

# 集合卡尔曼方法及其在湍流建模中的应用



张鑫磊<sup>1,2</sup>, 刘毅<sup>1,2</sup>, 何国威<sup>1,2</sup>

1. 中国科学院力学研究所 非线性力学国家重点实验室, 北京 100190

2. 中国科学院大学 工程科学学院, 北京 100049

**摘要:** 依赖湍流模型的雷诺平均方法被广泛应用于航空航天和 underwater 装备的研制等重大工程问题。然而, 湍流模型大多建立在线性涡黏假设的基础上, 导致预测结果有很大的不确定性。近年来, 数据驱动方法逐渐成为构造高精度湍流模型的有力工具。集合卡尔曼方法是一种基于贝叶斯理论的数据驱动方法, 能够结合物理模型和稀疏观测数据, 提高模型预测准确性。该方法已用于湍流建模问题, 降低模型不确定度和构建基于神经网络的非线性涡黏模型。本文主要介绍了集合卡尔曼方法针对湍流建模问题的发展与应用, 包括经典集合卡尔曼方法、正则集合卡尔曼方法, 以及这些方法在湍流场反演和湍流建模方面的最新进展。

**关键词:** 湍流建模; 集合卡尔曼方法; 机器学习; 数据同化; 不确定性量化

**中图分类号:** O35

**文献标识码:** A

计算流体力学 (CFD) 是湍流预测的重要手段。尽管可用计算资源逐年增长, 工程 CFD 仍主要依赖需要湍流模型的雷诺平均 (RANS) 方法。尤其对于设计优化和不确定性量化等相关工程应用<sup>[1]</sup>, 雷诺平均方法仍然起着重要作用。然而, 湍流模型受限于各类假设, 往往难以给出准确的预测结果。如基于 Boussinesq 假设的湍流模型, 对于大分离、二次流等复杂多流态流动, 预测结果有很大的不确定性。高阶矩湍流模型虽然具有相对较好的预测准确性, 但面临鲁棒性不足的困难, 而且存在再分配项的封闭问题。因此, 开发高保真且鲁棒的湍流模型是十分必要的。近年来, 随着人工智能算法的快速发展和湍流数据的累积, 数据驱动方法在湍流建模问题中的优势日益凸显。这种方法能够根据观测数据分析高维流场特征, 识别物理量之间的潜在关联, 成为开发湍流模型的先进工具之一<sup>[2]</sup>。

集合卡尔曼方法 (EnKF) 是一种基于贝叶斯理论的数据同化方法。该方法通过结合物理模型与观测数据, 可以给出系统状态的最优估计, 被广泛应用于地质科学和气象学。近年来, 这种方法凭借其无梯度的优势<sup>[3]</sup>, 被

应用于流体力学的相关反问题求解, 如湍流模型不确定性量化<sup>[4]</sup>、流场重构<sup>[5-6]</sup>、血液流动<sup>[7]</sup>、海啸流动<sup>[8]</sup>和噪声反演<sup>[9]</sup>等。集合卡尔曼方法在湍流模型不确定性方面的综述详见参考文献[10]。本文旨在简要讨论集合卡尔曼方法的最新发展及其在湍流模型问题中的应用。

本文的主要内容安排如下: 第1节讨论集合卡尔曼方法的原理和实现方法。在该节中, 我们首先推导了集合卡尔曼方法的更新格式, 然后介绍了可以施加约束的正则集合卡尔曼方法以及相关的开源代码。第2节是方法的应用部分, 我们介绍了集合卡尔曼方法在湍流模型参数估计、湍流场反演和神经网络模型训练三个层面的应用。第3节对全文内容进行了总结。

## 1 集合卡尔曼方法

### 1.1 基于集合方法的湍流模型问题描述

经典湍流模型由于参数设定上的经验性和模型结构上的固有缺陷, 导致预测结果存在很大的不确定性。在经典模型框架下, 可以通过降低现有模型在经验参数和结构上的不确定度, 提高预测的准确度。此外, 当采用

收稿日期: 2022-12-25 返修日期: 2023-01-13

基金项目: 国家自然科学基金(11988102, 12102435)

引用格式: 张鑫磊, 刘毅, 何国威. 集合卡尔曼方法及其在湍流建模中的应用[J]. 气动研究与试验, 2023, 01(01): 34-44.

Zhang Xinlei, Liu Yi, He Guowei. Ensemble kalman method and its applications in turbulence modelling[J]. Aerodynamic Research & Experiment, 2023, 01(01): 34-44. (in Chinese)

神经网络构建雷诺应力模型时, 可以通过降低神经网络权重的不确定度, 实现流场的准确预测。在本节中, 我们主要介绍集合卡尔曼方法如何利用观测数据降低这些不确定性的原理。

雷诺平均模拟可以简单表达为  $\hat{y} = \mathcal{H}[x]$ , 其中  $x \in \mathbb{R}^N$  表示湍流模型中的不确定量, 如模型经验参数、雷诺应力或者神经网络模型的权重系数;  $\hat{y} \in \mathbb{R}^D$  是预测量, 如速度;  $\mathcal{H}: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^D$  代表模型算子, 能够将不确定量  $x$  映射到预测量  $\hat{y}$ ;  $N$  和  $D$  分别代表空间离散化后不确定量  $x$  和预测量  $\hat{y}$  的维度。假设模型不确定量是满足高斯过程的随机变量, 它的均值为 RANS 基准结果  $x^0$ , 协方差为高斯核函数  $\mathcal{K}$ , 即  $x \sim \mathcal{N}(x^0, \mathcal{K})$ 。

观测数据  $y$  可以写作  $y = y^d + \epsilon$ , 其中  $y^d$  为测量值,  $\epsilon$  表征观测误差, 包括测量误差和过程误差。集合卡尔曼方法通常将数据误差  $\epsilon$  当作独立同分布的高斯随机变量, 满足  $\epsilon \sim \mathcal{N}(0, R)$ ,  $R$  为观测误差的协方差。

贝叶斯定理是集合卡尔曼方法的基本原理, 它可以表达为<sup>[11]</sup>

$$p(x|y) \propto p(x)p(y|\mathcal{H}[x]) \quad (1)$$

式中,  $p(x)$  是不确定量  $x$  的先验分布, 表征未考虑观测数据时的概率估计,  $p(y|\mathcal{H}[x])$  是似然概率分布, 表征模型预测和观测数据之间的似然性。式 (1) 可以概括为, 考虑观测数据后  $x$  的后验分布正比于先验概率和似然概率的乘积。

为了获得后验分布, 最常用的手段是采用蒙特卡罗方法。但是该方法通常需要至少数百万个样本来估计后验概率分布, 这意味着需要进行大量的 CFD 计算。为降低计算量, 一般采用最大后验 (maximum a posteriori, MAP) 估计来捕捉后验概率分布的众数, 而不是完整的后验分布, 从而减少需要的样本量。通过假设先验和似然概率都是高斯分布, 贝叶斯定理 (见式(1)) 可以写为

$$p(x|y) \propto p(x)p(y|\mathcal{H}[x]) \propto e^{-J} \quad (2)$$

在式 (2) 中,  $J$  可以表示为

$$J = \frac{1}{2} \|x^a - x^f\|_P^2 + \frac{1}{2} \|y - \mathcal{H}[x^a]\|_R^2 \quad (3)$$

