arXiv:2303.02338v1 [physics.flu-dyn] 4 Mar 2023

动态深度学习 LES 闭合模型：采用嵌入式 DNS 的在线优化

Justin Sirignano* 和 Jonathan F. MacArt†

2023年3月7日

摘要

深度学习（DL）近年来已成为湍流大涡模拟（LES）闭合建模的一种候选方法。高保真训练数据通常十分有限：在高雷诺数下，通过数值模拟生成这类数据的计算成本很高（甚至不可能实现）；与此同时，实验数据的获取成本也很高，并且可能仅包含稀疏或汇总的流动测量数据。因此，任何训练数据集实际上都只能包含相对较少的几何构型和物理状态。有限的数据可能导致过拟合，从而使模型对不同于训练案例的几何构型和物理状态产生不准确的预测。我们提出了一种用于大涡模拟中深度学习闭合模型的新型在线训练方法，旨在应对这一挑战。在大涡模拟（LES）计算过程中，利用嵌入式直接数值模拟（DNS）数据动态训练深度学习闭合模型。也就是说，在计算域的一小部分区域内，流动以 DNS 分辨率进行计算，并与大涡模拟预测同步进行。随后，闭合模型利用嵌入式 DNS 中的数据调整其对未闭合项的近似。

Consequently, the closure model is trained on data from the exact geometry/physical regime of the prediction at hand. 我们开发了一种在线优化算法，用于在 LES 与嵌入式 DNS 耦合计算过程中动态训练深度学习闭合模型。

1 引言

现有用于大涡模拟（LES）的机器学习闭合模型需要高保真数据进行训练 [1–3]。几乎所有现有案例中，机器学习闭合模型都基于涵盖较少不同几何形状和物理参数（例如雷诺数、马赫数和形状参数）的高保真直接数值模拟（DNS）数据集进行训练。随后，机器学习模型会针对全新的几何形状或物理状态进行样本外模拟，但无法保证样本外模拟的准确性。尤其是，当几何形状或物理状态与训练集中已有的情况差异很大时，实际流体流动很可能会以不同于训练流动的方式演变。这可能导致深度学习大涡模拟（DL-LES）模型在样本外预测时产生不准确的模拟结果。

高保真 DNS 训练数据的生成成本高昂：即使训练案例相对较少，DNS 所需的计算量也可能远超单纯提高经典建模大涡模拟计算的网格分辨率；而在可预见的未来，高雷诺数复杂几何构型的 DNS 计算将难以实现。实验数据的获取同样可能成本高昂，而且可能只包含稀疏或汇总的流动测量。因此，训练数据集数量有限，而且按定义，其几何构型、边界条件和物理参数可能与目标预测案例大不相同。训练案例与测试案例（即预测案例）之间的显著差异，可能导致预测模拟的精度较差。

*牛津大学数学研究所
†航空航天与机械工程，圣母大学

我们开发了一种新型动态机器学习闭合模型，旨在应对这些挑战。该模型将大涡模拟计算与嵌入式 DNS 计算相结合，并使用在线优化算法，根据滤波后的嵌入式直接数值模拟数据对大涡模拟闭合模型进行动态训练。具体而言，通过求解与一个或多个深度学习闭合模型耦合的大涡模拟方程，对计算域的大部分区域进行建模。对于计算域中一个较小的子区域，则采用嵌入式 DNS 进行高精度计算，其边界条件由大涡模拟预测提供。耦合的大涡模拟方程和 DNS 方程同时求解，同时使用滤波后的嵌入式直接数值模拟数据对大涡模拟闭合模型进行训练。该方法的优点如下：

- 闭合模型使用与待预测问题完全相同的几何形状和物理条件下的数据进行训练。– 在模拟过程中，通过耦合的 LES–嵌入式 DNS 方程同时生成嵌入式直接数值模拟数据。– 在线优化则利用滤波嵌入式 DNS数据同时训练闭合模型。

