

УДК 532.517.4;519.237.8

ПРЕДСКАЗАНИЕ РАЗВИТИЯ НЕУСТОЙЧИВОСТИ РЕЛЕЯ–ТЕЙЛОРА С ПОМОЩЬЮ ОБУЧАЕМЫХ ПРОГРАММ

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

В данной работе строится модель предсказания развития гидродинамических неустойчивостей на примере задачи Релея–Тейлора. Построение ведется путем обучения нейронной сети, где в качестве обучающей выборки используются результаты прямого численного расчета.

Работа посвящена изучению турбулентных течений, возникающих при развитии неустойчивости Релея–Тейлора (РТ-неустойчивости) [1], когда слой тяжелой жидкости помещается над легкой, а вся система находится во внешнем поле сил тяжести. Здесь рассматривается простой случай перемешивания двух несжимаемых жидкостей в двумерной геометрии без учета их вязкостей.

Существующие методы теоретического изучения гидродинамических неустойчивостей можно разделить на два основных направления: прямой численный расчет по уравнениям гидродинамики и создание малопараметрических моделей. Первый подход требует больших вычислительных ресурсов, что ограничивает его применение в ряде случаев, например, когда необходимо получать результат в режиме on-line. В свою очередь, создать малопараметрическую модель, имеющую достаточно широкую область применения, тоже пока не удалось.

В терминах теории обучения первый подход можно назвать непараметрическим, когда система описывается очень большим числом степеней свободы. При этом не проводится обобщение данных, которое может обнаружить корреляцию свободных параметров модели и избавиться от избыточности описания. Второй – параметрическим, когда создается модель, описывающая систему с помощью небольшого числа параметров. В данной работе исследуется возможность применения промежуточного, так

называемого, полупараметрического подхода (semiparametric method). Это случай, когда модель имеет достаточное количество степеней свободы для описания сложного поведения системы, но в то же время их число таково, что современный компьютер может быстро проводить расчет. Создавать полупараметрические модели удобно путем обобщения большого количества примеров развития неустойчивости Релея–Тейлора. В качестве таких примеров в работе используются двумерные расчеты развития РТ-неустойчивости, проводимые от разных начальных условий.

Описание расчетов. В работе используются двумерные расчеты развития РТ-неустойчивости, полученные по программе NUT [2] для пары газов гелий (He) – ксенон (Xe). В расчетах были заданы условия непротекания (вертикальная компонента скорости равна нулю) на верхних и нижних стенках и периодические условия на боковых стенках фрейма, т.е. области, по которой производится расчет. Горизонтальный размер системы 78 мм, толщина слоя легкой жидкости – 100 мм, тяжелой – 50 мм. Система находилась во внешнем поле сил тяжести, ускорение свободного падения которого $g = 10^4 g_0$, где g_0 – ускорение свободного падения вблизи поверхности Земли. Процессы представлены в виде последовательностей картин распределения плотности в 26 дискретных моментах времени. На рис. 1а приведены начальное и конечное состояния одного из процессов. Мы располагаем 32-мя расчетами, отличающимися между собой формой начального возмущения границы раздела сред. Начальное возмущение задавалось шестью гармониками, амплитуды которых убывали с ростом волнового вектора по закону $a_k 2\pi k/L = 0.5$. Фазы гармоник выбирались случайным образом. Отличие формы начального возмущения и состояло в выборе этих фаз (подробно см. в [3, 4]).

Кроме того, в работе используются процессы, рассчитанные по программе MAX [5]. Эти расчеты также получены для пары газов He–Xe, при том же ускорении внешнего поля. Здесь горизонтальный размер системы равнялся 72 мм. Еще одно отличие состоит в том, что в этих расчетах на боковых стенках фрейма были заданы условия непротекания жидкостей. Общее число расчетов 10. Начальное возмущение поверхности раздела сред задавалось 6, 8, 10-ю гармониками, амплитуды которых в пяти из них убывали с ростом волнового вектора по закону $a_k 2\pi k/L = 0.8$ (на рис. 1б приведены начальное и конечное состояния такого процесса), а в других пяти амплитуды были постоянны $a = \text{const}$ (рис. 1в). Фазы гармоник во всех случаях выбирались случайным образом (см. [3, 4]).

