|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  |  |  |  | УТВЕРЖДАЮ |
|  |  |  |  | Профессор кафедры ИАНИ института ИТММ ННГУ им.Н.И. Лобачевского |
|  |  |  |  |  |
|  |  |  |  | Н.В. Старостин |
|  |  |  |  | «\_\_\_» \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_20\_\_ г.  М.П. |

**НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКАЯ РАБОТА   
“МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОТОКА ЖИДКОСТИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГЛУБОКОГО ОБУЧЕНИЯ, ОСНОВАННОГО НА ФИЗИЧЕСКИХ МОДЕЛЯХ”**

**Научно-технический отчет**

**02068143.00225-03-1**

**Листов 13**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  |  | СОГЛАСОВАНО |  | СОГЛАСОВАНО |
|  |  | Старший преподаватель кафедры ИАНИ института ИТММ ННГУ им. Н.И. Лобачевского |  |  |
|  |  |  |  |  |
|  |  | Д.В. Попов |  | Н.А. Хлопцев |
|  |  | «\_\_\_» \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_20\_\_ г.  М.П. |  | «\_\_\_» \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_20\_\_ г.  М.П. |

2022

Реферат

Рассматривается проблема разработки программного средства симулирования движения потока жидкости. Целью работы является создание ПО, которое позволит симулировать процесс потока жидкости из заданного начального положения и визуализировать результат.

В рамках данного проекта предполагались следующие работы:

1. Разработка алгоритма аппроксимирующего состояние потока жидкости в момент времени из неполных начальных данных, в рамках которой решались вопросы создания аппроксиматора, позволяющего получить недостающую информацию о состоянии потока.
2. Разработка алгоритма, позволяющего предсказать состояние потока жидкости через определенный момент времени, в рамках которой решались вопросы подбора правильной структуры нейронной сети и способов её обучения.

Оглавление

[Реферат 2](#_Toc107181243)

[1. Аппроксимация потока жидкости 4](#_Toc107181244)

[1.1 Постановка задачи 4](#_Toc107181245)

[1.2 Алгоритм аппроксимации 4](#_Toc107181246)

[1.2.1 Дерево выбора 4](#_Toc107181247)

[1.2.2 Случайный лес 4](#_Toc107181248)

[1.2.3 Коррекция ошибки 5](#_Toc107181249)

[1.2.4 Результаты работы алгоритма 5](#_Toc107181250)

[2. Прогнозирование состояния потока жидкости 5](#_Toc107181251)

[2.1 Постановка задачи 5](#_Toc107181252)

[2.2 Алгоритм прогнозирования 6](#_Toc107181253)

[2.2.1 Общий подход 6](#_Toc107181254)

[2.2.2 Подбор структуры нейронной сети 6](#_Toc107181255)

[2.2.3 Выбор коэффициента разделения данных на тренировочное и валидационное множество 8](#_Toc107181256)

[2.2.4 Подбор параметров обучения нейронной сети 9](#_Toc107181257)

[2.2.5 Результат работы алгоритма 11](#_Toc107181258)

[2.2.6 Результат работы алгоритма после нескольких итераций 11](#_Toc107181259)

[3. Заключение 12](#_Toc107181260)

1. Аппроксимация потока жидкости

# Постановка задачи

При сборе информации о состоянии потока жидкости часто невозможно узнать точную информацию о нем во всех точках одновременно. Таким образом нужен алгоритм, позволяющий дополнить недостающую информацию на основе частичных данных.

# Алгоритм аппроксимации

## Дерево выбора

Основой алгоритма аппроксимации будет является структура, под названием дерево выбора. Имея N координат точек, в которых известно значение целевой функции структура разделяет область определения функции на N подобластей, каждое из которых содержит только одну точку. Затем предполагаемое значение целевой функции в этих подобластях будет равняться значению известной точки, которая принадлежит этой подобласти. Существует несколько способов разделять область. В данной работе был взят способ, в котором область делится рекурсивно пополам по координате с наибольшим разбросом значений до тех пор, пока в результирующих подобластях не останется по одной точке.