- 训练针对完整的 LES 方程进行优化，并在目标问题的大涡模拟计算中同时考虑闭合误差和离散误差。

- 在每个模拟步中，都会根据滤波嵌入式 DNS 数据执行一次随机梯度步，以更新闭合模型。在线优化方法将渐近地针对湍流的稳态统计量进行优化。

我们指出，He 和 Chen [4–6], 近期发表的文章已将嵌入式 DNS 用于湍流模拟中的闭合建模；他们率先提出了利用嵌入式 DNS 对雷诺平均纳维–斯托克斯和大涡模拟进行闭合的方法。在他们的方法中，先在细网格块上进行 DNS 模拟，再使用块谱方法估算雷诺平均纳维–斯托克斯或时空平均大涡模拟的闭合模型，且不使用机器学习模型。我们的工作主要有两项创新：（1）在 LES 方程中实现机器学习模型，并利用嵌入式 DNS 和随机梯度下降进行在线训练；（2）仅使用空间滤波而非时间平均大涡模拟来开发大涡模拟的闭合方法。具体而言，本文的主要贡献是开发了一种在线优化方法，用于动态训练耦合嵌入式 DNS–LES 模拟中的机器学习闭合模型。

第2节介绍了大涡模拟动态深度学习闭合的在线优化方法。第3节展示了衰减各向同性湍流的数值结果。第4节讨论了结论与未来分析。

2 大涡模拟的动态深度学习闭合模型

考虑不可压缩纳维–斯托克斯方程：

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial u_i}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial (u_i u_j)}{\partial x_j} + \frac{1}{\mathrm{Re}} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2}, \\
&\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0,
\end{aligned} \tag{1}$$

其中 $u = (u_1,\ u_2,\ u_3)$。设 Ω 为偏微分方程的计算域（例如 $[0,1]\times[0,1]\times[0,1]$）。定义滤波量 $\bar{v}(t,\ x) = \int_\Omega G(x-r) v(t,\ r) dr$，其中 $G(z)$ 为滤波核（例如高斯滤波器或盒式滤波器）。对式 (1) 应用滤波操作，可得滤波速度 $\bar{u}$ 的大涡模拟方程：

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial (\bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} + \frac{1}{\mathrm{Re}} \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_j^2} - \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j), \\
&\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0.
\end{aligned} \tag{2}$$

未封闭项 $\tau_{ij}^{\mathrm{SGS}} = u_i u_j - \bar{u}_i \overline{u_j}$将通过神经网络 $h_{ij}(\bar{u}_x;\, \theta)$ 进行建模，其中参数θ 必须根据数据进行校准。原则上，我们希望训练神经网络，使其表示一个将 LES变量（代表大尺度湍流尺度）与亚网格尺度应力张量 τ（代表小尺度湍流尺度）关联起来的函数。如果能训练出这样的闭合模型 $h(\bar{u}_x;\theta)$，就可以在粗网格上以较低成本模拟 LES方程 (2)。相比之下，模拟纳维–斯托克斯方程 (1) 需要非常小的网格尺寸，才能解析较小的湍流尺度；在雷诺数较高时，这种模拟的成本会高得难以承受。

以往训练机器学习封闭模型的方法采用离线优化。对于（2）中的闭合模型 $h(\bar{u}_x;\theta)$，其参数 θ 是利用特定几何构型和物理状态下的高保真数据进行训练的 q_1，……，q_N。例如， q_i 可以是不同雷诺数下的一种特定流动几何形状。随后，离线模型会在样本外进行评估，应用于全新的几何形状／物理状态 q_{N+1}，而该形状／状态并未包含在训练集中。如果 q_{N+1} 与训练集 $\{q_1, \ldots, q_N\}$ 差异很大，那么预测可能不准确。

本文提出一种新的动态封闭模型，该模型在实际模拟过程中通过在线优化进行训练。具体而言，针对几何形状／物理状态 q_{N+1} 的预测，将利用来自 q_{N+1} 的嵌入式直接数值模拟数据训练闭合模型。耦合的大涡模拟—嵌入式直接数值模拟计算将生成自身的训练数据，并在每个模拟步骤中，通过一次随机梯度下降学习步骤更新闭合模型。

对于物理域 Ω 的绝大部分区域，大涡模拟方程在粗网格上进行模拟，计算成本也相应较低。对于 Ω 中的一小部分区域，则采用足够小的网格尺寸进行直接数值模拟，以解析 Kolmogorov 尺度。分别将这两个子区域记为 Ω_{LES} 和 Ω_{DNS} 。耦合后的 LES嵌入式DNS方程为：