Вейвлет-обработка расчетов. Согласно ранее отработанной методике [3, 4] для предварительной обработки воспользуемся вейвлет-преобразованием картин распреде-

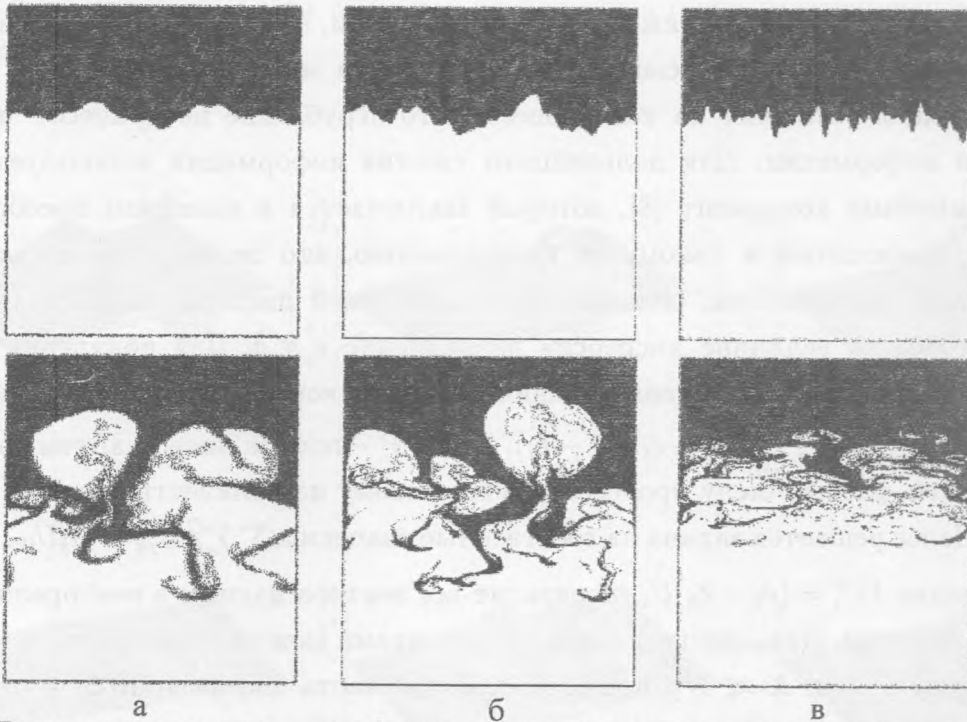


Рис. 1. Начальные и конечные конфигурации полей плотности в расчетах развития неустойчивости Релея-Тейлора.

ления плотности. Дискретное вейвлет-преобразование [6] является обратимым взаимно однозначным преобразованием функции, в данном случае – функции распределения плотности: $\rho(x, z) = \sum_{i=1}^N \langle \rho | \Psi_i \rangle \Psi_i = \sum_{i=1}^N c_i \Psi_i$. 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 коэффициентов вейвлет-разложения. В результате состояние процесса на каждый момент времени будет задано точкой в этом пространстве, а процесс в целом, соответственно, ломаной линией. Вся совокупность процессов образует облако точек в гиперпространстве вейвлет-коэффициентов. Выбор вейвлет-базиса обсуждался в работе [7]. Тогда из всех рассмотренных вейвлетов предпочтение было отдано вейвлету Хаара (другое название Добеши 1).

Размерность такого пространства очень велика в нашем случае $N \sim 3 \times 10^4$. Для понижения размерности пространства воспользуемся ранее предложенной схемой [3, 4]. Первое огрубление состоит в отбрасывании мелкомасштабных вейвлет-коэффициентов.