## Случайный лес

Дерево выбора является слишком простой структурой, чтобы верно аппроксимировать значения функции в неизвестных точках. Таким образом вместо использования одного дерева используется множество деревьев, каждое из которых построено на разной выборке точек из тех, значение в которых является известным. Количество деревьев и процент выборки являются параметрами алгоритма. Итоговым значение в точке, которое случайный лес будет возвращать является среднее арифметическое значений, возвращаемых каждым деревом выбора из множества.

## Коррекция ошибки

Так как деревья выбора строятся лишь на некотором проценте точек с известным значением, то деревья не получают полную информацию о значении в неизвестных точках, а значит, что выдаваемое значение случайного леса в этих точках будет немного отличаться от действительного. Для того чтобы это исправить строиться одно дополнительное дерево выбора, которое сдвигает возвращаемые значения на необходимые интервалы в известных точках.

## Результаты работы алгоритма

Для оценки результаты работы алгоритма была подсчитана относительная ошибка в процентах по следующим параметрам: концентрация, скорость по X, скорость по Y, давление, общая на 100 сгенерированных данных. (подробнее в Пояснительной записке)

Средние итоговые результаты:

* Концентрация: 5.35%
* Скорость по х: 4.96%
* Скорость по у: 3.47%
* Плотность: 3.94%
* Общая ошибка: 4.43%

В общем время тестирования с параллельным запуском на 4 потоках составило 2 часа 47 минут. В среднем время работы на 1 потоке с 1 экземпляром данных составило 5 минут 48 секунд.

1. Прогнозирование состояния потока жидкости

# Постановка задачи

При наличии полной информации о состоянии потока жидкости в момент времени часто необходимо спрогнозировать состояния потока в следующий момент времени, при этом использование стандартных алгоритмов симулирования, основанных на дифференциальных уравнениях, является слишком ресурсозатратным. Таким образом необходимо разработать алгоритм, позволяющий быстро спрогнозировать будущее состояние потока.

# Алгоритм прогнозирования

## Общий подход

Для быстрых, но сложных вычислений хорошо подходят методы машинного обучения. Таким образом в качестве алгоритма прогнозирования было решено использовать обученную нейронную сеть.

## Подбор структуры нейронной сети

Для выбора наиболее подходящей структуры был проведен вычислительный эксперимент, заключающийся в обучении нескольких нейронных сетей различных архитектур. Нейронная сеть должна получать информацию о состоянии потока в момент времени t и возвращать состояние потока в момент времени t+Δt. Описание и формат входных данных приведены в Пояснительной записке на тему составления базы тестовых начальных данных.

Было протестировано несколько нейронных сетей различной архитектуры. Была посчитана относительная ошибка (подробнее в Пояснительной записке, пункт Оценка полученных результатов) в процентах по каждому из вычисляемых значений (концентрация, скорость, давление, общая) на валидационном множестве. Один из вариантов архитектуры сети представляет собой полносвязную нейронную сеть, описанную в формате (n1,n2,…,nk) в котором ni – количество нейронов на слое i, слой nk является выходным слоем без функции активации, подразумевается, что во всех нейронных сетях количество нейронов во входном слое равно 100 на всех остальных слоях используется функция активации ReLU. Эксперимент проводился на 500 сгенерированных данных (подробнее в Пояснительной записке) с распределением на 2 множества: 400 тренировочных данных, 100 валидационных данных. Результаты эксперимента по полносвязным нейронным сетям представлены в таблице 1.

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Архитектура сети | Концентрация | Скорость | Давление | Общая |
| (100) | 30.43 % | 23.87 % | 8.34 % | 12.88 % |
| (100,100) | 38.77 % | 23.74 % | 7.57 % | 11.20 % |
| (100,100,100) | 19.56 % | 25.64 % | 5.13 % | 8.73 % |
| (100,100,100,100) | 44.55 % | 27.65 % | 10.41 % | 14.57 % |
| (50,100) | 45.44 % | 19.84 % | 10.32 % | 13.92 % |
| (50,50,100) | 52.26 % | 24.63 % | 9.34 % | 14.51 % |
| (75,50,75,100) | 37.24 % | 28.04 % | 10.48 % | 15.13 % |
| (150,100) | 27.41 % | 19.83 % | 5.85 % | 9.32 % |
| (150,150,100) | 21.05 % | 26.31% | 6.72 % | 10.47 % |
| (150,200,150,100) | 17.38 % | 27.23 % | 4.41 % | 8.11 % |
| (150,200,250,200,150,100) | 45.69 % | 22.39 % | 10.25 % | 13.06 % |