式中,  $\| \cdot \|_A^2 = *^T A^{-1} *$ ,  $P$  为模型误差协方差, 上标 a 和 f 分别代表分析 (analysis) 和预报 (forecast)。如此, 不确定量  $x$  的后验概率估计便转化成了寻找最优不确定量  $x$ ,

最小化目标函数  $J$  的优化问题。

求解这样的最小化问题, 可以采用基于伴随方程的变分方法, 也可以采用基于集合的数据同化方法。本文着重讨论的集合数据同化方法则属于后者, 是一类基于蒙特卡罗技术的统计推断方法。这类方法包括集合卡尔曼方法 (EnKF)<sup>[12]</sup> 及其衍生方法, 如集合随机最大似然法 (EnRML)<sup>[13-14]</sup>、多数据同化的集合卡尔曼方法 (EnKF-MDA)<sup>[15]</sup>、集合变分方法 (EnVar)<sup>[16]</sup> 等。接下来主要介绍集合卡尔曼方法, 包括经典的集合卡尔曼方法和可以施加约束的正则集合卡尔曼方法。

## 1.2 集合卡尔曼方法

集合卡尔曼方法可以由线性高斯假设下的贝叶斯定理推导得到<sup>[17]</sup>。它最初由 Evensen<sup>[12]</sup> 提出, 并由 Burger 等<sup>[18]</sup> 采用扰动观测进一步完善, 缓解了后验方差低估的问题。

集合卡尔曼方法采用蒙特卡罗采样技术估计先验概率分布的均值和协方差。因此, 与经典的卡尔曼方法相比, 它不需要存储和更新满秩的协方差矩阵, 这样避免了大矩阵的存储占用问题。式 (3) 中的不确定量  $x^f$  可以表示为

$$X^f = \{x_j^f\}_{j=1}^M$$

式中,  $M$  为总样本数。模型误差协方差  $P$  可以由这些样本集合表征为

$$P = \frac{1}{M-1} (X^f - \bar{X}^f)(X^f - \bar{X}^f)^T$$

式中,  $\bar{X}^f$  是集合  $X^f$  的均值。

$$\bar{X}^f = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M x_j^f$$

通过最小化目标函数式 (3), 可以得到每个样本  $x_j$  的更新格式为

$$\begin{cases} x_j^a = x_j^f + \mathbf{K}(y_j - Hx_j^f) \\ \mathbf{K} = PH^T(HPH^T + R)^{-1} \end{cases} \quad (4)$$

式中,  $\mathbf{K}$  是卡尔曼增益矩阵,  $H$  是线性观测算子。式 (4) 表明, 样本平均值也以类似的形式更新。Evensen<sup>[19]</sup> 和 Burger<sup>[18]</sup> 证明了集合卡尔曼方法更新后的协方差矩阵  $P^a$  可以写为经典卡尔曼方法相同的形式, 即  $P^a = (I - \mathbf{K}H)P^f$ , 以此验证了集合卡尔曼方法与经典方法的一致性。由于样本有限, 所估计的误差协方差会存在伪关联问题, 因此通常需要引入局域化<sup>[20-21]</sup> 和膨胀化<sup>[22]</sup> 技术以消除采样误

差带来的影响。

集合卡尔曼方法能够利用稀疏含噪数据,显著降低模型不确定性,已被应用于流场重构、不确定性量化、湍流建模等问题中。如Colburn等<sup>[23]</sup>利用集合卡尔曼方法,基于有限的壁面信息对槽道湍流进行了重构。在第2节中,我们将着重介绍该方法在湍流模型不确定性量化和神经网络建模方面的相关应用。

### 1.3 正则集合卡尔曼方法

数据驱动湍流建模经常会遇到场反演问题,即由稀疏的观测数据推断高维的雷诺应力场。在这类反演问题中,观测数据量远远小于模化量的维度,因而有着很强的病态性,导致解不唯一。这就需要引入额外的物理约束或异质数据,限制最优解的搜索空间,缓解问题的病态性。经典的集合卡尔曼方法并不具备施加约束的能力。鉴于此,Zhang等<sup>[24]</sup>提出了正则集合卡尔曼方法(REnKF),实现了在集合方法框架下广义约束的施加。该方法对应的目标函数为

$$J(x) = \|x^a - x^f\|_p^2 + \|\mathcal{H}[x^a] - y\|_k^2 + \|\mathcal{G}[x^a]\|_w^2 \quad (5)$$

式中, $\mathbf{W}$ 是约束 $\mathcal{G}[x]$ 的权重矩阵,用以控制约束项的强度。与式(3)相比,该方法的目标函数中增加了与 $\mathcal{G}[x]$ 相关的约束项。针对不同的应用场景,该方法能够通过构造不同形式的 $\mathcal{G}[x]$ 函数,实现相应的约束。例如,为了提高模化场的空间平滑度,约束函数可以构造为 $\mathcal{G}[x] = \nabla x$ ,以避免反演场出现较大的空间梯度。相似地,为了考虑异质数据,约束函数可以构造为 $\mathcal{G}[x] = \mathcal{D}[x] - d$ ,其中 $d$ 表示异质观测数据比(如压力或升力), $\mathcal{D}$ 表示将 $x$ 投影到异质数据所在空间的模型算子。

通过最小化目标函数式(5),可以推导得到正则集合卡尔曼方法的更新格式为

$$\begin{cases} \tilde{x}_j^f = x_j^f - P\mathcal{G}[x_j^f]^T \mathbf{W}\mathcal{G}[x_j^f] \\ x_j^a = \tilde{x}_j^f + K(y_j - H\tilde{x}_j^f) \end{cases} \quad (6)$$

该更新格式分为两步:第一步是通过考虑约束 $\mathcal{G}[x]$ 更新模化量;第二步是为了降低模型预测与观测数据 $y$ 之间的误差,推断不确定量。图1比较了集合卡尔曼方法和正则集合卡尔曼方法的具体实现过程。由图1可知,与集合卡尔曼方法相比,正则集合卡尔曼方法在卡尔曼更新步之前,增加了一个预修正步。通过预修正的算法改进,

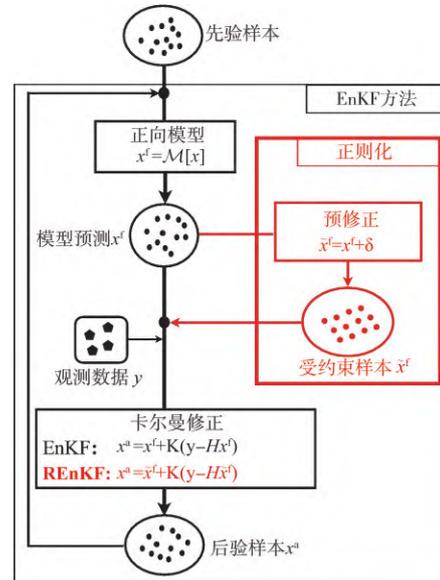


图1 集合卡尔曼方法和正则集合卡尔曼方法流程图比较<sup>[24]</sup>  
Fig.1 Schematic of ensemble Kalman method and regularized ensemble Kalman method<sup>[24]</sup>

