

Суррогатная модель смешения неизотермических потоков на основе результатов трехмерного численного моделирования

© С.В. Минин¹, А.П. Королева¹, Ю.А. Шевченко^{1,2},
А.О. Шлыкова¹

¹Научно-технологический университет «Сириус»,
федеральная территория «Сириус», 354349, Россия
²ИПМ ДВО РАН, Владивосток, 690041, Россия

Применение классических подходов к моделированию сложных процессов движения жидкостей в технических системах сопровождается значительными вычислительными затратами, что ограничивает их использование в задачах оптимизации и многократных параметрических расчетов. Одним из эффективных инструментов снижения вычислительной сложности при решении задач является суррогатное моделирование. В данной работе предложена методика построения суррогатных моделей сложных гидродинамических процессов на основе данных численного моделирования. В качестве исследуемого объекта рассмотрен тройниковый узел смешения неизотермических потоков. Для аппроксимации использована нейронная сеть с радиально-базисными функциями (RBF). Обучающая выборка сформирована на основе результатов трехмерного численного моделирования в отечественном программном комплексе «Логос», подтвержденных экспериментальными данными. Проведён анализ влияния гиперпараметров RBF-модели и объёма исходной выборки на точность предсказаний. Сопоставление результатов суррогатного и численного моделирования показало высокую степень соответствия (средняя абсолютная ошибка менее 5% для скорости и для температуры), что подтверждает эффективность предложенной методики. Полученные результаты демонстрируют перспективность её применения для ускорения инженерных расчётов и возможность интеграции в отечественные программные комплексы системного 1D моделирования, что особенно актуально в контексте развития технологий цифровых двойников и импортонезависимых инженерных решений.

Ключевые слова: математическое моделирование, суррогатная модель, нейронные сети, неизотермическое смешивание потоков

Введение. В настоящее время, благодаря развитию многопроцессорных вычислительных систем, CFD-коды находят всё более широкое применение для решения различных практических задач энергетики, включая анализ течений теплоносителя в оборудовании реакторных установок [1]. CFD-методы представляют собой универсальный подход к моделированию течений теплоносителя и позволяют получать детальную информацию о параметрах потока в любой момент времени для объектов произвольной геометрии.

Несмотря на свои преимущества, данные методы требуют значительных вычислительных и временных ресурсов. Это оправдано при анализе отдельных характеристик в специфических режимах работы, например, аварийных [2]. Однако в большинстве инженерных задач необходим более «легковесный» подход, способный эффективно моделировать и оптимизировать работу энергетического оборудования. Широко распространенные одномерные теплогидравлические коды не обеспечивают достаточную точность при оценке всех необходимых характеристик оборудования, а также не позволяют учесть влияние существенно трехмерных эффектов, кавитации и других явлений [3]. Одним из направлений решения данной проблемы является суррогатное моделирование, основанное на аппроксимации результатов численных и/или экспериментальных исследований с помощью моделей меньшей вычислительной сложности [4]. Суррогатные модели применяются для оптимизации параметров, анализа чувствительности, прогнозирования рисков отказа и построения цифровых двойников технических систем [5,6]. Процесс разработки таких моделей обычно включает формирование обучающей выборки (на основе экспериментальных или численных данных), предварительную обработку информации и выбор аппроксимирующего алгоритма, который может представлять собой полиномиальные регрессии, гауссовские процессы, нейронные сети и др. [4,7]. Суррогатные модели применяются в аэродинамике, теплотехнике, гидрогазодинамике и смежных областях для ускорения расчётов и снижения ресурсоёмкости анализа [8 – 14]. Однако задачи неизотермического смешения потоков в тройниковых соединениях трубопроводов (ТСТ) до настоящего времени слабо представлены в литературе в контексте суррогатного моделирования, несмотря на их инженерную значимость. Такие потоки характеризуются интенсивным турбулентным перемешиванием и пульсациями температуры, что может вызывать термоциклические нагрузки на элементы конструкции и снижать их ресурс. Натурные эксперименты в ТСТ дороги, а трёхмерные расчёты в составе технических систем — ресурсоёмки. Поэтому использование суррогатных моделей, обученных на результатах трехмерного численного моделирования, представляется естественным компромиссом. Таким образом, разработка воспроизводимой методики построения суррогатной модели для такого класса задач (смешение неизотермических потоков) на основании данных трехмерного численного моделирования является актуальной задачей.

Цель настоящей работы заключается в разработке и апробации методики построения суррогатной модели узла смешения неизотермических потоков на основе синтетических данных, полученных с использованием отечественного программного комплекса «Логос». В

качестве аппроксимирующего алгоритма использована нейронная сеть с радиально-базисными функциями, что обеспечивает высокую точность при сравнительно небольшом объеме обучающей выборки и позволяет учитывать нелинейные эффекты, характерные для турбулентного смешения. Дополнительно выполнен анализ влияния объема исходных данных на качество предсказаний, что позволило определить оптимальные условия её построения. Корректность исходных данных подтверждена сопоставлением с результатами экспериментов.

Методика разработки суррогатной модели смешения неизотермических потоков. Разработка суррогатной модели осуществляется в несколько этапов (рис. 1). Основная идея заключается в использовании данных высокоточных численных расчётов для обучения аппроксимирующей модели, способной воспроизводить ключевые характеристики процесса неизотермического смешения при существенно меньших вычислительных затратах.