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} &= -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial(\bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} + \frac{1}{\mathrm{Re}} \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_j^2} - \frac{\partial h_i}{\partial x_j}(\bar{u}_x;\theta), \quad x \in \Omega_{\mathrm{LES}}, \\
\frac{\partial u_i}{\partial t} &= -\frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial(u_i u_j)}{\partial x_j} + \frac{1}{\mathrm{Re}} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2}, \quad x \in \Omega_{\mathrm{DNS}},
\end{aligned} \tag{3}
$$

并满足额外的连续性约束 $\nabla \cdot \bar{u} = 0$ 和 $\nabla \cdot u = 0$。在（3）中， u 和 $\bar{u}$及其前两阶导数当然也必须在 Ω_{LES} 和 Ω_{DNS}之间的界面处匹配。实际上，（3）就是在非均匀网格上模拟纳维–斯托克斯方程（1），其中

- 子区域 Ω_{LES} 采用粗网格，并使用闭合模型 h，且
- 子区域 Ω_{DNS} 采用细网格，不使用闭合模型。

可以对 Ω_{DNS} 上的速度 u 进行滤波，以生成用于训练大涡模拟闭合模型 h的目标数据 $\hat{u}$。具体而言，闭合模型 $h(\bar{u}_x;\theta)$的参数 θ 通过以下在线优化算法进行训练：

- 在每个时间步 j:

  – 在 $\Omega = \Omega_{\mathrm{LES}} \times \Omega_{\mathrm{DNS}}$ 上将 $(\bar{u}_j, u_j)$ 向前模拟一个时间步，得到 $\bar{u}_{j+1}$ 在 Ω_{LES} 上以及 u_{j+1} 在 Ω_{DNS} 上。– 在 Ω_{DNS} 上将 $\bar{u}_j$ 向前模拟一个时间步，其中该单步模拟以滤波嵌入式 DNS $\hat{u}_j$ 为初始条件，得到 $\bar{u}_{j+1}$ 在 Ω_{DNS} 上。– 对嵌入式 DNS u_{j+1} 进行滤波，生成滤波嵌入式 DNS 数据 $\hat{u}_{j+1}$，用于训练。– 以学习率 $\alpha^{(j)}$ 执行一步随机梯度下降，更新参数 $\theta^{(j)}$ ，以最小化子区域 Ω_{DNS} 上 $\bar{u}_{j+1}$ 与 $\hat{u}_{j+1}$ 之间的差异。

请注意，在模拟式 (3) 时，参数 $\theta^{(j)}$ 会同时进行优化，从而为大涡模拟方程提供一种动态闭合方法。

我们的动态闭合方法专为预测湍流的稳态统计量而设计。尽管流速本身是非定常的，但其时间平均统计量（例如流速分布）会随着 $t \to \infty$ [7]收敛。因此，我们的闭合算法会动态地优化闭合模型参数 θ，以恢复滤波后的嵌入式直接数值模拟稳态动力学$t \to \infty$。原则上，随着在线训练期间闭合模型不断改进，大涡模拟模型也会随之改进，嵌入式直接数值模拟计算的边界条件也会更加准确。随着 Ω_{DNS} 的边界条件更加准确，嵌入式直接数值模拟将更准确地表示最小湍流尺度上的流动，从而进一步改进闭合模型的训练。

3 数值结果

3.1 计算实现

我们研究了该方法在不可压缩衰减各向同性湍流中的应用。耦合的直接数值模拟–大涡模拟方程采用交错网格求解，空间离散使用二阶中心差分，时间推进采用显式四阶龙格–库塔方法。连续性约束通过标准压力投影法 [8]施加。

我们使用自动微分计算 $\bar{u}_{j+1}$ 与 $\hat{u}_{j+1}$之间距离的梯度。梯度下降步骤采用恒定学习率 $\alpha^{(j)} = 10^{-1}$。随机梯度下降的数学理论建议，使用随函数 j变化而递减的学习率可能会改善性能。