В предположении, что на протяжении отрезка времени, на котором производились расчеты, характеризующиеся отбрасываемыми вейвлетами мелкие структуры не оказывают существенного влияния на ход процесса, это огрубление не принесет значительной потери информации. Для дальнейшего сжатия информации используется метод главных линейных компонент [8], 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. Для получения матрицы этого преобразования рассчитаем средний вектор и ковариантную матрицу данных: $\bar{c} = \frac{1}{P} \sum_{a=1}^P c^a$, $\sum_{ij}^C \equiv \frac{1}{P-1} \sum_{a=1}^P (c_i^a - \bar{c}_i)(c_j^a - \bar{c}_j)$. Здесь P – полное число картин распределения плотности, равное числу процессов, умноженному на количество картин в каждом процессе. Далее решается задача на собственные значения: $\sum_j \sum_{ij}^C U_{jk} = \lambda_k U_{ik}$. Линейное преобразование $PC_i = (c_k - \bar{c}_k)U_{ki}$ превратит все вектора данных в некоррелированные с нулевым средним. Низкодисперсными 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.

Получение фильтров прямого преобразования. В результате проведенного преобразования каждый момент времени любого из процессов будет задан набором значений главных компонент $\{PC_1, PC_2, \dots, PC_N\}$. Данная процедура состоит из двух последовательных шагов – вейвлет-разложение полей плотности и умножение векторов вейвлет-коэффициентов на матрицу поворота. Объединив эти два последовательных действия в одно, можно получить фильтры, которые при свертке с полями плотности дают значения соответствующих им главных компонент. Добавим в выражение для главных компонент квадраты базисных функций, которые по определению равны единице: $PC_k^a = \bar{c}^a \vec{U}_k - \vec{c}^a \vec{U}_k = \sum_{i=1}^N c_i^a \langle \Psi_i(x, y) | \Psi_i(x, y) \rangle U_{ik} - \vec{c}^a \vec{U}_k$. Затем операцию интегрирования вынесем за сумму $PC_k^a = \iint_{x,y} \bar{c}^a \vec{\Psi}_i(x, y) \vec{\Psi}_i(x, y) \vec{U}_k dx dy - \text{const}_k$. Таким образом, мы получили скалярное произведение четырех векторов, которое можно представить в следующем виде: $PC_k^a = \iint_{x,y} \rho_a(x, y) F_k(x, y) dx dy - \text{const}_k$. Здесь учтено, что $\rho_a = \sum_{i=1}^N c_i^a \Psi_i(x, z)$, и введены фильтры главных компонент $F_k = \sum_{i=1}^N U_{ik} \Psi_i(x, y)$. Так как поле плотности в рассматриваемой задаче задано как значения этой величины в узлах двумерной решетки, то и функции Ψ_i по существу нужно рассматривать как матрицы их значений в

узлах той же решетки. Тогда интеграл по пространственным переменным заменяется конечными суммами.

