

K -мерном пространстве линейных комбинаций вейвлет-коэффициентов.

Для последующей обработки данных использовалась однослойная нейросеть – так называемая карта Кохонена [8]. Это способ кластеризации данных (разбиения облака данных по группам), при котором прототипы кластеров (центры масс групп данных) отображаются на плоскость, образуя двумерную решетку – карту Кохонена. Расположение центров кластеров на карте воспроизводит топологическую структуру исследуемых данных. Таким образом, кластеризация по Кохонену представляет собой “натягивание” эластичной сетки кластеров на облако данных. Это свойство карты Кохонена позволяет использовать ее для визуализации многомерных пространств. Каждый многомерный вектор пространства признаков имеет свою координату на этой сетке. Отобрав наше облако данных на карту Кохонена, можно увидеть, каким образом сгруппировались состояния, и проследить траектории развития процессов в этом пространстве. Результат отображения представлен на рис. 4. В данном случае для получения представления использовался вейвлет Добеши 1 [6], после чего пространство было сжато до 17 компонент. Каждый шестиугольник представляет собой образ некоторой небольшой области многомерного пространства признаков. Ломаными линиями показаны траектории различных расчетов. Окраской карты можно отображать распределение в пространстве значений той или иной характеристики данных. Карта на рис. 4а окрашена в соответствии с распределением первой главной компоненты, а карта на рис. 4б – в соответствии с распределением второй главной компоненты.

На рис. 4 изображены траектории шести процессов, которые условно можно разбить

на три группы. К первой отнесем две траектории, проходящие по карте слева (см. рис. 4а, 4б), ко второй – траектории, идущие по центру, и к третьей – два процесса, проходящие по правой части карты. Здесь мы видим, что траектории процессов, отнесенных к одной группе, очень близки. Ниже (рис. 6) показаны картины распределения плотности конечных состояний всех трех пар процессов. Видно, что конечные состояния процессов, принадлежащих к одной группе, визуально похожи.

Близость траекторий процессов, вышедших из одного кластера на карте, говорит о близости этих траекторий в исходном пространстве. Этот результат указывает на возможность прогноза развития процесса РТ-перемешивания по его нулевому моменту времени: если мы знаем, в каком кластере (в какой области фазового пространства) находится начальное состояние некоторого процесса, то, на основании анализа траекторий заранее известных расчетов, мы, с некоторой вероятностью, можем указать, в какой области пространства окажется данный процесс на момент времени t . Для отображения полей плотности в работе использовались вейвлеты семейств Добеши 1–9, Симлет 2–8, Койфлет 1. В работе [9] был найден критерий, согласно которому наилучшими предсказательными свойствами обладает представление данных, полученное с помощью вейвлета Добеши 1.

Первая и вторая главные компоненты. На рис. 4 показана карта представления Добеши 1, окрашенная соответственно значению первой главной компоненты (ПГК) – рис. 4а, и соответственно второй (ВГК) – рис. 4б. Относительно ПГК можно сказать, что эта величина подобно ширине зоны перемешивания, внедренной массе, потенциальной энергии, времени и т.д. является характеристикой "возраста" процесса, показывающей, какой стадии перемешивания отвечает та или иная картина распределения плотности (эволюционная модель, основанная на понятии о "возрасте" процесса, приведена в работе [10]). На рис. 5а и 5б приведены кривые, отображающие относительное изменение во времени ПГК (сплошная линия), внедренной массы (прерывистая линия), ширины зоны перемешивания (точка-тире) для двух различных расчетов. Масштабы измерения физических величин подогнаны так, чтобы отклонение кривых от ПГК было минимально в сумме для всех процессов. Следует однако отметить, что такое поведение ПГК наблюдается только в представлении вейвлета Добеши 1.