直接数值模拟计算以合成湍流谱 [9], 初始化，并使其衰减约一个积分时间后再开始大涡模拟计算。大涡模拟计算通过对 DNS数据进行滤波（使用盒式滤波器）并降采样来初始化。[1] 模拟中的所有计算均在图形处理器（GPU）上实现，包括网络闭合模型、纳维–斯托克斯方程求解、嵌入式 DNS 的滤波以及自动微分。

3.2 衰减各向同性湍流

动态深度学习闭合方法应用于两个网格尺寸分别为 $N = 512^3$ 和 $N = 1024^3$的衰减各向同性湍流示例。这些示例及其初始湍流雷诺数 $\text{Re}_{t,0} \equiv \rho u_{\text{rms}} \ell / \mu$列于表1中，其中 $u_{\text{rms}} = \langle u_i u_i \rangle^{1/2}$ 为计算域均方根速度，$\ell = u_{\text{rms}}^3 / \epsilon$ 为伪积分尺度，ϵ 为湍动能耗散率；初始泰勒微尺度雷诺数为 $\text{Re}_{\lambda,0} \equiv \rho u_{\text{rms}} \lambda / \mu$，其中 λ 为泰勒微尺度。

Case	N	$\text{Re}_{\ell,0}$	$\text{Re}_{\lambda,0}$
A	512^3	1576	102.5
B	1024^3	1749	162.0

表1：DNS案例A和B的初始湍流雷诺数和泰勒微尺度雷诺数。

为了评估动态深度学习闭合方法的准确性，分别在网格尺寸为 1024^3 和 512^3 的网格上对这两个案例进行了直接数值模拟计算。通过与这些滤波后的直接数值模拟数据进行比较，评估动态 DL-LES 模型的准确性。

对于 1024^3 和 512^3 这两种情况，动态 DL-LES 模型采用盒式滤波器对速度进行滤波。嵌入式 DNS 计算域 Ω_{DNS} 是一个立方体，边长为 16 个大涡模拟计算单元，即 $(16 \times d)^3$ 个嵌入式 DNS 计算单元，其中 $d = \Delta_{\text{LES}} / \Delta_{\text{DNS}}$ 为大涡模拟滤波尺度。大涡模拟网格点的数量分别为 $(\frac{512}{d})^3$和 $(\frac{1024}{d})^3$,。例如，在我们的数值模拟中，1024^3情况采用滤波

[1]这里使用了同位滤波器，因此交错网格大涡模拟计算的初始化会产生一些误差，今后可以对此进行改进。

比值 d 将对应于具有 $(\frac{1024}{d})^3$ 个网格点的大涡模拟计算。对于最大的滤波器尺寸（$d = 9$ 和$d = 15$），我们采用嵌入式高保真大涡模拟计算（而非真正的直接数值模拟），其嵌入网格比全尺寸大涡模拟网格更精细，但比直接数值模拟网格更粗，即 $\Delta_{\text{LES}} < \Delta_{\text{Embedded}} < \Delta_{\text{DNS}}$。对于这些计算，嵌入式模拟不使用亚格子模型。全尺寸直接数值模拟、全尺寸大涡模拟及嵌入网格的网格尺寸汇总于表2。

N_{DNS}	N_{LES}	$d = \Delta_{\text{LES}}/\Delta_{\text{DNS}}$	N_{Embedded}	$\Delta_{\text{Embedded}}/\Delta_{\text{DNS}}$
512^3	102^3	5	$(16 \times 5)^3$	1
1024^3	204^3	5	$(16 \times 5)^3$	1
1024^3	146^3	7	$(16 \times 7)^3$	1
1024^3	113^3	9	$(16 \times 3)^3$	3
1024^3	68^3	15	$(16 \times 5)^3$	3