赋予了集合方法施加约束的能力,具有易实现的特点。

正则集合卡尔曼方法已被用于反演涡黏场、间歇因子场等湍流建模相关问题中。通过结合不同的约束条件和观测数据,该方法可以反演得到更准确的湍流场,成功缓解了高维反演问题的不适定性。该方法已被集成在开源代码DAFI中。附录简要介绍了DAFI代码的主要特点及其在湍流建模方面的优势。

## 2 集合方法在湍流建模中的应用

集合方法在湍流模型问题中的应用主要有两方面:一方面是在现有模型框架下,降低模型的不确定性;另一方面是构建基于神经网络的雷诺应力模型。湍流模型的不确定性可分为模型参数的不确定性和模型结构的不确定性。基于此,集合方法分别被用于模型参数估计和反演涡黏等湍流场。此外,该方法也可以用于直接构建基于神经网络的湍流模型。下面将分别介绍集合卡尔曼方法在模型参数估计、湍流场反演和神经网络模型训练这三个方面的应用。

### 2.1 集合方法在模型参数估计中的应用

模型参数估计是在模型形式确定的情况下,根据观测数据降低模型经验参数的不确定度,从而提高预测准确性。模型参数的维度一般较低,其不确定性量化可以

采用蒙特卡罗方法进行贝叶斯估计。这类方法首先对参数的先验概率分布进行蒙特卡罗采样, 得到先验的参数样本。接着基于贝叶斯定理, 推断出考虑观测数据后参数的后验概率分布。许多研究者尝试做了这方面研究, 如直接采用马尔可夫链蒙特卡罗方法<sup>[25]</sup>, 或利用贝叶斯模型场景平均 (Bayesian model-scenario averaging) 方法<sup>[26]</sup>进行模型参数估计。集合卡尔曼方法是蒙特卡罗方法的低阶实现, 能够通过有限的样本信息, 估计后验概率分布的均值和协方差, 因而也常被用于湍流模型参数估计。

Kato 等<sup>[27]</sup>利用集合卡尔曼方法来确定 Spalart-Allmaras 湍流模型<sup>[28]</sup>的最优经验参数。他们以马赫数 0.2、雷诺数  $5 \times 10^6$  下的平板边界层问题为例, 采用合成数据验证了集合方法的有效性。所谓合成数据是指给定模型参数下模型的预测结果。采用合成数据既避免了模型的结构不确定性, 也能够验证参数估计的准确性。进而, 他们采用集合卡尔曼方法结合试验观测数据, 得到了最优模型参数, 显著提升了模型预测精度, 验证了方法在湍流模型参数估计中的可行性。之后, Kato 等<sup>[29]</sup>进一步针对 RAE2822 翼型和 ONERA M6 机翼绕流, 利用该方法由壁面压力测点标定 Spalart-Allmaras 模型中的 Karman 常数等, 提高了壁面压力系数分布的预测准确性。此外, 集合卡尔曼方法也应用于针对射流和转捩流动的参数估计问题<sup>[30-31]</sup>。

## 2.2 集合方法在湍流场反演中的应用

模型经验参数估计可以在一定程度上提高 RANS 方法的预测准确性。但是, 当预测误差由模型结构不确定性主导时, 仅优化模型参数难以提高预测结果精度。因而, 需要考虑模型结构的不确定度。为了量化模型结构不确定度, 一般需要在湍流不确定量中引入额外的误差项, 进而利用观测数据降低不确定度, 反演出湍流工作变量的最优估计。与参数估计相比, 反演的量不再是低维参数, 而是离散后的高维场, 所以也叫作场反演 (field inversion)<sup>[32]</sup>。根据模型结构的层级, 湍流模型的结构不确定度可以从湍流输运方程源项、涡黏和雷诺应力三个方面来考虑。下面分别介绍集合卡尔曼方法在这三种层面进行湍流场反演的工作。

在湍流输运方程源项修正方面, Singh 和 Duraisamy<sup>[32]</sup>在耗散率输运方程中, 引入了修正场  $\beta(\mathbf{x})$ , 即

$$\frac{D\omega}{Dt} = \beta(\mathbf{x})P_{\omega}(k, \omega, U_i) - D_{\omega}(k, \omega, U_i) + T_{\omega}(k, \omega, U_i)$$

采用伴随方法反演最优修正场。Yang 和 Xiao<sup>[33]</sup>采用集合卡尔曼方法反演转捩模型中的间歇因子场, 并基于神经网络构建了修正量  $\beta$  与流动特征量之间的函数关系。Zhang 等<sup>[34]</sup>将 PIV 试验观测的平均速度和湍动能当作数据集, 用以反演湍动能和耗散率输运方程中的最优修正项  $\beta(\mathbf{x})$ 。基于集合方法, 通过降低预测结果与试验数据之间的误差, 得到了最优的修正量空间分布, 同时提升了速度场和湍动能场的预测准确度。

除了湍流输运方程修正源项的反演, 一些工作直接对涡黏场进行反演。Dow 和 Wang<sup>[35]</sup>针对槽道湍流, 采用伴随方法, 由直接数值模拟 (DNS) 的速度数据反演涡黏场。由于槽道中央处的平均应变率很小, 速度对于涡黏不敏感, 反演问题具有很强的病态性, 导致反演结果产生较大误差。通过施加光滑性约束, 避免涡黏场出现较大的空间梯度, 反演得到了和 DNS 结果十分接近的涡黏场。传统集合卡尔曼方法不能像伴随方法那样施加额外约束。鉴于此, Zhang 等<sup>[36]</sup>采用正则集合卡尔曼的更新公式 (6), 通过施加光滑性约束, 提高了反演涡黏场的精度, 如图 2 所示。结果表明, 正则集合卡尔曼方法能够有效施加约束, 得到与 DNS 结果相吻合的涡黏反演结果。此外, 正则集合卡尔曼方法也可以用来同化多源异质数据, 如同时利用速度和壁面压力数据反演出更加准确的涡黏场<sup>[37]</sup>。

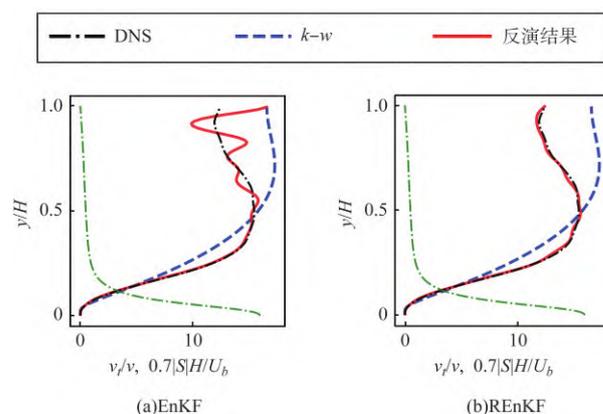


图2 集合卡尔曼方法和正则集合卡尔曼方法在槽道流动涡黏反演上的比较<sup>[36]</sup>

Fig.2 Comparison between ensemble Kalman method and regularized ensemble Kalman method in inferring turbulent eddy viscosity in channel flows<sup>[36]</sup>