Таблица 1. Данные первого вычислительного эксперимента

Другой вариант архитектуры типа автоэнкодер со свёрточными слоями, с функцией активации ReLU. Эксперимент проводился на 500 сгенерированных данных (подробнее в Пояснительной записке) с распределением на 2 множества: 400 тренировочных данных, 100 валидационных данных. Относительная ошибка для данной сети на валидационном множестве составила:

Концентрация – 70.64 %

Скорость – 68.78 %

Давление – 24.87 %

Общая – 34.21 %

Следующий вариант архитектуры также использует сверточные слои - U-net (рисунок 1). Сужающийся путь — типичная архитектура сверточной нейронной сети с добавлением каналов признаков. На первых уровнях происходят две свертки 2x2, затем два уровня со сверткой 5x5. Каналы увеличиваются в последовательности , , , , , где y – параметр, носящий название “размер нейронной сети”. На всех слоях свертки используется активационная функция LeakyReLU. После свертки происходит обратный процесс - развертка. Структура уровней развертки соответствует структуре в свертке на том же уровне. В добавок каждый уровень развертки принимает на вход информацию о выходных значениях соответствующего уровня свертки. На всех слоях развертки используется функция ReLU. Функция потерь – L1, оптимизатор Adam.

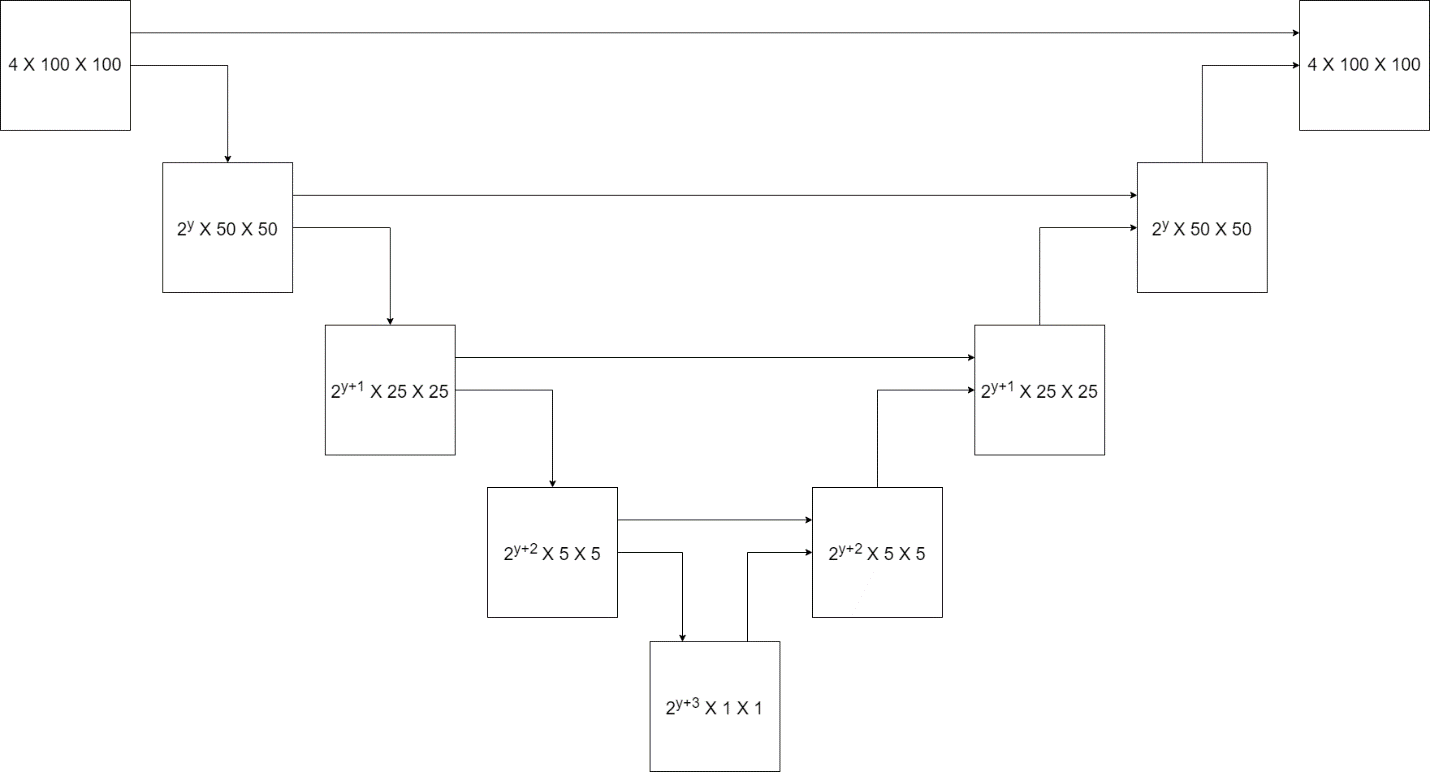


Рисунок 1. Архитектура U-net

Эксперимент проводился на 500 сгенерированных данных (подробнее в Пояснительной записке) с распределением на 2 множества: 400 тренировочных данных, 100 валидационных данных. Относительная ошибка на валидационном множестве для данной сети:

Концентрация – 18.22 %

Скорость – 10.34 %

Давление – 3.98 %

Общая – 5.41 %

Из результатов эксперимента был сделан вывод что для задачи прогнозирования состояния потока жидкости лучше всего подходит нейронная сеть вида U-net.

## Выбор коэффициента разделения данных на тренировочное и валидационное множество

При обучении нейронных сетей стандартно множество данных делится на тренировочное и валидационное множество с пропорциями 0.8 к 0.2, но это не является обязательным условием.