表2：测试案例的 DNS、LES 及嵌入式模拟网格与滤波器尺寸。

在数值结果中，我们将动态 DL-LES 模型与滤波直接数值模拟进行比较。作为基准，我们还将动态 DL-LES 模型与以下两种方法进行比较：(1) 不含闭合模型的大涡模拟方程（即将未闭合项设为零），称为“NM-LES”；(2) 采用常系数 Smagorinsky 闭合模型的大涡模拟方程 [10], ，称为“SM-LES”，其中 $C_S = 0.17$。动态 DL-LES 模型有两个版本，均经过训练和评估。第一个版本称为“Dynamic DL-LES”，其闭合模型是通过在线嵌入式直接数值模拟流程训练的神经网络。第二个版本称为“Dynamic DL-SM-LES”，其闭合模型是 Smagorinsky 模型与通过在线嵌入式直接数值模拟流程训练的神经网络的组合。

3.2.1 解析动能衰减

我们在图1–10中比较了大涡模拟模型预测的解析动能衰减。其中，右列的图采用双对数坐标。图1–2比较了 $N = 512^3$ 案例在 $d = 5$滤波条件下，滤波直接数值模拟、动态 DL-LES、动态 DL-SM-LES、SM-LES和NM-LES模型的动能。类似地，图3–4比较了 $N = 1024^3$ 案例在 $d = 5$ 滤波条件下的各大涡模拟模型。由此可见，与SM-LES计算相比，动态DL-LES模型通常能更准确地预测解析动能衰减。正如预期，NM-LES的耗散性不足。

随后，图5–10展示了 $N = 1024^3$ 案例中将滤波器尺寸增大至 $d = 7$、 $d = 9$和 $d = 15$的影响。对于较大的 $d = 9$ 和 $d = 15$ 滤波器尺寸，嵌入式模拟并非DNS，而是采用 $\Delta_{\text{Embedded}}/\Delta_{\text{DNS}} = 3$ 滤波器尺寸的高保真NM-LES。总体而言，动态DL-LES模型对湍流动能衰减给出了最准确的预测，即使对于相对较大的滤波器尺寸也是如此；在这些尺寸下，嵌入式NM-LES无法解析Kolmogorov尺度。随着滤波器尺寸增大，精度差异也随之增加；对于最大的滤波器尺寸，两个DL-LES模型均显著优于作为基准比较模型的SM-LES和NM-LES。

3.2.2 解析动能谱

图11–15比较了滤波直接数值模拟和大涡模拟模型的解析动能能谱。尽管动态 DL-LES 模型并不完美，但与常系数Smagorinsky模型耦合后（动态 DL-SM-LES），相比单独使用 Smagorinsky 模型，它们对最高波数处解析动能的预测准确得多。相反，SM-LES 往往会高估中间波数处的解析动能；对于较小的滤波器尺寸，则会低估最高波数处的解析动能。NM-LES 会高估最高波数处的解析动能，这在物理上并不正确，但与其缺乏亚格子耗散相符。有趣的是，不含 Smagorinsky项的动态 DL-LES 模型也会高估最高波数处的能量，尽管程度不及 NM-LES；然而，该 DL-LES 模型对整体解析动能衰减的预测是准确的（图1–4）。

需要指出的是，在未采用闭合模型的耦合嵌入式直接数值模拟-大涡模拟中，滤波嵌入式 DNS 的解析动能与动态 DL-LES 对解析动能的预测同样准确。因此，应将这些结果视为一项概念验证：动态 DL-LES 能够从嵌入式 DNS 中学习正确的闭合模型，并将其从嵌入式直接数值模拟子域推广到整个计算域。未来的研究将在非均匀流动中评估动态 DL-LES 方法的性能，具体内容将在第4节中进一步讨论。