Точный смысл ВГК еще предстоит выяснить, но уже сейчас можно сказать, что практически все процессы, за редким исключением, движутся по карте сверху вниз, допуская лишь незначительные блуждания в горизонтальном направлении (см. рис. 4). Таким образом, ВГК можно трактовать как некоторую собственную характеристику

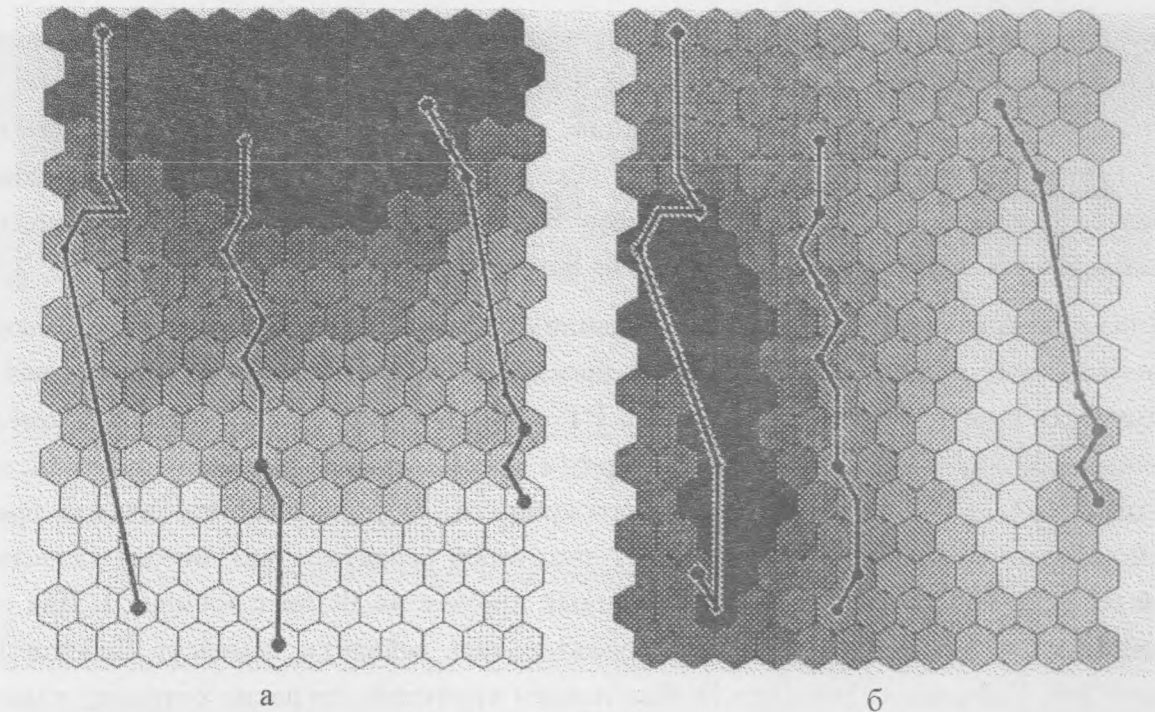


Рис. 4. Карта Кохонена представления Добеши 1. Окраска карты отображает а) ПГК, б) ВГК. Линиями показаны траектории движения процессов по карте.

процесса, относительно слабо изменяющуюся во времени – квазипостоянную величину. Наличие ВГК говорит в пользу возможного существования интегралов движения в задачах турбулентного перемешивания. Возможно, что они не являются простыми комбинациями привычных для нас физических величин и их знание не улучшит качественного понимания физики процесса, однако оно может значительно облегчить построение моделей количественного описания развития турбулентности.

Расчеты, проведенные по программе МАХ. Геометрия расчетов по программе МАХ [6] практически совпадает с геометрией расчетов по NUT (рис. 1), за тем исключением, что ширина фрейма (длина отрезка ОС) $L = 72$ мм. На верхней (АВ) и нижней (DE) границах системы задается условие непротекания. На вертикальных границах (АЕ и ВD) также задается условие непротекания (в отличие от расчетов по NUT, где на боковых стенках были заданы периодические граничные условия).

Расчеты проводились до момента $t = 1300$ мкс, через каждые 100 мкс производилась выдача. В результате чего каждый процесс был представлен последовательностью из четырнадцати картин распределения плотности. Всего база данных включает 10