反演湍流输运方程中的修正项和涡黏, 都仍在 Boussinesq 假设的框架下, 无法准确反映雷诺应力的各向异性特征。对于雷诺应力各向异性特征明显的流动, 如方槽流动, 以上方法均难以捕捉横截面的二次流特征, 这就需要直接考虑雷诺应力的不确定性。Xiao 等<sup>[4]</sup>采用集合卡尔曼方法, 结合稀疏的速度观测, 量化并降低了雷诺应力的不确定性, 进而提高了速度预测的准确性。将雷诺应力张量转化为6个标量场, 分别表征雷诺应力的幅值、形状和方向, 并考虑了雷诺应力的可实现性原则。此外, 为了缓解高维场反演带来的不适定问题, 采用了 Karhunen-Loeve (KL) 低阶模态来表征这些标量场。简单来说, 该方法将雷诺应力表示为  $n$  个 KL 模态的线性叠加, 即

$$\tau(\mathbf{x}) = \sum_{m=1}^n \omega_m \phi_m(\mathbf{x})$$

式中,  $\omega$  是要推断的随机数,  $\phi(\mathbf{x})$  表示 KL 模态。这样就反演雷诺应力场转变为推断模态系数这样一个低维反问题, 大大降低了反演的病态性。采用集合卡尔曼的更新公式 (4), 针对周期山状流和方槽流动, 结合稀疏的观测数据, 提升了速度场的预测准确性。

在此基础上, Zhang 等<sup>[17]</sup>评估了三种常用集合方法在湍流模型不确定量化方面的性能, 包括集合卡尔曼方法 (EnKF)、集合随机最大似然方法 (EnRML) 和多数数据同化的集合卡尔曼方法 (EnKF-MDA)。他们指出了集合卡尔曼方法重复使用观测数据导致不确定性估计过小的问题, 并验证了集合随机最大似然方法在量化雷诺应力不确定性效率上的优势。图3展示了三种方法在周期山算例中速度的不确定性, 红色范围表示未考虑观测数据时的先验可靠区间, 蓝色代表考虑观测数据后的后验可靠区间。结果表明, 三种集合方法均能够明显降低不确定性, EnRML 和 EnKF-MDA 可以得到的后验不确定性结果相当, 而 EnKF 会相对低估不确定度, 发生样本崩溃, 即样本方差过小, 如图3 (a) 所示。

除了流场速度数据, 其他数据源 (如壁面摩擦系数) 也可以用于降低湍流场的不确定度。Zhang 等<sup>[36-37]</sup>利用壁面摩擦系数反演转捩模型的间歇因子场。采用切比雪夫模态表征间歇因子场的层/湍流界面, 从而把间歇因子场反演转变为模态系数的反演, 有效缓解了反演的病

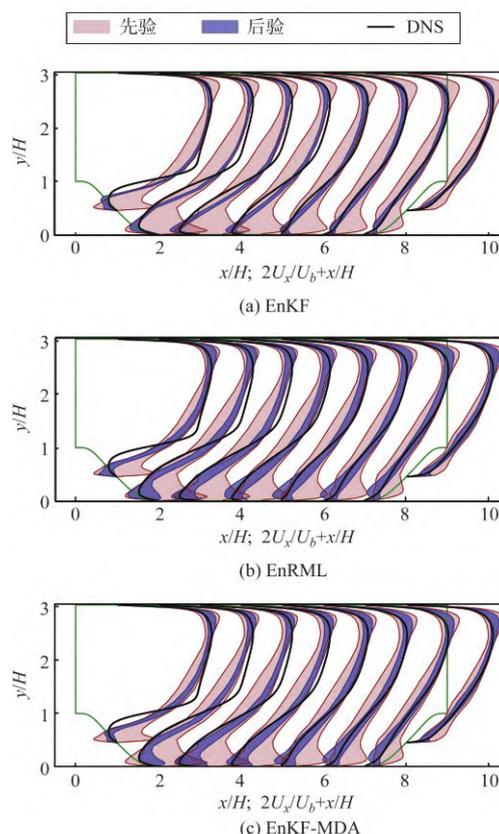


图3 三种集合方法在不确定性量化方面的比较<sup>[17]</sup>

Fig.3 Comparison between three different ensemble methods in uncertainty quantification<sup>[17]</sup>

态性。此外, 由于高阶模态会引入非物理的空间不光滑度, 因此, 采用正则集合卡尔曼方法施加约束, 惩罚高阶模态的系数, 以保证反演的间歇因子场尽可能光滑。如图4所示, 不施加任何约束时, 采用传统集合卡尔曼方法得到的间歇因子场有很明显的振荡, 偏离 Langtry-Menter 模型<sup>[38]</sup>给出的参考值。而采用正则集合卡尔曼方法, 通过施加约束, 反演得到的间歇因子场和参考值吻合较好。

此外, 流动噪声也可以用于反演湍流场。基于 RANS 的噪声预测方法, 通过结合湍流模型和噪声源时空关联模型<sup>[39]</sup>, 能够快速预测远场噪声谱。针对小尺度湍流产生的射流噪声, 通常需要利用 RANS 模型模化的湍动能和耗散率来粗略估计噪声源的时空积分尺度<sup>[40]</sup>, 进而估计远场噪声谱。RANS 模型的不确定性会导致预测结果有较大误差。Zhang 等<sup>[9]</sup>利用集合卡尔曼方法, 结合远场噪声和平均速度场数据, 降低了模化的湍动能和耗散率的不确定性, 显著提升了远场噪声的预测精度。基于集合卡

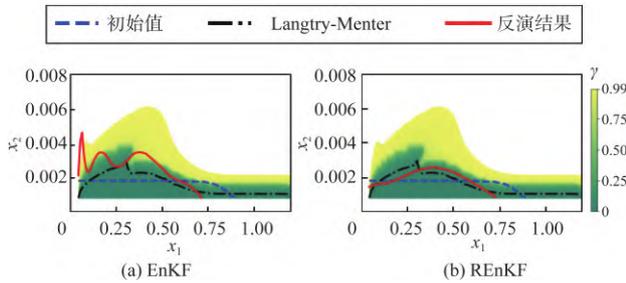


图4 集合卡尔曼方法和正则集合卡尔曼方法的比较:反演的间歇因子场<sup>[36]</sup>

Fig.4 Comparison between ensemble Kalman method and regularized ensemble Kalman method in inferred intermittency fields<sup>[36]</sup>