Этап 1. Формирование базы данных на основании результатов численного моделирования. Этап включает в себя:

- определение исследуемого диапазона параметров;
- создание вычислительной модели;
- проведение серии расчетов в отечественном программном комплексе «Логос»;
- получение из результатов моделирования распределений скорости и температуры для заданных комбинаций входных параметров;
- валидация/верификация результатов.

Этап 2. Подготовка данных:

- обработка результатов численного моделирования;
- формирование обучающей и тестовой выборок.

Этап 3. Построение суррогатной модели:

- выбор аппроксимирующего алгоритма;
- определение диапазонов гиперпараметров для настройки суррогатной модели;
- обучение суррогатной модели, подбор оптимальных гиперпараметров в зависимости от выбранной метрики погрешности.

Этап 4. Валидация и итеративное улучшение:

- сравнение предсказаний суррогатной модели с эталонными результатами для тестовой выборки;
- при неудовлетворительных результатах (ниже порогового значения метрик) – возврат к этапам 1 – 3: корректировка гиперпараметров, расширение обучающей базы или уточнение расчетных данных.

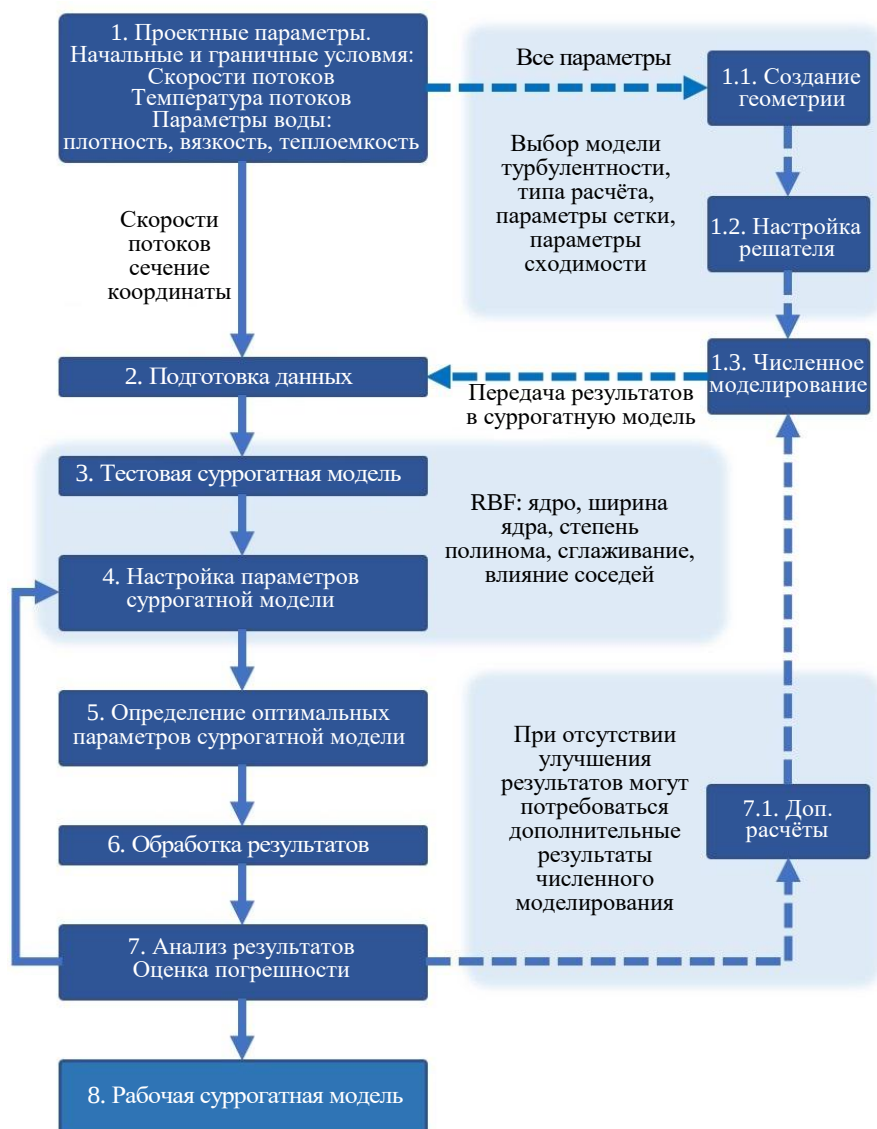


Рис. 1. Схема разработки суррогатной модели

Постановка задачи. Объектом исследования является процесс неизотермического смешения потоков в ТСТ, которое является типовым элементом энергетических и теплотехнических систем. Этот процесс характеризуется интенсивным турбулентным перемешиванием и формированием сложных пространственных температурных и скоростных полей, определяющих уровень термических нагрузок на элементы конструкции.

Для анализа рассматриваемого процесса в настоящей работе используется модель ТСТ, геометрия расчетной области которого представлена на рис. 2. ТСТ включает магистральную трубу диаметром $D_m = 150$ мм и патрубок диаметром $D_b = 50$ мм, присоединенный

под углом 90°. Для исключения влияния неразвитого профиля скорости до зоны смешения длина входных участков составляет $60D_m$ и $60D_b$ для магистральной трубы и патрубка соответственно. Длина выходного участка за местом слияния потоков составляет $12D_m$, что необходимо для разрешения зоны рециркуляции потока и невихревого характера затекания потока в выходную границу (Outlet).