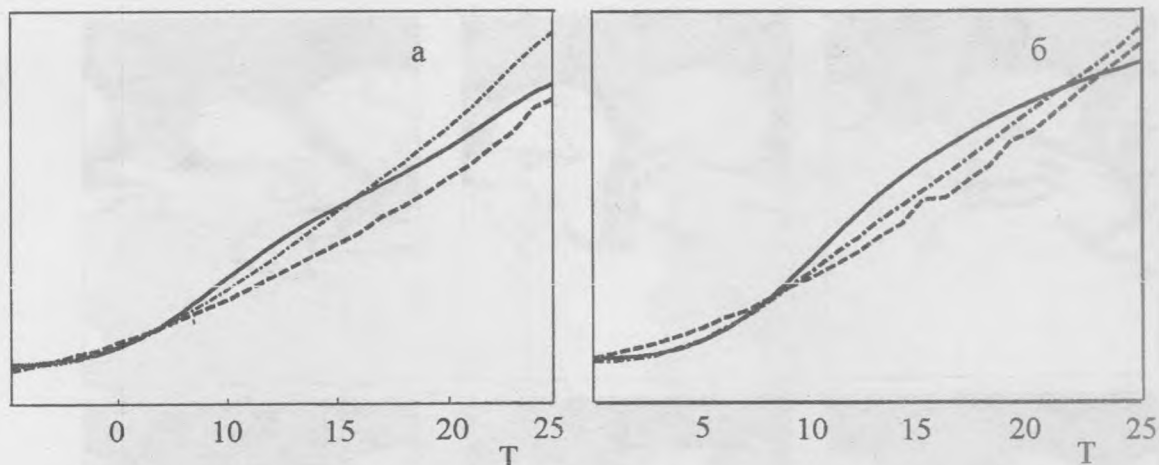


Рис. 5. Графики относительного изменения во времени ПГК (сплошная), внедренной массы (прерывистая линия), ширины зоны перемешивания (точка-тире) для двух различных расчетов (а и б).

процессов, полученных с помощью численного кода МАХ. Для задания начального возмущения использовалось 6, 8, и 10 гармоник, причем в пяти процессах амплитуды гармоник убывали с ростом волнового вектора по закону $ak = 0.8$, а в пяти других брались постоянными: $a = \text{const}$. Расчетная база была расширена до 20 процессов включением расчетов, зеркальных к имеющимся. Последующая обработка этих расчетов по выше описанной схеме дала результаты, аналогичные полученным ранее:

- 1) в вейвлет-представлении процессы ведут себя устойчиво;
- 2) в представлении Добеши1 система выделила первую главную компоненту, имеющую физический смысл "возраста" процесса, схожую с шириной зоны перемешивания, потенциальной энергией, внедренной массой и т.д.;
- 3) вторая главная компонента слабо меняется на протяжении расчета, является квазисохраняющейся величиной.

Далее сравним две численные схемы МАХ и NUT, совместно обработав все рассмотренные процессы. На рис. 7 показана карта Кохонена представления Добеши1 полной базы данных (окраска на рис. 7а отображает первую главную компоненту, на рис. 7б – вторую). Было бы интересно сравнить между собой траектории расчетов, полученных по разным программам, выходящие из одного кластера, однако, в данном масштабе карты таких пар процессов не оказалось. На рис.7 представлены траектории двух процессов – 7а, полученного по коду NUT, 7б – по МАХ, выходящие из двух соседних кластеров.