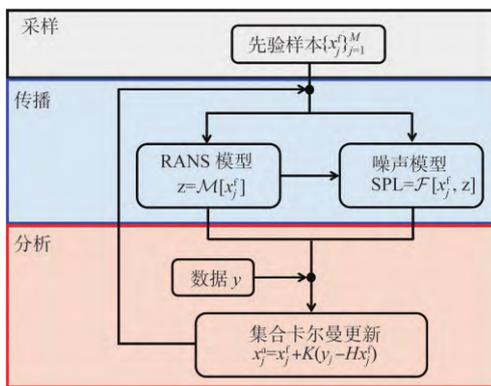


图5 基于集合卡尔曼方法的噪声反演<sup>[9]</sup>

Fig.5 Schematic of acoustic inversion based on ensemble Kalman method<sup>[9]</sup>

尔曼方法的噪声反演流程 (见图5), 待反演量 $x$ 包含湍动能和耗散率。首先通过RANS模型得到流场预测 $z$ , 接着结合噪声预测模型得到远场噪声频谱SPL。最后利用集合卡尔曼更新格式, 将预测出的噪声频谱和流场速度与观测数据进行对比分析, 得到优化的湍动能和耗散率空间分布。需要指出的是, RANS模型中湍动能和耗散率可以看作一种湍流方程工作变量。采用速度数据和噪声数据可能难以同时准确估计出湍动能和耗散率。这里反演得到的是RANS框架下能够准确预测噪声的湍动能和耗散率, 有助于构建更加准确的高效噪声预测模型。

### 2.3 集合方法在神经网络湍流建模中的应用

在前面的章节中, 湍流模型形式是确定的, 通过标定模型参数或反演湍流场, 可以降低模型的不确定度, 提高流场预测精度。但是反演得到的参数和湍流场, 难以直接用于预测其他工况下的流动。鉴于此, 近年来人们尝试建立数据驱动的湍流模型, 利用观测数据构建湍流平均速度与雷诺应力之间的函数关系。

神经网络具有强大的函数表达能力, 能够灵活表征复杂的映射关系。因此, 许多工作基于神经网络构建湍流模型。其中具有代表性的有基于非线性涡黏模型<sup>[41]</sup>的张量基神经网络<sup>[42]</sup>。该神经网络模型, 在保证伽利略不变性的同时, 通过引入高阶张量基, 能够更加灵活地表征雷诺应力与平均速度的关系。此外, 该模型采用张量基的不变量作为模型输入, 避免了输入特征选取的经验性。

为了训练神经网络模型, 通常采用误差反传算法, 利用DNS的雷诺应力数据, 直接优化网络权重。但这种训练方法没有考虑神经网络模型与RANS方程求解器的兼容性, 可能会导致后验预测效果不佳。这一方面是由训练与预测时输入特征不一致所造成的, 即在训练时采用DNS数据作为输入特征, 而在后验预测时, 采用RANS结果作为输入特征。另一方面是由于RANS模型算子存在病态性问题, 对于雷诺数较大的流动, 很小的雷诺应力误差也可能导致较大的速度预测误差<sup>[43]</sup>。鉴于此, 需要采用速度等间接数据, 在训练神经网络时引入RANS求解器, 以保证预测环境和训练环境的一致性。这类训练方式也被称为模型兼容性训练<sup>[44]</sup>。

模型兼容性训练需要估计出RANS预测到神经网络权重的梯度。根据链式法则, 这种梯度可以分为两部分, 即  $\frac{\partial J}{\partial w} = \frac{\partial J}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial w}$ , 其中  $\frac{\partial J}{\partial \tau}$  通常采用伴随方法估计, 另一部分  $\frac{\partial \tau}{\partial w}$  可以采用神经网络的误差反传算法得到。许多学者<sup>[45-46]</sup>

基于伴随方法开展了模型兼容性训练。但这种方法需要开发伴随方程的求解器, 对于CFD代码的维护是十分困难的。

集合方法作为一种基于梯度估计的统计推断方法, 也能够用于机器学习建模问题, 且不需要开发伴随求解器。Kovachki和Stuart<sup>[47]</sup>研究了集合卡尔曼方法用于解决回归、分类等机器学习问题的可行性。Schneider等<sup>[48]</sup>进一步采用集合卡尔曼方法开展了随机封闭问题的建模研究。最近该方法也被用于进行模型兼容性的湍流建模<sup>[49]</sup>。其主要流程如图6所示, 首先采用神经网络表征雷诺应力, 然后将构造的雷诺应力场通过求解雷诺平均方程传播到速度场, 最后通过结合预测的速度场和观测数据, 基于集合卡尔曼方法, 更新神经网络的权重。接下来主要介绍集合卡尔曼方法在神经网络湍流建模方面的最新工作。值得注意的是, 数据驱动方法存在对数据的固有

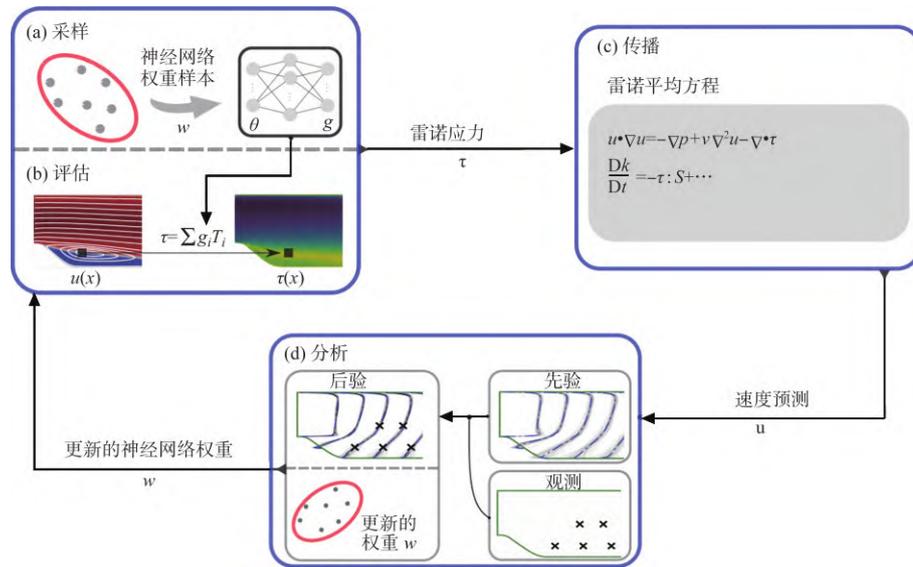


图6 基于集合方法的模型兼容性湍流建模流程<sup>[49]</sup>

Fig. 6 Schematic of ensemble methods for model-consistent turbulence modelling<sup>[49]</sup>