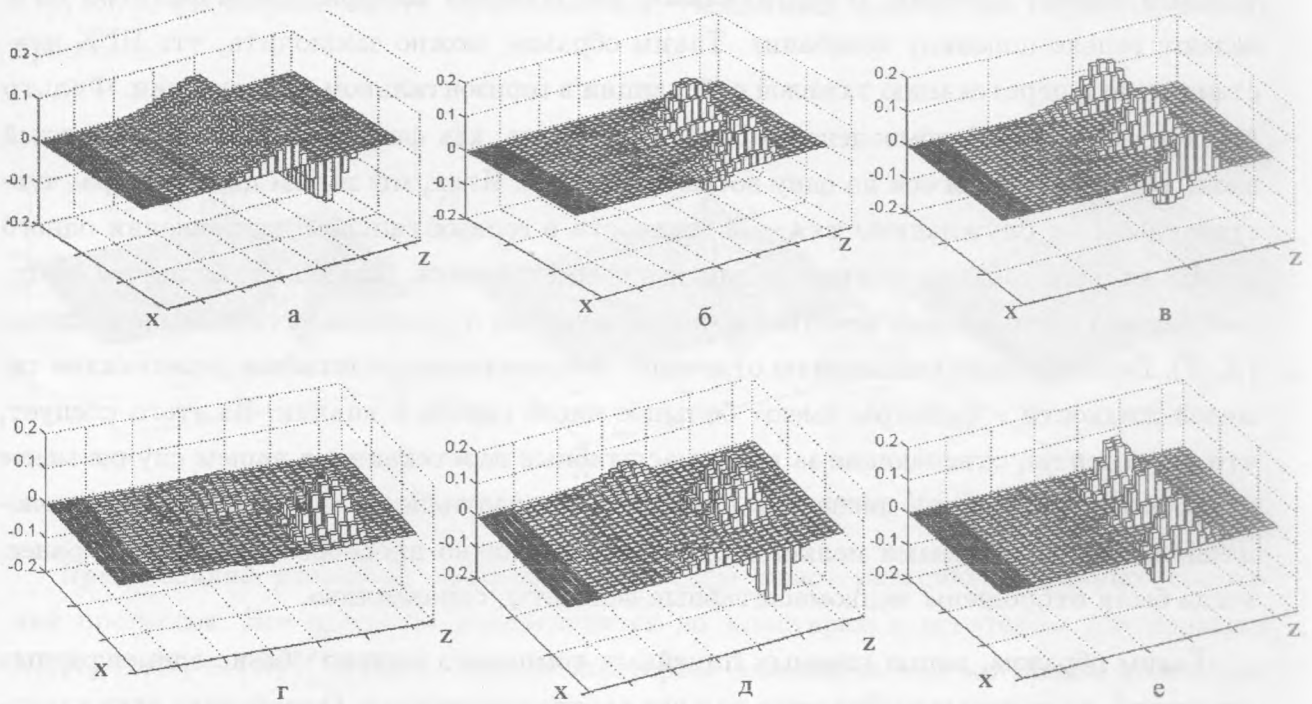


Рис. 2. Фильтры прямого преобразования полей плотности в представлении главных компонент.

На рис. 2 приведено несколько фильтров. Для их получения использовались расчеты, полученные по коду NUT. Расчетная база, состоящая из 32-х процессов, предварительно была расширена путем зеркального отображения картин распределения плотности относительно вертикальной оси, а также их трансляций вдоль горизонтальной до 640 примеров. В качестве отображающего вейвлета был выбран вейвлет Добеши 1 (db1).

В работе [4] было показано, что значение первой главной компоненты (ПГК) для db1 сильно коррелирует с такими физическими величинами, как время, ширина зоны перемешивания, внедренная масса и т.п. Это можно было предположить из внешнего вида фильтра первой главной компоненты. В начальный момент времени практически вся масса сосредоточена в верхней части фрейма (рис. 1), где матричные элементы фильтра имеют сильно отрицательные значения и, соответственно, для ранних стадий процесса значение первой главной компоненты будет иметь большое по модулю отрицательное значение. По мере перетекания тяжелой жидкости в область, где изначально

находилась легкая, значение ПГК будет расти. Фильтр для второй главной компоненты (ВГК) имеет два горба и две впадины, чередующиеся вдоль горизонтальной оси (рис. 3б). Пики горбов и впадин находятся примерно над границей раздела сред в начальный момент времени. В вертикальном направлении коэффициенты фильтра ВГК делают только половину колебания. Таким образом, можно заключить, что ВГК чувствительно к перетеканию тяжелой субстанции в горизонтальном направлении. Фильтр для третьей главной компоненты можно трактовать, как фильтр для ВГК, сдвинутый вдоль горизонтальной оси на одну восьмую фрейма. Итак, мы имеем два фильтра, чувствительных к блужданиям тяжелой жидкости в горизонтальном направлении одного и того же масштаба: антисимметричный и симметричный. Далее идут фильтры, которые условно имеют форму нечетной и четной функции относительно системы координат (X, Z) . Последующие компоненты отвечают за более мелкомасштабное перетекание тяжелой жидкости – фильтры имеют большее число горбов и впадин. Из этого следует, что компоненты, отвечающие за мелкомасштабные перетекания, в нашем случае менее информативны, так как дисперсии данных по ним меньше. Следовательно, предположение о том, что самыми мелкими структурами можно пренебречь, сделанное ранее, когда были отброшены мелкомасштабные вейвлеты, справедливо.

Таким образом, метод главных линейных компонент выявил “базис элементарных структур”, на которые разбивается каждая картина плотности. О свойствах этих структур можно судить по внешнему виду фильтров главных компонент. В пространстве разложения по элементарным структурам процессы имеют сжатое и устойчивое [см. 3, 4, 7] описание.