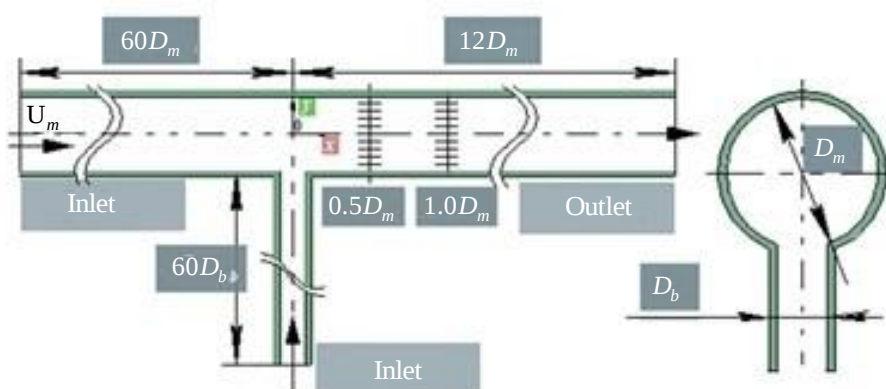


Рис. 2. Схема расчётной области

На входе в расчетную область (Inlet) скорость в магистральной трубе U_m изменяется в диапазоне от 0.1 м/с до 4 м/с, в патрубке V_b — 0.5 м/с до 2.5 м/с. Температура потока на входе в магистральную трубу T_m принимается 321,15 К, в патрубок T_b — 306,15 К. Рабочее тело — вода, теплофизические свойства зависят от температуры потока. Для каждого сочетания входных условий, в контрольных сечениях расположенных на расстоянии $0.5 D_m$, $1.0 D_m$ за узлом смешения, определяются распределения безразмерной скорости $V^* = U / U_m$ и безразмерной температуры $T^* = (T - T_m) / (T_m - T_b)$ в контрольных сечениях, где U и T скорость и температура в сечениях, полученная в результате численного моделирования.

Математическая модель. Моделируется трехмерное течение несжимаемой жидкости, описываемое уравнениями Навье-Стокса, осредненными по Рейнольдсу, уравнением энергии и двухпараметрической моделью турбулентности SST Ментера [15], которые имеют вид:

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{U} &= 0, \\ \rho(\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} &= -\nabla p + \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}_m + \boldsymbol{\tau}_t), \\ \rho c_p (\mathbf{U} \cdot \nabla T) &= \nabla \cdot (\nabla T (\lambda_m + \lambda_t)),\end{aligned}$$

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{U} k) = \nabla \cdot [(\mu + \sigma_k \mu_T) \nabla k] + P_k - \beta^* \rho \omega k,$$

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \omega) = \nabla \cdot [(\mu + \sigma_\omega \mu_T) \nabla \omega] + \gamma \frac{\rho}{\mu_T} P_k - \beta \rho \omega^2 + (1 - F_1) \frac{2\rho \sigma_{\omega 2}}{\omega} \nabla k \cdot \nabla \omega.$$

где $\mathbf{U}$ — вектор осредненной скорости, p — осредненное давление; ρ — плотность; τ_m, τ_t — молекулярная и турбулентная составляющие тензора вязких напряжений; λ_m, λ_t — молекулярный и турбулентный коэффициенты теплопроводности; c_p — удельная теплоемкость; T — осреднённая температура, k — кинетическая энергия турбулентности; ω — удельная скорость диссипации; μ_T — турбулентная динамическая вязкость; $\beta^*, \beta, \gamma, \sigma_k, \sigma_\omega, \sigma_{\omega 2}$ — константы моделей для $k-\varepsilon$ и $k-\omega$; F_1 — функция смешения, P_k — генерационный член.

Обобщенная пристеночная функция $All-y^+$ [15] является надстройкой над моделью SST. Этот вариант функции содержит уравнения переноса кинетической энергии турбулентности вплоть до стенки и включает аппроксимацию скорости, предложенную Менте-ром:

$$U_1 = (U_{vis}^{-4} + U_{log}^{-4})^{-1/4}, \quad U_{vis} = u_t y^+, \quad U_{log} = \frac{u_t}{\kappa} \log(E y^+),$$

где y^+ — безразмерное расстояние до стенки; $\kappa = 0.41$ (константа Кармана); $E = 9$.

Для стенок трубопровода задано граничное условие (ГУ) с условием прилипания и непроницаемости для скорости $U = 0$, и вычислительное граничное условие для статического давления $\partial p / \partial y = 0$. В качестве условий для характеристик турбулентности использовалось равенство нулю кинетической энергии турбулентности ($k_t = 0$).

На входах в магистральную трубу и патрубков задано однородное поле скорости U_m и V_b , температуры T_m и T_b , а также параметры турбулентности (турбулентная вязкость $\nu_t = 10\nu$ и интенсивность турбулентности $I_t = 0.1$). Величина y, z — компоненты скорости задавались равной нулю в тангенциальных направлениях, а статическое давление определялось с помощью линейной интерполяции из внутренних точек расчётной области.

На выходе канала использовано ГУ с заданием постоянного статического давления $p = p_0 = 0$ Па. Все остальные переменные определялись путём линейной экстраполяции. Теплофизические свойства среды учитываются как полиномиальные функции температуры.