依赖性，因而在不同工况下训练得到的模型形式可能不唯一。鉴于此，后续工作中需要联合多种工况的观测数据进行多目标训练。

Michelen–Strofer 等<sup>[50]</sup>首先尝试采用集合梯度来训练湍流模型。他们提出了三种不同的集合梯度估计方式：(1) 直接采用集合梯度；(2) 采用预处理后的集合梯度；(3) 采用投影到样本子空间的集合梯度，见表1。直接法由于要求不满秩矩阵的广义逆矩阵，因而具有很强的病态性。预处理和投影法可以将低阶估计的梯度信息投影到样本的子空间里，以减缓病态性。针对槽道流动，他们对比了这三种集合梯度和基于伴随方法的梯度估计结果，如图7所示。结果表明，直接法得到的梯度有明显的误差，而预处理和投影法得到的集合梯度均和基于伴随方法的梯度结果基本吻合，且不需要开发伴随方程的求解器。但相较集合卡尔曼方法，这些集合梯度方法由于没有引入Hessian矩阵，训练效率不高，收敛速度较慢，因而难以得到比较准确的雷诺应力预测。

表1 三种集合梯度估计方法

Table 1 Three ensemble-based methods for gradient approximation

方法	$\partial J / \partial \tau$
直接法	$(\Delta U \Delta \tau^{-1})^T R^{-1} (\mathcal{H}[\tau] - y)$
预处理	$P(\Delta U \Delta \tau^{-1})^T R^{-1} (\mathcal{H}[\tau] - y)$
投影法	$((\Delta \tau^T \Delta \tau + \lambda I)^{-1} \Delta \tau^T)^T (\Delta U^T R^{-1} (\mathcal{H}[\tau] - y))$

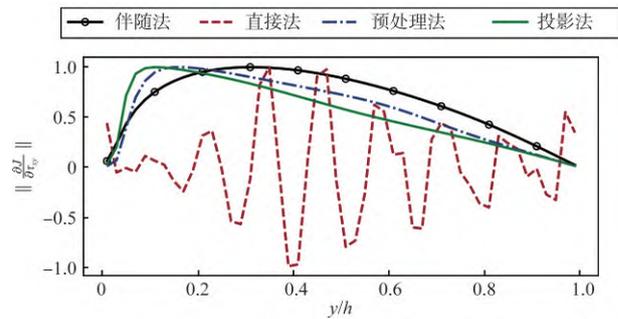


图7 不同集合梯度方法和伴随方法估计梯度信息的比较<sup>[50]</sup>

Fig.7 Comparison between three different ensemble-based gradients and adjoint-based gradient<sup>[50]</sup>

Zhang 等<sup>[49]</sup>进一步采用集合卡尔曼方法，进行模型兼容性的机器学习湍流建模。不仅采用集合梯度代替了伴随梯度，还利用低阶估计的Hessian矩阵提升训练效率。此外，在更新格式中，引入了自适应步长，进一步加速收敛速度，并增强了方法的鲁棒性。比较了集合方法和伴随方法训练湍流模型的效果，结果表明，集合方法不仅可以达到与伴随方法相当的训练精度，而且由于采用了二阶优化算法，具有更快的训练效率。而与直接用雷诺应力数据训练得到的模型对比，集合方法能够得到更加鲁棒的湍流模型形式。如图8所示，集合卡尔曼方法训练得到的湍流模型，被用于预测不同坡度 $\alpha$ 的周期山状流动，均能得到和经典湍流模型相比更为精确的预测结果。此外，他们将集合卡尔曼方法训练得到的湍流模型，用于跨声速ONERA M6机翼绕流的流场预测。图9

给出了训练模型与微分雷诺应力模型 (RSM) 和  $k-\omega$  SST 模型预测结果的比较。由图9可见, 训练得到的湍流模型预测压力系数分布较 SST 模型更贴近试验值和 RSM 预测结果。这表明, 训练得到的湍流模型能够显著提高预测准确性。集合卡尔曼方法在复杂工程流动的湍流建模中具有良好的应用前景。

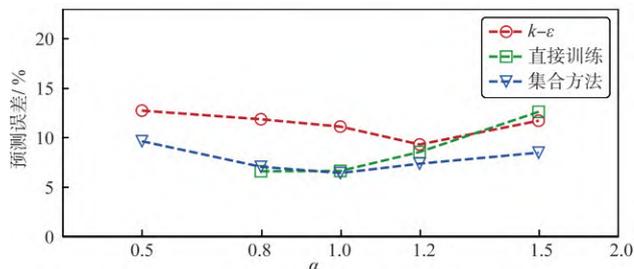


图8 集合卡尔曼方法、直接训练方法和  $k-\epsilon$  模型预测精度比较<sup>[49]</sup>

Fig.8 Comparison between the ensemble-based learned model, the direct learned model with Reynolds stress data, and  $k-\epsilon$  model in prediction errors<sup>[49]</sup>

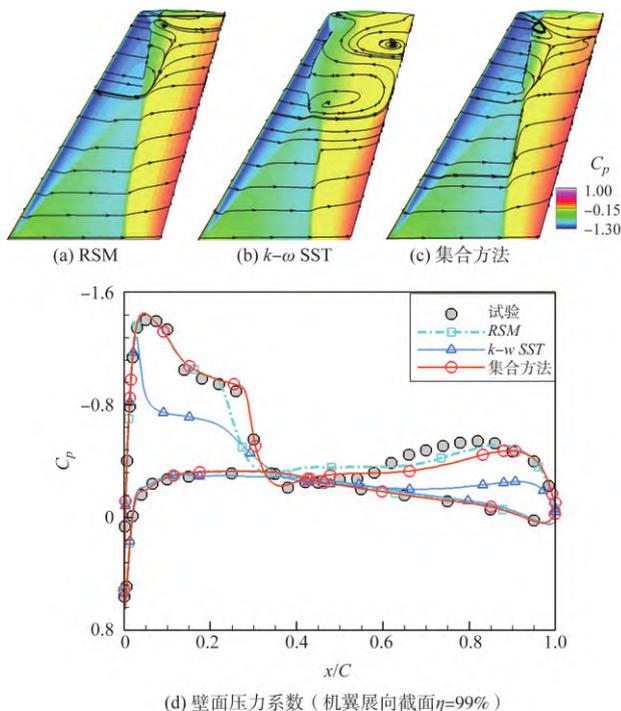


图9 微分雷诺应力模型(RSM)、集合卡尔曼方法,以及  $k-\omega$  SST 模型预测 ONERA M6 机翼表面压力系数分布情况的比较( $Ma=0.84, \alpha=5.06^\circ, Re_{MAC}=1.17 \times 10^7$ )

Fig.9 Comparison between the differential Reynolds stress model (RSM), the ensemble-based learned model, and  $k-\omega$  SST model in prediction of the pressure distribution for flows around ONERA M6 wings ( $Ma=0.84, \alpha=5.06^\circ, Re_{MAC}=1.17 \times 10^7$ )

### 3 结束语

本文简要介绍了集合卡尔曼方法的最新发展及其在湍流建模中的应用。集合卡尔曼方法是一种基于蒙特卡罗采样的数据驱动方法。一方面, 该方法基于贝叶斯原理能够量化模型的参数和结构不确定性; 另一方面, 它可以利用低阶估计的梯度和 Hessian 矩阵, 高效求解反演问题, 并避免伴随求解器的开发。最近发展的正则集合卡尔曼方法, 进一步突破了集合方法无法施加广义约束的局限, 通过引入各种物理约束提升了反演准确性, 有望成为具有竞争力的反问题求解方法。