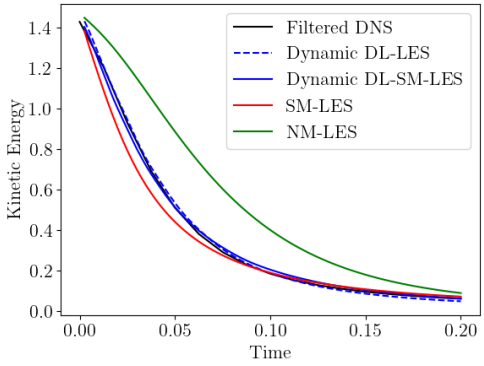

图 1： 512^3 与 $d = 5$ 滤波器

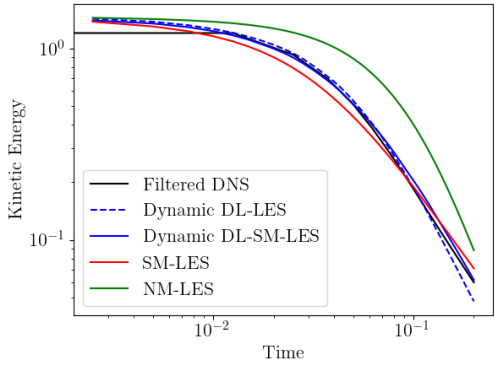

图 2： 512^3 与 $d = 5$ 滤波器

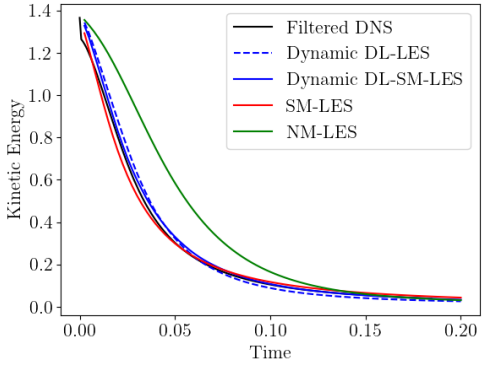

图 3： 1024^3 与 $d = 5$ 滤波器

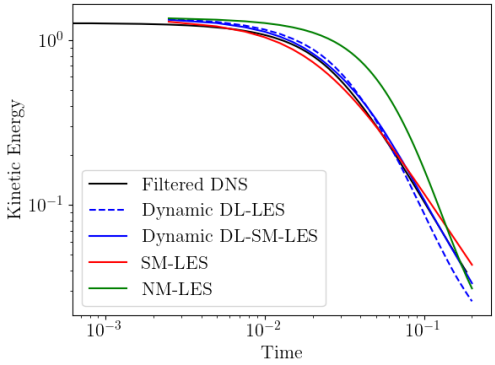

图 4： 1024^3 与 $d = 5$ 滤波器

4 结论

我们开发了一种用于大涡模拟的新型动态封闭模型。该深度学习闭合模型通过在线优化，利用嵌入式直接数值模拟数据进行动态学习。与以往的机器学习封闭模型不同，该方法不需要高保真训练数据。这是一项关键优势，因为生成 DNS数据可能需要大量计算资源，甚至难以实现。此外，该深度学习闭合模型使用来自预测所针对的确切几何形状和物理状态的数据进行训练。以往的机器学习方法则会使用不同几何形状或物理状态下的数据训练闭合模型。在未来及正在开展的研究中，我们正致力于评估该动态深度学习闭合方法在非均匀流动中的表现，例如空间演化射流以及钝体周围的湍流。在这些流动中，我们将评估该方法能否准确预测其稳态统计量。