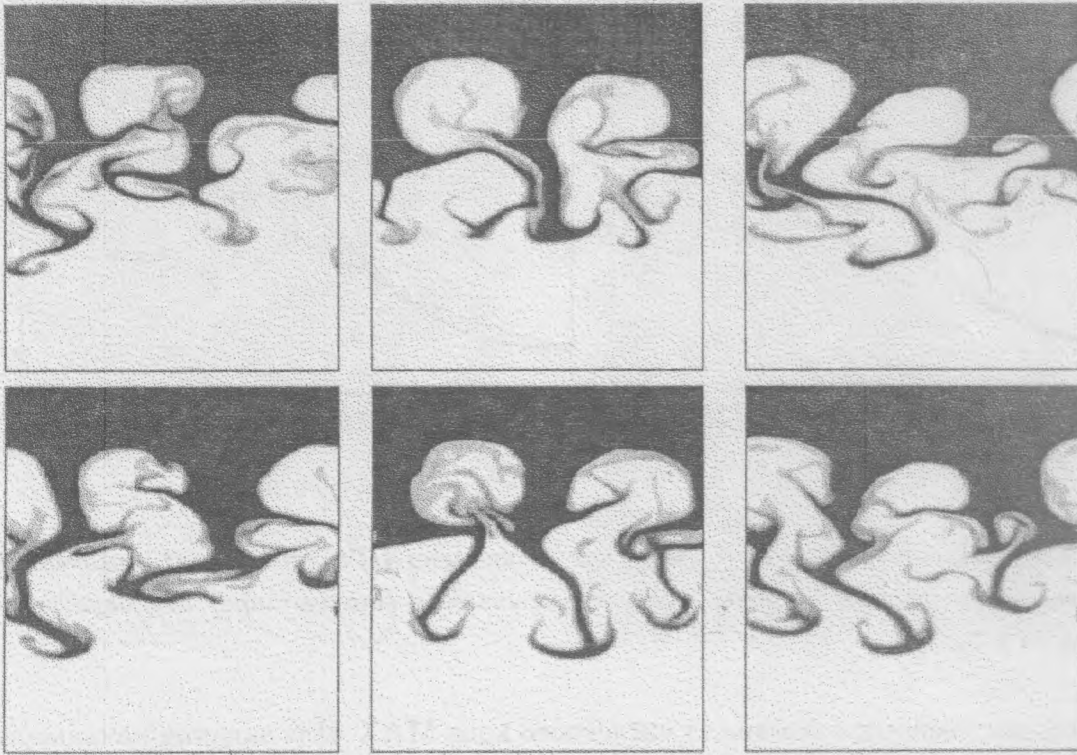


Рис. 6. Конечные состояния трех пар близких процессов.

Процессы сохраняют ту же "степень близости", какая была вначале. Таким образом, можно заключить, что две используемые в разделе численные схемы дают близкие результаты моделирования расчетов РТ-перемешивания. Близость траекторий также говорит о том, что различие в граничных условиях на боковых стенках в нашем случае не оказывает сильного влияния на эволюцию плотности.

Все имеющиеся в нашем распоряжении расчеты можно разбить на три группы по типу задания начального возмущения:

- 1) полученные по программе NUT, в которых амплитуды гармоник, составляющие начальное возмущение, убывают с ростом волнового вектора по закону $ak = 0.5$;
- 2) по программе MAX, в которых амплитуды гармоник убывают по закону $ak = 0.8$;
- 3) по программе MAX амплитуды гармоник не зависят от волнового вектора $a = \text{const}$.

На рис. 8а приведена карта Кохонена, построенная одновременно и по расчетам MAX, и по расчетам NUT, на которой кластеры представлены в виде гистограмм из

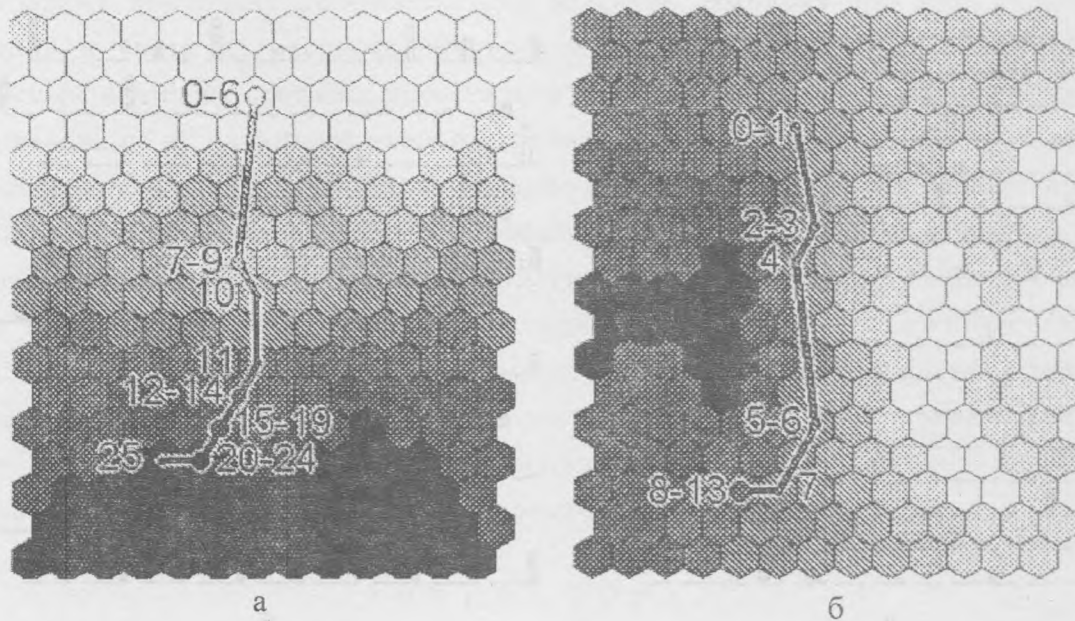


Рис. 7. Карта Кохонена, построенная по совместной базе процессов NUT и MAX.