集合卡尔曼方法已被用于不同的湍流模型相关问题, 包括湍流参数估计和湍流场反演。最近这种方法也被用于机器学习湍流建模, 训练基于神经网络的湍流模型。该方法能够驾驭高维问题和稀疏含噪数据, 在复杂工程流动的建模领域有着广阔的应用前景。

### 附录 开源代码 DAFI

集合卡尔曼方法作为一种常用的数据同化方法, 已经被集成在许多开源数据同化代码中, 如 DART<sup>[51]</sup>、OpenDA<sup>[52]</sup>。然而这些通用数据同化代码, 难以直接应用于湍流建模这类高维度反演问题。因此, 针对湍流建模问题, 弗吉尼亚理工大学的 Heng Xiao 教授课题组开发了 DAFI (data assimilation and field inversion) 代码<sup>[53]</sup>。本文第一作者是该代码的主要开发人员, 并负责代码目前的维护工作。DAFI 代码的主要特色是针对湍流问题的高维特性, 引入了基于随机场的模态分解方法, 并具备考虑非结构化网格的能力。因此, 对于湍流模型问题, 该代码较其他通用数据同化代码更具专业性和易用性。

DAFI 代码主要分为两部分: 一部分是基于集合方法的逆向建模模块, 另一部分是用户自定义的物理模型模块。逆向建模模块中, DAFI 集成了包括集合卡尔曼方法和正则集合卡尔曼方法在内的多种常用数据同化方法。在物理模型模块中, 用户可以方便地自定义所需研究的物理系统。集合方法在 DAFI 中的实现主要由两个循环组成, 即一个时间推进的外循环和一个伪时间推进的内循环。这种结构可以囊括比较常用的集合方法, 并同时应对非定常问题和定常问题。在通用类中实现了检查收敛性和保存中间结果等其他基本功能。

此外,针对湍流建模问题,该代码集成了基于Kar-hunen-Loeve (KL)展开的降阶模块和神经网络模块,以表征高维的湍流场。针对比较常用的OpenFOAM<sup>[54]</sup>求解器,代码中加入了文件交互模块,以方便与求解器进行耦合。

## 参考文献

- [1] Slotnick J, Khodadoust A, Alonso J, et al. CFD vision 2030 study: A path to revolutionary computational aerosciences[R]. NASA/CR-2014-218178, 2014.
- [2] Duraisamy K, Iaccarino G, Xiao H. Turbulence modeling in the age of data[J]. Annual Review of Fluid Mechanics, 2019, 51: 357-377.
- [3] Iglesias M A, Law K J H, Stuart A M. Ensemble Kalman methods for inverse problems[J]. Inverse Problems, 2013, 29(4): 45001.
- [4] Xiao H, Wu J, Wang J, et al. Quantifying and reducing model-form uncertainties in Reynolds-averaged Navier-Stokes simulations: A data-driven, physics-informed Bayesian approach[J]. Journal of Computational Physics, 2016, 324: 115-136.
- [5] Labahn J W, Wu H, Harris S R, et al. Ensemble Kalman filter for assimilating experimental data into large-eddy simulations of turbulent flows[J]. Flow, Turbulence and Combustion, 2020, 104: 861-893.
- [6] Mons V, Chassaing J C, Gomez T, et al. Reconstruction of unsteady viscous flows using data assimilation schemes[J]. Journal of Computational Physics, 2016, 316: 255-280.
- [7] Gao H, Wang J. A bi-fidelity ensemble Kalman method for PDE-constrained inverse problems in computational mechanics [J]. Computational Mechanics, 2021, 67(4): 1115-1131.
- [8] Tang H, Wang J, Weiss R, et al. TSUFLIND-EnKF: Inversion of tsunami flow depth and flow speed from deposits with quantified uncertainties[J]. Marine Geology, 2018, 396: 16-25.
- [9] Zhang X, Xiao H, Wu T, et al. Acoustic inversion for uncertainty reduction in reynolds-averaged Navier-Stokes-based jet noise prediction[J]. AIAA Journal, 2022, 60(4): 2407-2422.
- [10] Xiao H, Cinnella P. Quantification of model uncertainty in RANS simulations: A review[J]. Progress in Aerospace Sciences, 2019, 108: 1-31.
- [11] Evensen G. Analysis of iterative ensemble smoothers for solving inverse problems[J]. Computational Geosciences, 2018, 22 (3): 885-908.
- [12] Evensen G. The ensemble Kalman filter: Theoretical formulation and practical implementation[J]. Ocean Dynamics, 2003, 53 (4): 343-367.
- [13] Gu Y, Oliver D S. An iterative ensemble Kalman filter for multiphase fluid flow data assimilation[J]. SPE Journal, 2007, 12 (4): 438-446.
- [14] Chen Y, Oliver D S. Ensemble randomized maximum likelihood method as an iterative ensemble smoother[J]. Mathematical Geosciences, 2021, 44 (1): 1-26.
- [15] Emerick A A, Reynolds A C. History matching time-lapse seismic data using the ensemble Kalman filter with multiple data assimilations[J]. Computational Geosciences, 2012, 16(3): 639-659.
- [16] Liu C, Xiao Q, Wang B. An ensemble-based four-dimensional variational data assimilation scheme. Part I: Technical formulation and preliminary test[J]. Monthly Weather Review, 2008, 136(9): 3363-3373.
- [17] Zhang X, Xiao H, Gomez T, et al. Evaluation of ensemble methods for quantifying uncertainties in steady-state CFD applications with small ensemble sizes[J]. Computers & Fluids, 2020, 15: 104530.
- [18] Burgers G, Leeuwen P J V, Evensen G. Analysis scheme in the ensemble Kalman filter[J]. Monthly Weather Review, 1998, 126(6): 1719-1724.
- [19] Evensen G. Sequential data assimilation with a nonlinear quasi-geostrophic model using Monte Carlo methods to forecast error statistics[J]. Journal of Geophysical Research: Oceans, 1994, 99(C5): 10143-10162.
- [20] Anderson J L. Localization and sampling error correction in ensemble Kalman filter data assimilation[J]. Monthly Weather Review, 2012, 140(7): 2359-2371.
- [21] Houtekamer P L, Herschel L M. A sequential ensemble Kalman filter for atmospheric data assimilation[J]. Monthly Weather Review, 2001, 129(1): 123-137.
- [22] Anderson J L. An adaptive covariance inflation error correction algorithm for ensemble filters[J]. Tellus A: Dynamic Meteorology and Oceanography, 2007, 59(2): 210-224.
- [23] Colburn C H, Cessna J B, Bewley T R. State estimation in