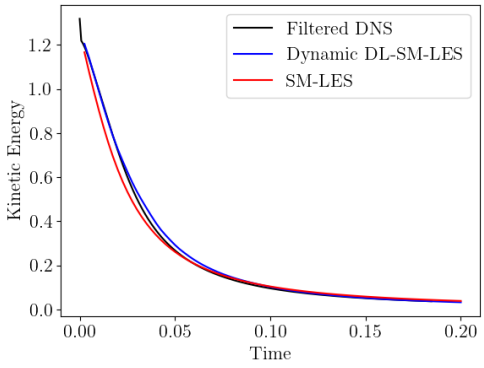

图 5： 1024^3 使用 $d = 7$ 滤波器

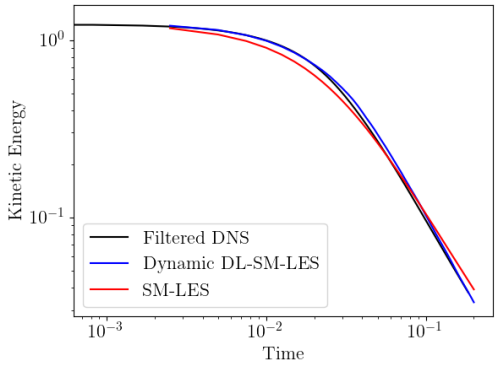

图 6： 1024^3 使用 $d = 7$ 滤波器

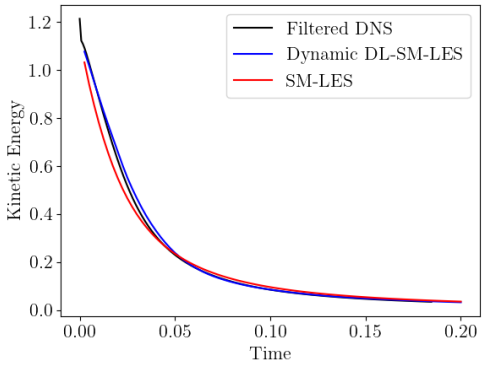

图 7： 1024^3 使用 $d = 9$ 滤波器

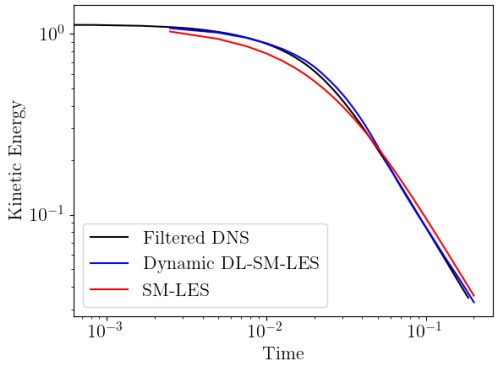

图 8： 1024^3 使用 $d = 9$ 滤波器

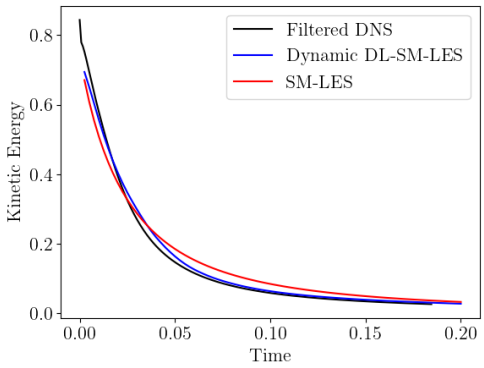

图 9： 1024^3 使用 $d = 15$ 滤波器

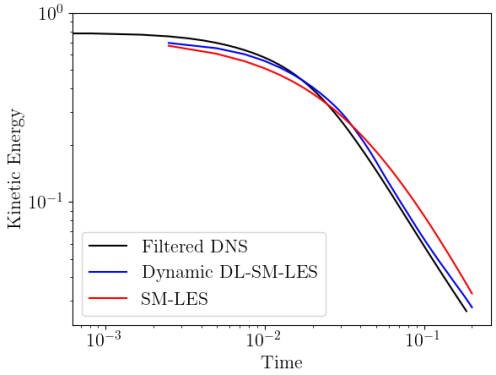

图 10： 1024^3 使用 $d = 15$ 滤波器

参考文献

[1] Justin Sirignano 和 Jonathan F. MacArt，钝体绕流大涡模拟的深度学习闭合模型，arXiv:2208.03498，2022 年。

[2] Jonathan F. MacArt、Justin Sirignano 和 Jonathan B. Freund，《神经网络亚网格尺度湍流模型的嵌入式训练》，《物理评论：流体》，第 6 卷第 5 期，050502，2021 年。