Численный метод решения задачи. Численное моделирование трёхмерного несжимаемого турбулентного потока жидкости выполнено методом контрольных объёмов. Для численного решения уравнений формируются СЛАУ в соответствии с SIMPLE-подобным алгоритмом [15, 16], в котором поля скорости и давления вычисляются по схеме предиктор-корректор. Конвективные слагаемые скорости и плотности аппроксимируются линейной противопоточной схемы второго порядка точности. Турбулентные параметры и температура аппроксимируются противопоточной схемой первого порядка. Скорость и давление в виде промежуточного значения и поправок подставляются в уравнения движения и неразрывности. Следующим шагом с использованием разностных аналогов уравнений создаётся уравнение Пуассона для поправок давления, решение которого позволяет скорректировать промежуточные значения скорости, чтобы удовлетворить уравнение неразрывности.

Численное решение уравнений Навье-Стокса для SIMPLE-подобных алгоритмов можно представить в виде следующих шагов:

1. Инициализация начальных полей скорости и давления
2. Решение уравнения импульса при фиксированном давлении
3. Введение поправок давления и скорости:

$$U = U^* + U', \quad p = p^* + p',$$

где U^* , p^* — значения скорости и давление на начало итерации; U' , p' — поправки скорости и давления.

4. Вычисление поправок скорости и давления. Решение уравнения Пуассона [16]:

$$\nabla \cdot (d \nabla p') = \nabla \cdot U^*.$$

5. Коррекция давления и скорости

$$U = U^* + \alpha_u U', \quad p = p^* + \alpha_p p',$$

где α_u , α_p — коэффициенты релаксации.

6. Решение уравнений турбулентности и энергии.
7. Проверка сходимостей.
8. Переход к следующей итерации:

$$U \rightarrow U^*, \quad p \rightarrow p^*.$$

Формирование базы данных.

Расчетная сетка.

Построение расчетной сетки осуществляется генератором объемной сетки методом отсечения с использованием предварительно построенной поверхностной треугольной сетки на стенках для гидрав-

лического контура. Получение независимого от сеточного разрешения численного результата оценивается для расчетной области трубного пространства. Сеточные модели A1, A2, A3, A4 (табл. 1 и 2) последовательно сгущаются с уменьшением размера регулярных ячеек как в декартовых направлениях Δx , Δy , Δz , так и в области призматического слоя (суммарная толщина δ_{prism} , количество призматических слоев N_{prism}). Для разрешения вязкого подслоя расчетная сетка сгущается вблизи стенки для всех моделей, в частности, для выполнения условия $\Delta y_1^+ < 1.0$, где

$$\Delta y_1^+ = \Delta y_1 / (\nu / u_\tau)$$

— величина первого пристеночного шага в координатах закона стенки, ν — кинематическая вязкость и u_τ — динамическая скорость трения, сетка измельчается по нормали от стенки. Параметр растяжения призматического слоя не превышает значение:

$$w_y = 1.25, (w_y = \Delta y_n / \Delta y_{n+1}).$$

В осевом направлении гексагональные ячейки также растягиваются от изотропного размера $\Delta x = \Delta y = \Delta z$ с различной скоростью роста для разных моделей, не превышая значение $w_x = 1.035$.

Таблица 1

Параметры сеточных моделей для магистральной трубы

Модель	$D_m / \Delta x$	$\Delta y_n / \Delta y_{n+1}$	δ_{prism} , М	N_{prism}	Количество ячеек, млн
A1(m)	20	1.195	0.0125	36	1.06
A2(m)	30	1.195	0.0150	36	1.72
A3(m)	38	1.195	0.0170	36	2.43
A4(m)	50	1.195	0.016	36	3.61

Таблица 2

Параметры сеточных моделей для магистральной трубы

Модель	$D_m / \Delta x$	$\Delta y_n / \Delta y_{n+1}$	δ_{prism} , М	N_{prism}
A1(b)	14	1.17	0.006	36
A2(b)	20	1.17	0.006	36
A3(b)	25	1.17	0.006	36
A4(b)	35	1.17	0.006	36

Сравнение результатов на последовательных сетках (рис. 3) показало достижение независимости решения от дискретизации, начиная с сетки A3.