- wall-bounded flow systems. Part 3: The ensemble Kalman filter [J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2011, 682: 289-303.
- [24] Zhang X, Michelen-Strofer C A, Xiao H. Regularized ensemble Kalman methods for inverse problems[J]. *Journal of Computational Physics*, 2020, 416: 109517.
- [25] Ray J, Lefantzi S, Arunajatesan S, et al. Bayesian parameter estimation of a  $k-\varepsilon$  model for accurate jet-in-crossflow simulations[J]. *AIAA Journal*, 2016, 54(8): 2432-2448.
- [26] Edeling W N, Cinnella P, Dwight R P. Predictive RANS simulations via Bayesian model-scenario averaging[J]. *Journal of Computational Physics*, 2014, 275: 65-91.
- [27] Kato H, Shigeru O. Approach for uncertainty of turbulence modeling based on data assimilation technique[J]. *Computers & Fluids*, 2013, 85: 2-7.
- [28] Spalart P R, Allmaras S R. A one-equation turbulence model for aerodynamic flows[R]. *AIAA Paper*, 1992.
- [29] Kato H, Yoshizawa A, Ueno G, et al. A data assimilation methodology for reconstructing turbulent flows around aircraft[J]. *Journal of Computational Physics*, 2015, 283:559-581.
- [30] Deng Z, He C, Wen X, et al. Recovering turbulent flow field from local quantity measurement: Turbulence modeling using ensemble-Kalman-filter-based data assimilation[J]. *Journal of Visualization*, 2018, 21(6):1043-1063.
- [31] Yang M, Xiao Z. Parameter uncertainty quantification for a four-equation transition model using a data assimilation approach[J]. *Renewable Energy*, 2020, 158:215-226.
- [32] Singh A P, Duraisamy K. Using field inversion to quantify functional errors in turbulence closures[J]. *Physics of Fluids*, 2016, 28(4): 45110.
- [33] Yang M, Xiao Z. Improving the  $k-\omega-\gamma$ -Ar transition model by the field inversion and machine learning framework[J]. *Physics of Fluids*, 2020, 32 (6): 64101.
- [34] Zhang X, Gomez T, Coutier-Delgosha O. Bayesian optimisation of RANS simulation with ensemble-based variational method in convergent-divergent channel[J]. *Journal of Turbulence*, 2019, 20(3): 214-239.
- [35] Dow E, Wang Q. Quantification of structural uncertainties in the  $k-\omega$  turbulence model[C]//52nd AIAA/ASME/ASCE/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics And Materials Conference/19th AIAA/ASME/AHS Adaptive Structures Conference, 2011:1-12.
- [36] Zhang X, Xiao H, He G. Assessment of regularized ensemble Kalman method for inversion of turbulence quantity fields[J]. *AIAA Journal*, 2022, 60(1): 3-13.
- [37] Zhang X, Xiao H, He G, et al. Assimilation of disparate data for enhanced reconstruction of turbulent mean flows[J]. *Computers & Fluids*, 2021, 224: 104962.
- [38] Langtry R B, Menter F R. Correlation-based transition modeling for unstructured parallelized computational fluid dynamics codes[J]. *AIAA Journal*, 2009, 47(12): 2894-2906.
- [39] He G, Jin G, Yang Y. Space-time correlations and dynamic coupling in turbulent flows [J]. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 2017, 49: 51-70.
- [40] Tam C K, Auriault L. Jet mixing noise from fine-scale turbulence[J]. *AIAA Journal*, 1999, 37(2): 145-153.
- [41] Pope S B. A more general effective-viscosity hypothesis[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 1975, 72 (2): 331-340.
- [42] Ling J, Kurzwski A, Templeton J. Reynolds averaged turbulence modelling using deep neural networks with embedded invariance[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2016, 807: 155-166.
- [43] Wu J, Xiao H, Sun R, et al. Reynolds-averaged Navier-Stokes equations with explicit data-driven Reynolds stress closure can be ill-conditioned[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2019, 869: 553-586.
- [44] Duraisamy K. Perspectives on machine learning-augmented Reynolds-averaged and large eddy simulation models of turbulence[J]. *Physical Review Fluids*, 2021, 6 (5): 50504.
- [45] Michelen-Strofer C A, Xiao Heng. End-to-end differentiable learning of turbulence models from indirect observations[J]. *Theoretical and Applied Mechanics Letters*, 2021, 11(4): 100280.
- [46] Holland J R, Baeder J D, Duraisamy K. Field inversion and machine learning with embedded neural networks: Physics-consistent neural network training[C]//AIAA Aviation 2019 Forum, 2019.
- [47] Kovachki N B, Stuart A M. Ensemble Kalman inversion: A derivative-free technique for machine learning tasks[J]. *Inverse Problems*, 2019, 35 (9):95005.
- [48] Schneider T, Stuart A M, Wu J. Ensemble Kalman inversion for sparse learning of dynamical systems from time-averaged data[J]. *Journal of Computational Physics*, 2022, 470: 111559.

- [49] Zhang X, Xiao H, Luo X, et al. Ensemble Kalman method for learning turbulence models from indirect observation data[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2022, 949: A26.
- [50] Michelen-Strofer C A, Zhang X, Xiao H. Ensemble gradient for learning turbulence models from indirect observations[J]. *Communications in Computational Physics*, 2021, 30 (5): 1269-1289.
- [51] Anderson J, Hoar T, Raeder K, et al. The data assimilation research testbed: A community facility[J]. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 2009, 90 (9): 1283-1296.
- [52] Verlaan M, Velzen N V, Hummel S, et al. OpenDA, a generic toolbox for data assimilation in numerical modelling[C]// 15th Biennial Conference of the Joint Numerical Sea Modelling Group, Delft, the Netherlands, 2010.
- [53] Michelen-Strofer C A, Zhang X, Xiao H. DAFI: An open-source framework for ensemble-based data assimilation and field inversion[J]. *Communications in Computational Physics*, 2021, 29 (5): 1583-1622.
- [54] The open FOAM foundation [Z]. 2021 OpenFOAM User Guide, 2021.

## Ensemble Kalman Method and Its Applications in Turbulence Modelling

Zhang Xinlei<sup>1,2</sup>, Liu Yi<sup>1,2</sup>, He Guowei<sup>1,2</sup>

1.LNM, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

2.School of Engineering Sciences, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

**Abstract:** Reynolds-averaged Navier-Stokes (RANS) method is widely used in engineering applications including aerospace and underwater equipment. However, the inadequacy of turbulence models used in the RANS method often leads to significant prediction uncertainties. In recent years, data-driven methods have gradually become a powerful tool for constructing high-fidelity turbulence models. The ensemble Kalman method is one of the data-driven methods based on Bayes' theorem, which can combine physical models and sparse observation to improve predictive accuracy. This method has recently been used for reducing model uncertainty and constructing neural-network-based turbulence models. This paper mainly introduces the development and application of the ensemble Kalman method in turbulence closure problems, including the classical ensemble Kalman method, the regularized ensemble Kalman method, and the recent progress of applying these methods in field inversion and turbulence modelling.

**Key Words:** turbulence modelling; ensemble Kalman method; machine learning; data assimilation; uncertainty quantification