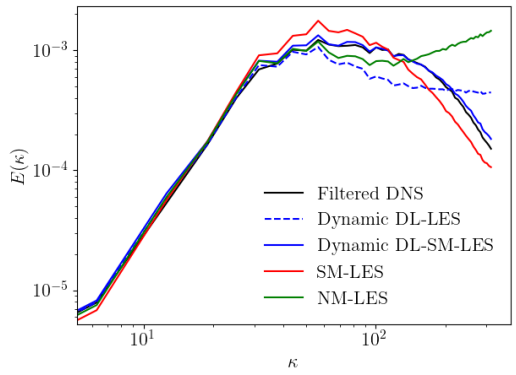

图 11： 512^3 与 $d = 5$ 滤波器

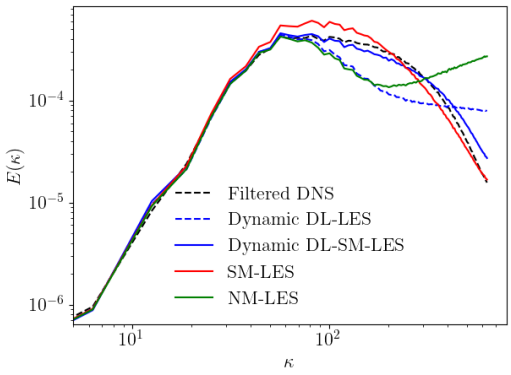

图 12： 1024^3 与 $d = 5$ 滤波器

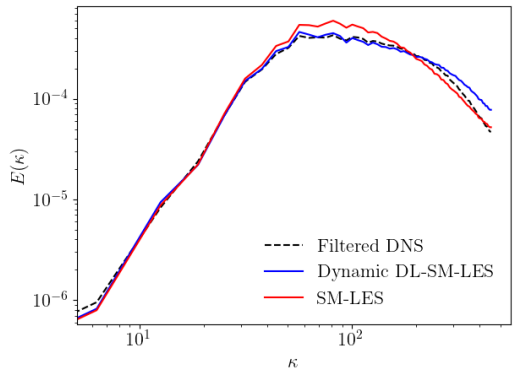

图 13： 1024^3 与 $d = 7$ 滤波器

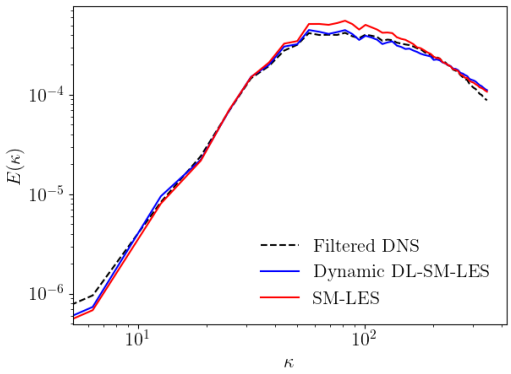

图 14： 1024^3 与 $d = 9$ 滤波器

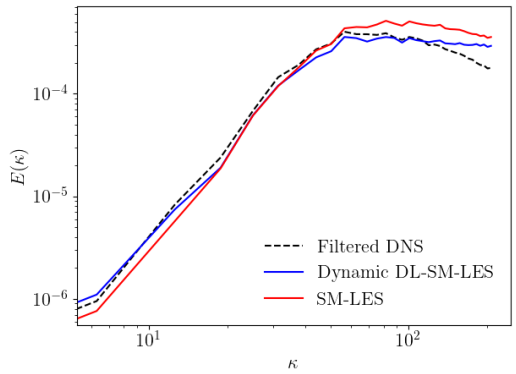

图 15： 1024^3 与 $d = 15$ 滤波器

[3] Justin Sirignano、JonathanF. MacArt 和 Jonathan B.Freund，DPM：一种深度学习偏微分方程增强方法及其在大涡模拟中的应用，《计算物理学杂志》，第 423 卷，109811，2020 年。

[4] L. He，非定常流的多尺度块谱解，《国际数值期刊》，第 86 卷，2018 年。

[5] C. Chen 和 L. He，关于壁面约束湍流的局部嵌入式双尺度解，《流体力学杂志》，第 933 卷，2022 年。[6] C. Chen 和 L. He，受扰动湍流边界层的双尺度解，《流体力学杂志》，第 955 卷，2022 年。[7] Martina Hofmanova、Rongchan Zhu 和 Xiangchan Zhu，确定性与随机三维纳维–斯托克斯方程及欧拉方程的非唯一遍历性，arXiv：2208.08290，2022 年。[8] A. J. Chorin，纳维–斯托克斯方程的数值解，《计算数学》，第 22 卷，第 745–762 页，1968 年。[9] T. Passot 和 A. Pouquet，湍流状态下可压缩均匀流的数值模拟，《流体力学杂志》，第 181 卷，第 441-466 页，1987 年。[10] J. Smagorinsky，采用原始方程的大气环流实验 I：基本实验，《月刊天气评论》，第 91 卷，第 99–164 页，1963 年。