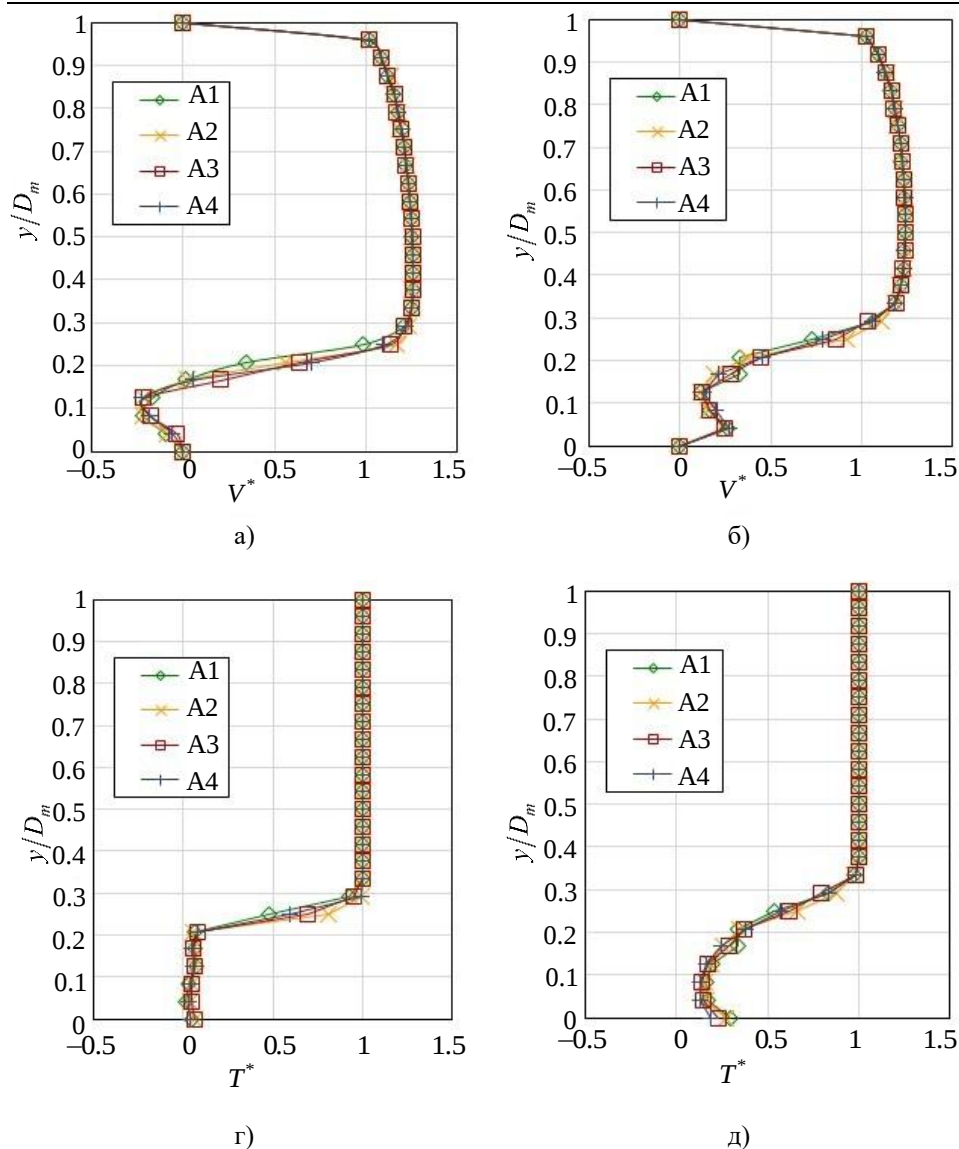


Рис. 3. Результаты безразмерных температур и скорости от параметров сетки:
а), б) – сечение 0.5D; в), г) – сечение 1D

На рис. 4 представлено плоское сечение фрагмента расчетной сетки A3, которая используется для расчетов.

ЛОГОС

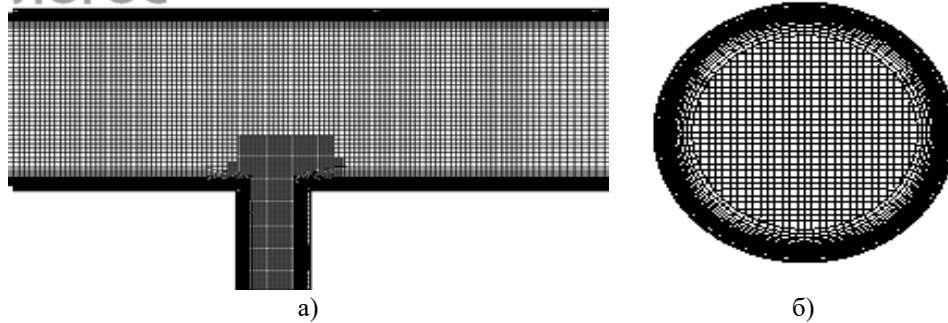


Рис. 4. Плоское сечение расчетной сетки А3:
а) – в плоскости XY; б) – в плоскости YZ

Валидация результатов.

Сравнение результатов расчета безразмерных профилей скорости (рис. 5) и температуры (рис. 6) осуществляется с экспериментальными данными, представленными в работе [17].

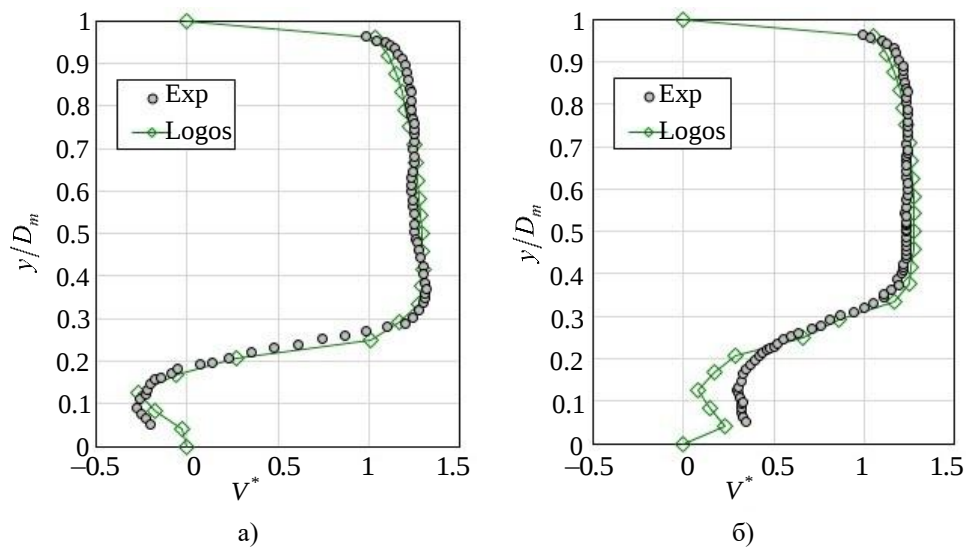


Рис. 5. Безразмерные профили скорости на расстоянии $D_m = 0.5$ (а), $D_m = 1.0$ (б) для режима $U_m = 1$ м/с и $V_b = 0.5$ м/с, где *exp* – данные эксперимента [17], *logos* – результаты расчетов