Возможны варианты, когда при другом разделении полученная нейронная сеть будет иметь лучшие результаты. Для того, чтобы выбрать правильный процент соотношения тренировочной и валидационной выборки был проведен второй вычислительный эксперимент, в ходе которого было сгенерировано и оценено несколько моделей, были посчитаны относительные ошибки на валидационном множестве. Количество сгенерированных данных – 500 (подробнее в Пояснительной записке). Результаты эксперимента представлены в таблице 2.

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | 90/10 | 80/20 | 70/30 | 60/40 | 50/50 | 40/60 | 30/70 | 20/80 | 10/90 |
| Концентрация | 16.78% | 18.22% | 17.89% | 18.78% | 16.85% | 18.96% | 17.6% | 17.43% | 18.21% |
| Скорость | 11.4% | 10.34% | 10.67% | 10.66% | 11.8% | 11.05% | 11.58% | 11.65% | 12.93% |
| Давление | 3.56% | 3.98% | 3.93% | 4.31% | 4.07% | 4.56% | 4.72% | 4.98% | 5.91% |
| Общая | 5.11% | 5.41% | 5.37% | 5.74% | 5.98% | 5.97% | 6.11% | 6.26% | 7.16% |

Таблица 2. Данные второго вычислительного эксперимента

Из таблицы видно, что при значении доли вариационных файлов 0.1 обученная модель показала наилучшие результаты. Данный эксперимент также подчеркивает, что при увеличении количества сгенерированных данных, возможно, удастся повысить точность нейронной сети.

## Подбор параметров обучения нейронной сети

При обучении нейронной сети используется несколько различных параметров, от которых зависят полученные результаты. Был проведен третий вычислительный эксперимент по подбору этих параметров, заключающийся в полном переборе всевозможных комбинаций следующих параметров и их значений: размер батча (1, 5, 10), коэффициент скорости обучения (1e-02, 1e-03, 1e-04, 1e-05), уменьшать ли коэффициент скорости обучения по прошествию итераций (истина, ложь), размер нейронной сети (4, 5, 6, 7). Далее в таблице 3 представлены следующие обозначения:

* epochs – количество итераций обучения, рассчитывается по формуле , где – треинровочное множество, – размер батча
* batch size – размер батча
* lr – коэффициент скорости обучения
* decay – Наличие уменьшения коэффициента скорости обучения по прошествию итераций
* y – размер нейронной сети,

Было проведено несколько попыток обучения с разными комбинациями значений этих параметров. Эксперимент проводился на 500 сгенерированных данных (подробнее в Пояснительной записке) с распределением на 2 множества, основываясь на выводах из предыдущего эксперимента: 450 тренировочных данных, 50 валидационных данных. Для простоты оценки результатов, за критерий оценивания было взято значение средней общей относительной ошибки на валидационном множестве. Формула подсчета общей относительной ошибки описана в ПЗ пункт Оценка полученных результатов. 10 лучших результатов приведены в таблице 3, L1 – значение функции потерь для нейронной сети. Полные результаты находятся в Приложении 1.

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **epochs** | **batch size** | **lr** | **decay** | **y** | **Средняя общая относительная ошибка** |
| 222 | 10 | 0,001 | ИСТИНА | 7 | 4,281432755 |
| 222 | 10 | 0,001 | ЛОЖЬ | 7 | 4,356475011 |
| 111 | 5 | 0,001 | ИСТИНА | 7 | 4,577854693 |
| 222 | 10 | 0,01 | ИСТИНА | 7 | 4,647916038 |
| 222 | 10 | 0,001 | ИСТИНА | 6 | 4,739349663 |
| 222 | 10 | 0,001 | ИСТИНА | 5 | 4,78196487 |
| 222 | 10 | 0,001 | ЛОЖЬ | 6 | 5,090312943 |
| 222 | 10 | 0,0001 | ЛОЖЬ | 7 | 5,115290783 |
| 111 | 5 | 0,001 | ЛОЖЬ | 7 | 5,156119298 |

Таблица 3. Данные третьего вычислительного эксперимента

Исходя из результатов эксперимента были выбраны следующие значения параметров:

* epochs – 222
* batch size – 10
* lr – 0,001
* decay – Истина
* y – 7

## Результат работы алгоритма

Для оценки результаты работы алгоритма была подсчитана относительная ошибка в процентах по следующим параметрам: концентрация, скорость, давление, общая на 500 сгенерированных данных, 450 из которых принадлежат тренировочному множеству, 50 – валидационному. (подробнее в Пояснительной записке)

Средние итоговые результаты:

* Концентрация: 12.8%
* Скорость: 7.45%
* Давление: 1.47%
* Общая ошибка: 2.87%

В общем время тестирования составило 1 минуту 52 секунды. В среднем время работы с 1 экземпляром данных составило 0.26 секунд.

## Результат работы алгоритма после нескольких итераций

В качестве дополнительного эксперимента была проведена попытка спрогнозировать состояние потока жидкости после десяти итераций. Для этого выходные результаты i-й итерации подавались в качестве входа i+1-й итерации. В результате была получена средняя относительная ошибка работы алгоритма после десяти итераций на 10 данных.

* Концентрация: 28.87%
* Проекция скорости на ось X: 26.29%
* Проекция скорости на ось Y: 31.41%
* Давление: 10.41%
* Общая: 14.65%

Визуализируя полученные данные (рис. 2, рис. 3), можно увидеть, что нейронная сеть удачно предсказывает некоторые общие черты состояния потока жидкости, однако потеря «деталей» слишком сильно влияет на получаемые результаты. Данный эксперимент подчеркивает важность дальнейшего исследования и доработки нейронной сети.