трех столбцов. Первый столбец (на рисунке показан серым цветом) отражает относительное число картин распределения плотности (моментов времени), находящихся в данном кластере, принадлежащих к процессам первой группы, второй (показан белым цветом) – к процессам второй группы, третий (черным цветом) – к третьей. На этом рисунке видно, что процессы первой и второй группы часто оказываются в одной области фазового пространства. Процессы третьей группы держатся обособленно на карте. Т.е. расчеты, имеющие в начальном возмущении границы раздела сред большую по амплитуде высокочастотную составляющую, в пространстве вейвлет-представления начинаются и протекают изолированно от остальных. Такое свойство вейвлет-представления можно использовать для распознавания таких процессов.

На рис. 8б приведена карта Кохонена, построенная по базе процессов, включающей расчеты с другим числом Атвуда. К ранее описанным были добавлены расчеты развития неустойчивости Релея–Тейлора для пары газов *Ar-Xe*. Для задания начального возмущения в этих расчетах использовалось 6, 8, и 10 гармоник. Таким образом, к уже имеющимся типам процессов добавляются еще два:

- 4) полученные по программе MAX для *Ar-Xe*, амплитуды гармоник, задающих начальное возмущение, убывают по закону $ak = 0.8$;
- 5) полученные по MAX для *Ar-Xe*, амплитуды гармоник постоянны.

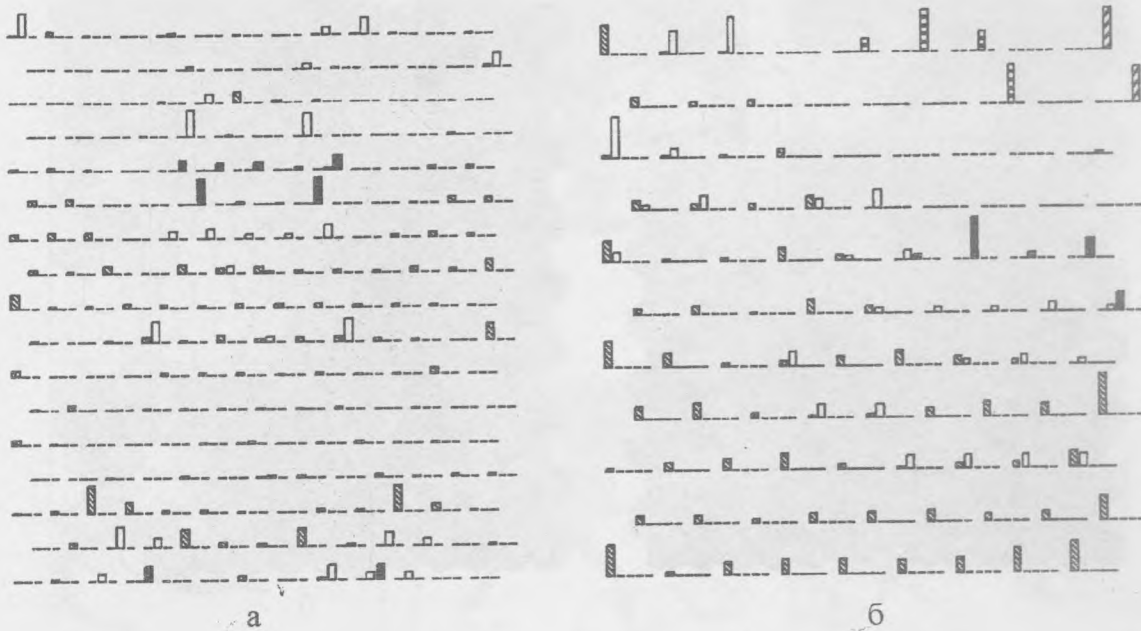


Рис. 8. Карта гистограмм распределения процессов в вейвлет-представлении, построенная для процессов с разным числом Атвуда.