Расчеты, проведенные по программе МАХ. Рассмотрим серию расчетов, проведенных по численному коду МАХ. В нашем распоряжении имеется база данных, состоящая из 10 процессов, которую можно расширить до 20 путем зеркального отображения относительно вертикальной оси. В отличие от предыдущих расчетов здесь заданы условия непротекания на боковых стенках фрейма, что не позволяет увеличить число примеров за счет горизонтальных трансляций, как в предыдущем случае. Кроме того, эти расчеты более разнородны по способу задания начального возмущения границы раздела сред. На рис. 3 приведены фильтры для первых трех компонент, построенных с использованием вейвлета db1. Здесь, как и в предыдущем случае, видно, что первая главная компонента имеет смысл возраста процесса, вторая содержит два горба и две впадины и так далее. То, что в этом случае фильтры не такие гладкие, как на рис. 2, объясняется малым количеством используемых для их построения процессов, которое не обеспечи-

вает достаточной статистики. Тем не менее, можно увидеть, что рельеф этих фильтров похож на рельеф соответствующих фильтров, построенных по предыдущей базе процессов. По всей видимости, существуют некоторые предельные формы элементарных структур, к которым можно приближаться, увеличивая количество обрабатываемых процессов.

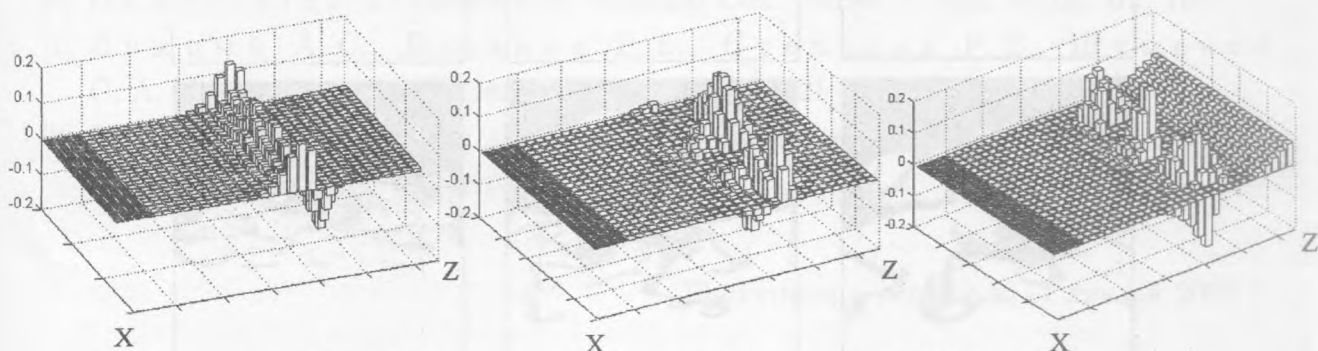


Рис. 3. Фильтры, полученные по расчетам МАХ.

Предсказание развития процессов. Проведем кластеризацию начальных состояний процессов. Все процессы распределятся по кластерам в некотором соотношении $N_1, N_2, \dots, N_I = \{N_i\}_{i=1}^I$, где I – число кластеров. Задавшись тем же числом кластеров, проведем кластеризацию состояний, отвечающих моменту времени t . Пусть в начальный момент времени в i -ом кластере находилось N_i процессов. В момент времени t эти процессы некоторым образом распределятся по кластерам $N_{i,1}(t), N_{i,2}(t), \dots, N_{i,I}(t) = \{N_{i,j}(t)\}_{j=1}^I$ (при этом $\sum_{j=1}^I N_{i,j}(t) = N_i$). Вероятность попадания процесса, находящегося изначально в i -ом кластере, в кластер j на момент времени t можно оценить следующим образом: $P_{i,j}(t) \approx N_{i,j}(t)/N_i$. В результате, определив, в какой кластер попадает новый неизвестный процесс на нулевом моменте времени, можно с вероятностью $P_{i,j}(t)$ сказать, где он окажется в момент времени t . При пополнении расчетной базы новыми процессами вероятности переходов будут подвергаться коррекции.

Предсказанием будущей конфигурации плотности могут быть состояния процессов обучающей выборки, находящиеся в наиболее правдоподобной области фазового пространства. Выберем в качестве предсказания самое близкое к центру кластера состояние. На рис. 4 приведены примеры работы предиктора. Слева (рис. 4а) показаны начальные распределения плотности процесса, в центре (рис. 4б) – результат предсказания, справа (рис. 4в) для сравнения приведены результаты численных расчетов, проведенных от этих начальных условий.