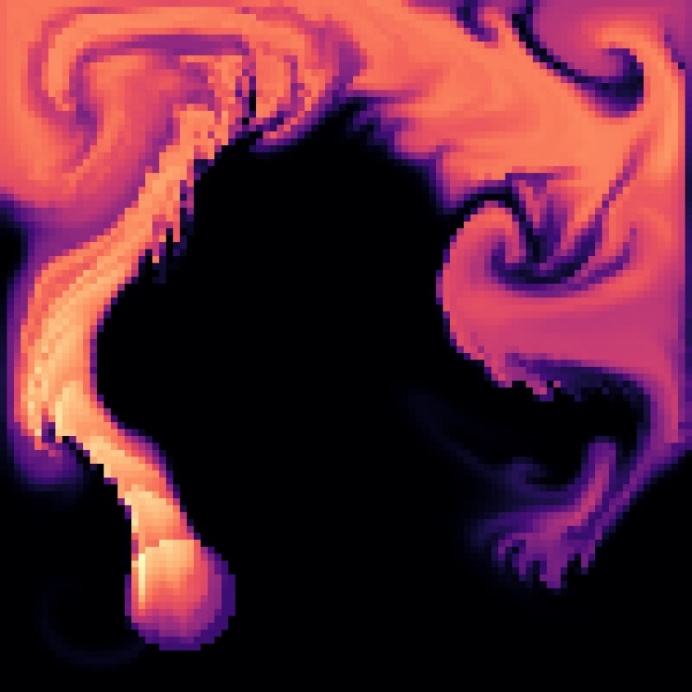


Рисунок 2. Концентрация жидкости после 10-и итераций точного симулирования через уравнения Навье-Стокса

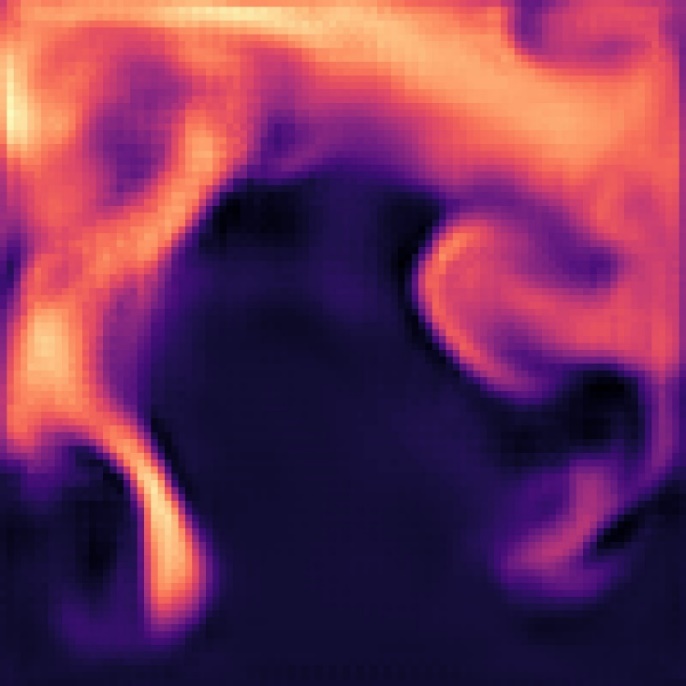


Рисунок 3. Концентрация жидкости после 10-и итераций нейронной сети

1. Заключение

Таким образом, результатами данной работы являются:

1. Разработан алгоритм, аппроксимирующий состояние потока жидкости в момент времени из неполных начальных данных, который заменяет неизвестные значения данными, полученными из аппрокисматора вида случайного дерева. Средняя общая относительная ошибка на 100 сгенерированных данных составила 4.43%, среднее время составило 5 минут 48 секунд.
2. Были исследованы несколько видов нейронных сетей (полносвязных, автоэнкодер, U-net) для предсказания состояния жидкости через определенный момент времени, по результатам первого вычислительного эксперимента по оценке точности нейронных сетей лучшей оказалась U-net. Был проведен второй вычислительный эксперимент по оценке количественного разделения тренировочного и валидационного множества, из которого можно сделать вывод, что при увеличении количества данных возможно удастся достичь большей точности нейронной сети, оптимальным разбиением при количестве данных 500 является 90%/10%. Был проведен третий вычислительный эксперимент по подбору параметров нейронной сети, были выбраны следующие оптимальные параметры: размер батча – 10, коэффициент обучения 0.001 с последующим уменьшением, размер нейронной сети – 7. Средняя общая относительная ошибка на 50 валидационных данных составила 4.43%. Был проведен четвертый вычислительный эксперимент по оценке работы нейронной сети на собственных выходных данных. Средняя общая ошибка на 10 валидационных данных составила 14.65%.

По результатам данной работы, можно сделать вывод, что алгоритмы требует дальнейшего исследования и доработок.