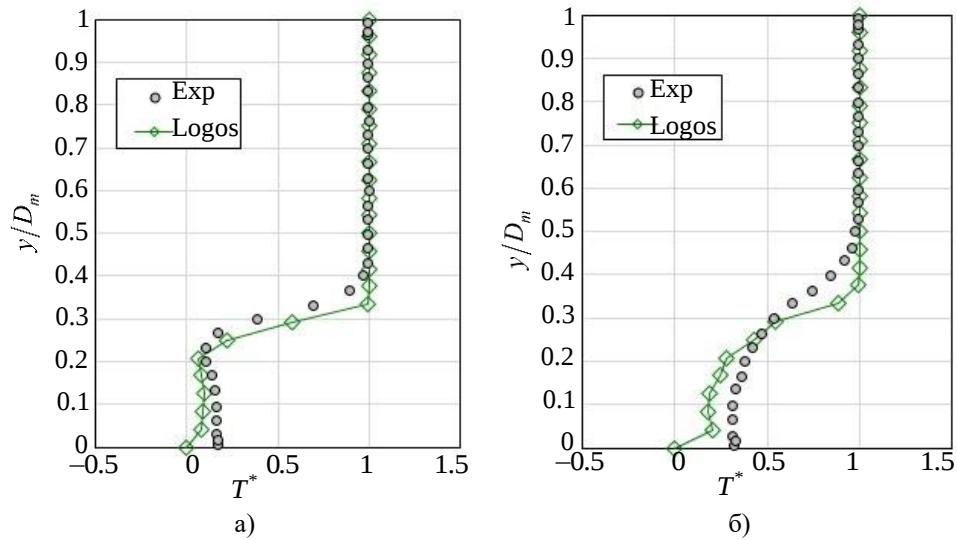


Рис. 6. Безразмерные профили скорости на расстоянии $D_m = 0.5$ (а), $D_m = 1.0$ (б) для режима $U_m = 1$ м/с и $V_b = 0.5$ м/с, где *exp* – данные эксперимента [17], *logos* – результаты расчетов

Суммарная средняя абсолютная погрешность вычисленных значений безразмерных скорости и температуры графика не превышает 5 %.

Подготовка и обработка данных. В результате численного моделирования получено 123 расчетных случая. Эти результаты формируют исходную базу данных, в которой для каждого расчетного случая сопоставлены входные параметры (U_m , V_b , D_m , y_i / D_m) и соответствующие профили безразмерных скорости V^* и температур T^* .

Для корректного обучения суррогатной модели из выборки исключены точки с нулевыми значениями скорости, расположенные в концах профилей. Наличие нулевых значений приводит к искажениям (ухудшает качество аппроксимации и может приводить к формированию бесконечных значений относительной погрешности при последующей валидации).

Объем выборки составил 5658 (123 расчётных случаев, 23 точки на графике, 2 сечения) точек для скорости и 5658 точек для температуры. Для тестирования модели случайным образом выделяется 10 % выборки. Такая организация данных обеспечивает как достаточный объем для обучения, так и репрезентативную тестовую выборку для количественной точности суррогатной модели.

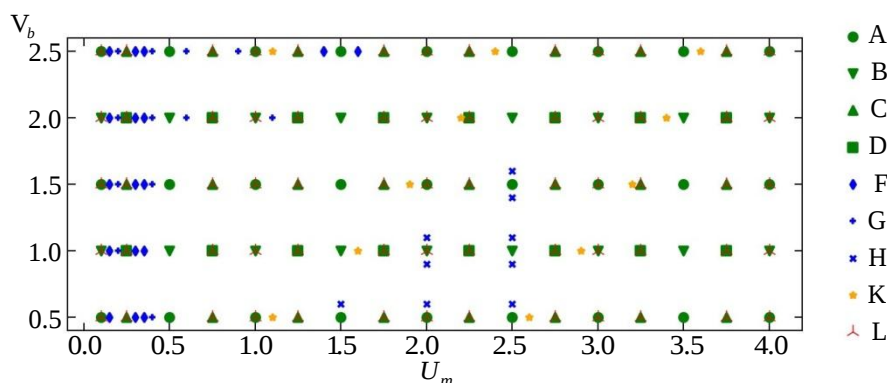


Рис. 6. Безразмерные профили скорости на расстоянии

Для определения оптимального количества обучающих данных формируются различные варианты наборов данных, которые представлены на рисунке 7. Описание выбранных расчётных случаев для обучения представлены в табл. 3. дополнительно был получен контрольный набор данных (К), для оценки суррогатной модели.

Таблица 3

Описание обучающих наборов

Наименование обучающих наборов (точек)	Описание набора данных
27 (1242)	A
45 (2070)	A+B
51 (2346)	A+B+C
65 (2990)	L
85 (3910)	A+B+C+D
102 (4692)	A+B+C+D+F
114 (5224)	A+B+C+D+F+G
123 (5658)	A+B+C+D+F+G+H
11 (506)	K

Данные набора из 85 точек ($A+B+C+D$) распределялись равномерно, без характерных разрывов, чтобы сохранить систематизацию расчётных вариантов. Увеличение количества расчётных точек для диапазона $U_m = 0,5 \div 1$ связано с тем, что полученные графики безразмерных скоростей и температур для этого диапазона имеют значительные отличия от других, что может быть недостаточным для полноценного обучения суррогатной модели.