Кластеры на карте изображены в виде гистограмм из пяти столбцов, каждый из которых показывает относительное число кадров, принадлежащих процессам соответствующей группы, находящихся в данном кластере. Расчеты четвертого и пятого типов (для пары газов $Ar-Xe$), представленные, соответственно, столбцами с горизонтальной и наклонной штриховкой, находятся в области катры, удаленной от той ее части, где расположились расчеты для $He-Xe$. Более того, эти области разделены барьером мертвых кластеров – кластеров, не содержащих никаких процессов, что говорит о том, что в исходном пространстве вейвлет-представления процессы перемешивания газов с разным числом Атвуда находятся на существенном удалении. В свою очередь, процессы четвертой и пятой группы также разделены между собой, а процессы третьей группы протекают отдельно от процессов первой и второй группы. Таким образом, можно заключить, что вейвлет-представление разделяет физически разные процессы РТ-перемешивания.

Предложенный в данной работе способ описания процессов РТ-перемешивания, как было показано ранее, приводит к устойчивому представлению этих процессов относительно начальных конфигураций полей плотности. В то же время, вейвлет-представление физических полей позволяет учитывать мелкомасштабные структуры.

Метод главных компонент упрощает такое описание, сохраняя при этом существенные детали и уводя из рассмотрения несущественные. Созданный в ходе работы программный комплекс способен предсказать сходство поздних стадий расчетов РТ-перемешивания по их начальной стадии. Анализ полученного пространства с помощью карт Кохонена показал, что физически близкие процессы протекают в близких друг от друга областях пространства вейвлет-коэффициентов, а процессы, различные по своей постановке (способу задания начального возмущения, числу Атвуда), напротив, сильно удалены. Кроме того, было обнаружено, что первая главная компонента в представлении Добеши1 является величиной, имеющей смысл возраста процесса, наподобие времени, потенциальной энергии, внедренной массы и т.д. А вторая главная компонента (величина, линейно выраженная через коэффициенты вейвлет-разложения поля плотности) оказалась слабоменяющейся во времени характеристикой процесса.

Л И Т Е Р А Т У Р А

- [1] Z a b u s k y N. J., Z e n g S., R a y J., and S a m t a n e y R. in: Proc. of 6th International Workshop on the Physics of Compressible Turbulent Mixing (Marseille, 18-21 June, 1997, France), Imprimerie Caractere, 1997, p. 539.
- [2] H o l m e s R. L. et al., G r o v e J. W. et al. in: Proc. of 6th International Workshop on the Physics of Compressible Turbulent Mixing (Marseille, 18-21 June, 1997, France), Imprimerie Caractere, 1997, p. 197.
- [3] T a y l o r G. Proc. Roy. Soc., London, **A201**, 192 (1950).
- [4] Т и ш к и н В. Ф., Н и к и ш и н В. В., П о п о в И. В., Ф а в о р с к и й А. П. Математическое моделирование, **7(5)**, 15 (1995).
- [5] А н у ч и н а Н. Н., В о л к о в В. И., Е с ь к о в Н. С. Международная конференция "V Забабахинские научные чтения", Снежинск, 1998.
- [6] D a u b e s h i e s I. in: CBMS-NSF Regional Conf. Series in Appl. Math., **61**, Philadelphia, Society for Industrial and Applied Mathematics, 1992.
- [7] Е ж о в А. А., Ш у м с к и й С. А. Нейрокомпьютинг и его приложение в экономике и бизнесе, М., МИФИ, 1998.
- [8] К о х о н е н Т. Biol. Cybernetics, **43**, 56 (1982).
- [9] N u z h n y A. S., R o z a n o v V. B., S t e p a n o v R. V., and S h u m s k y S. A. in: ECLIM 2002: 27th European Conference on Laser Interaction with Matter, Proc. SPIE, **5228**, 184 (2002).

- [10] Змитренко Н. В., Прончева Н. Г., Розанов В. Б. Препринт ФИАН N 65, М., 1997.

Поступила в редакцию 4 февраля 2004 г.