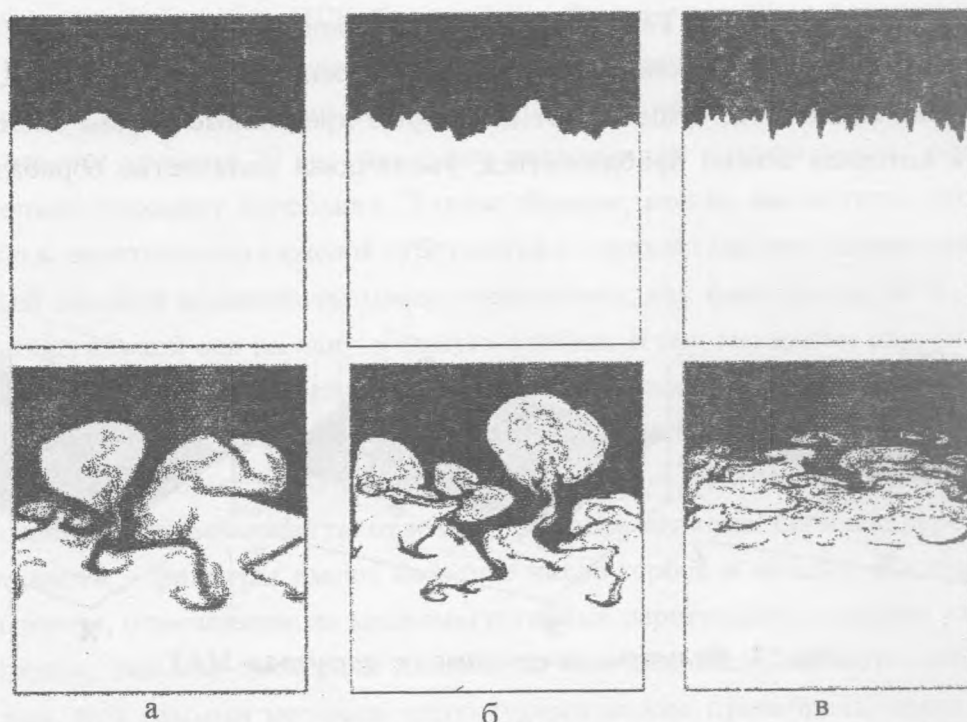


Рис. 4. Демонстрация работы предиктора. а) Начальные состояния процессов, б) предсказание предиктора, в) результат численного расчета.

В результате проведенного статистического анализа гидродинамических расчетов были получены фильтры, выделяющие основные элементарные структуры течений, формирующих распределение плотности в задаче РТ-перемешивания. Показано, что чем крупнее элементарная структура, тем больше ее статистическая значимость. Приведены результаты работы предиктора. В отличие от результатов, опубликованных ранее [3], здесь предиктор строится на обучающем множестве, состоящем из процессов, различных по типу задания начального возмущения поверхности раздела сред, его спектральному составу, и полученных по различным численным методикам. Дальнейшее расширение обучающей выборки может привести к возможности практического использования предсказаний.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Т а у л о г G. Proc. Roy. Soc. London, **A201**, 192 (1950).
- [2] Г 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).

- [3] Nuzhny A. S., Rozanov V. B., Stepanov R. V., and Shumsky S. A. Preprint N 12, LPI, 2004.
- [4] Нужный А. С., Розанов В. Б., Степанов Р. В., Шумский С. А. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 4, 15 (2004).
- [5] Анучина Н. Н., Волков В. И., Еськов Н. С. Международная конференция "V Забабахинские научные чтения", Снежинск, 1998.
- [6] Daubechies I. CBMS-NSF Regional Conf. Series in App. Math., **61**, 1992.
- [7] Нужный А. С., Розанов В. Б., Степанов Р. В., Шумский С. А. Математическое моделирование, **16**, N 7, 21 (2004).
- [8] Ежов А. А., Шумский С. А. Нейрокомпьютинг и его приложение в экономике и бизнесе, М., МИФИ, 1998.

Поступила в редакцию 11 января 2005 г.