Суррогатная модель. Для аппроксимации результатов численного моделирования применяется нейронная сеть на основе радиальных базисных функций (RBF). Данный метод выбран благодаря высокой точности при ограниченном объёме обучающих данных и способности корректно воспроизводить локальные нелинейности потоков

[4,9,14]. Также были рассмотрены гауссовские процессы и полиномиальные регрессии, однако они требуют либо значительно большего числа обучающих точек, либо дают худшую сходимость для сильно нелинейных полей. Аппроксимирующая функция имеет вид:

$$f(y; \chi; \xi; h; r; n_{nb}) = \sum_{i \in N(y, n_{nb})} \psi_i \left(h, \left\{ (y_j, f_j) \right\}_{j=1}^N \right) s_{\chi, \xi} (\|y - y_i\|) + P_r(y),$$

где y — координата точки, в которой производится оценка аппроксимации;

$$\left\{ (y_j, f_j) \right\}_{j=1}^N$$

— обучающая выборка (координаты и целевые значения: безразмерная скорость или температура);

$$\psi_i \left(h, \left\{ (y_j, f_j) \right\} \right)$$

— весовые коэффициенты, вычисляемые с учетом сглаживания h и всех обучающих точек; χ — тип ядра, задает форму радиальной функции s ; r — степень полинома $P_r(y)$; n_{nb} — число ближайших точек для локальной аппроксимации;

$$s_{\chi, \xi} (\|y - y_i\|)$$

— радиальная базисная функция выбранного типа с масштабом ξ ; $N(y, n_{nb})$ — множество ближайших n_{nb} центров, включенных в локальную сумму.

Реализация выполнена на языке Python с использованием алгоритма «RBFInterpolator» библиотеки «SciPy». Для поиска оптимальных гиперпараметров использовалась библиотека «Optuna». В таблице 4 приведены оптимальные значения гиперпараметров для решаемой задачи.

Таблица 4

Оптимальные значения гиперпараметров

Гиперпараметр	Диапазон варьирования	Оптимум для U^*	Оптимум для T^*
k	*	Гауссово ядро**	Гауссово ядро
ε	0.01...5	4.9	5
λ	0...1	0.01	0.01
n_{nb}	1...50	7	6

*использованы различные типы ядер: линейное, кубическое, пятого порядка, тонкая пластина мультиквадратичное, обратное мультиквадратичное, обратное квадратичное, гауссово.

$$^{**} \phi_{k,\varepsilon} = \exp\left(-\left(\varepsilon \|y - y_i\|\right)^2\right).$$

Критерием подбора гиперпараметров служила минимизация средней абсолютной ошибки (MAE), средней квадратичной ошибки (MSE) и максимизации коэффициента детерминации (R^2) на тестовой выборке:

$$\begin{aligned} MAE &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |f_i - f_{pi}|, \\ MSE &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (f_i - f_{pi})^2, \\ R^2 &= 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (f_i - f_{pi})^2}{\sum_{i=1}^n \left(f_i - \frac{\sum_{i=1}^n f_i}{n}\right)^2}, \end{aligned}$$

где f_i — фактическое значение в наборе данных; f_{pi} — предсказанное значение в наборе данных; n — количество значений в наборе данных.

Оптимальные значения гиперпараметров отражают специфику неизотермического смешения. Масштаб ядра указывает на необходимость локализованной аппроксимации для корректного воспроизведения сдвиговых слоев и температурных градиентов. Низкое значение параметра сглаживания свидетельствует о том, что исходные расчетные данные достаточно гладкие. Небольшое число соседних точек n_{nb} в оптимальном решении подтверждает полулокальный характер аппроксимации, что позволяет с одной стороны учитывать локальные особенности (резкие изменения скорости и температуры в зонах смешения), а с другой - избегать чрезмерного сглаживания, которое возникло бы при использовании всей выборки сразу

Анализ результатов. Для получения качественных результатов использовалась многокритериальная оптимизация. Определяющим критерием выбора гиперпараметров суррогатной модели является средняя абсолютная процентная ошибка, которая вычисляется после многокритериальной оптимизации на тестовой выборке и на контрольном наборе данных:

$$MAPE = \frac{MAE}{\frac{\sum_{i=1}^n f_i}{n}} \cdot 100\%.$$

В таблице 5 показаны результаты оценок погрешностей для безразмерной скорости.

Таблица 5

Оценка погрешности для безразмерной скорости

Данные	Погрешность			
	MAE	MSE	R ²	MAPE, %
Тестовая выборка	0.0445	0.0068	0.9783	4.85
Контрольный набор	0.0611	0.0229	0.9865	6.22

В таблице 6 показаны результаты оценок погрешностей для безразмерной температуры.

Таблица 6

Оценка погрешности для безразмерной температуры

Данные	Погрешность			
	MAE	MSE	R ²	MAPE, %
Тестовая выборка	0.0225	0.0024	0.9779	3.18
Контрольный набор	0.0304	0.0061	0.9519	4.10

По данным таблиц 5 и 6 видно, что тестовый набор данных показывает среднюю абсолютную погрешность меньше 5 %. Что является приемлемым отклонением для результатов суррогатной модели.

В таблице 7 представлены оценки погрешностей для различных наборов расчётных случаев безразмерной скорости на основе тестовой выборки. Для полученных суррогатных моделей также проводилась многокритериальная оптимизация для нахождения оптимальных значений гиперпараметров и минимизации значений погрешности.

Таблица 7

Оценка погрешности тестовой выборки для различных расчётных случаев с безразмерной скоростью

Количество расчётных случаев (точек)	Погрешность			
	MAE	MSE	R ²	MAPE, %
27 (1242)	0.0499	0.0100	0.9737	5.37
45 (2070)	0.0655	0.0188	0.9803	7.76
51 (2346)	0.0569	0.0115	0.9796	6.19
65 (2990)	0.0601	0.0109	0.9880	6.54
85 (3910)	0.0445	0.0068	0.9865	4.85
102 (4692)	0.0448	0.0073	0.9767	4.87
114 (5224)	0.0473	0.0076	0.9833	5.15
123 (5658)	0.0634	0.0114	0.9876	6.90

В таблице 8 представлены оценки погрешностей для различных наборов расчётных случаев безразмерной скорости на основе контрольного набора.

Таблица 8

Оценка погрешности контрольного набора относительно различных расчётных случаев с безразмерной скоростью

Количество расчётных случаев (точек)	Погрешность			
	MAE	MSE	R ²	MAPE, %
27 (1242)	0.1748	0.0668	0.7867	19.03
45 (2070)	0.0809	0.0212	0.9399	8.81
51 (2346)	0.0820	0.0520	0.9634	8.84
65 (2990)	0.0675	0.0167	0.9653	7.01
85 (3910)	0.0611	0.0229	0.9783	6.22
102 (4692)	0.0865	0.0704	0.9662	8.86
114 (5224)	0.0799	0.0311	0.9759	8.11
123 (5658)	0.0786	0.0211	0.9634	8.08

На рисунках 8 - 11 представлены графики сходимости для погрешностей относительно количества расчётных случаев. Значения погрешности на тестовом наборе данных выравниваются после 85 расчётных случаев, что показывает достаточность использования количества расчётных случаев. Равномерное распределение входных данных (85 расчётных случаев) для обучающей выборки является лучшим вариантом набора для создания суррогатной модели. Контрольный набор данных также показывает достаточное установившееся значение изменения оценки погрешности, за исключением обучения суррогатной модели на 102 расчётных случаев. Это может быть связано со случайным выбором тестовых значений во время обучения суррогатной модели. Для всех вариантов использовался один и тот же аргумент функции выбора тестовых значений ($random_state = 42$). При удалении/добавлении данных формируется новый набор тестовой выборки, которая может повлиять на результаты оценки погрешности, что требует дополнительного исследования. Ухудшение точности на контрольном наборе, после 85 расчётных случаев, может быть связано с увеличением концентрации расчётных точек в диапазоне скоростей $U_m = 0,5 \div 1$. Это могло повлиять на подбор оптимальных гиперпараметров во время обучения суррогатной модели.

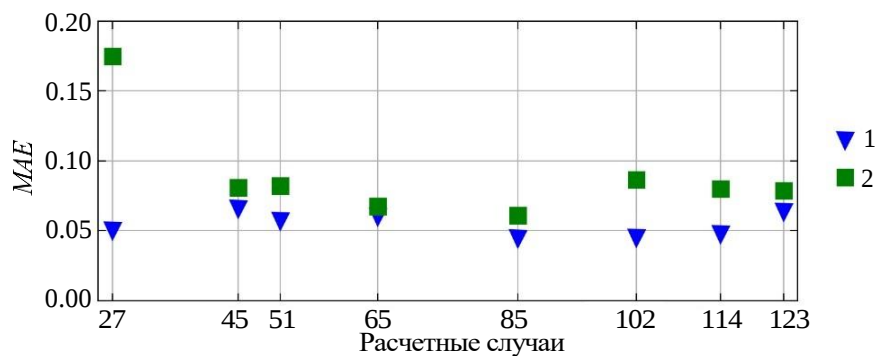


Рис. 8. Средняя абсолютная ошибка, где 1 – тестовая выборка, 2 – контрольный набор

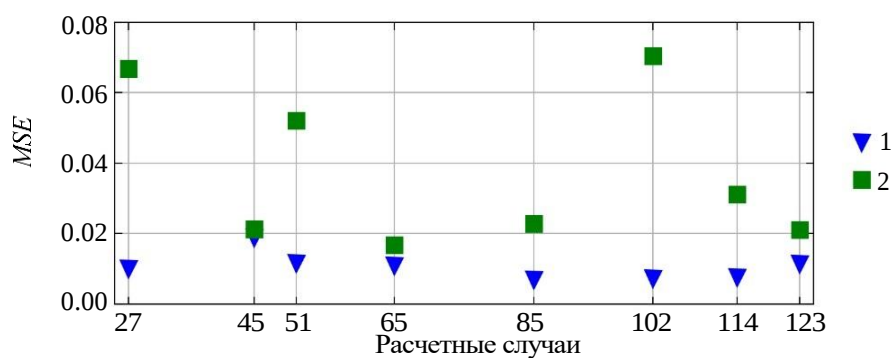


Рис. 9. Средняя квадратичная ошибка, где 1 – тестовая выборка, 2 – контрольный набор



Рис. 10. Коэффициент детерминации, где 1 – тестовая выборка, 2 – контрольный набор

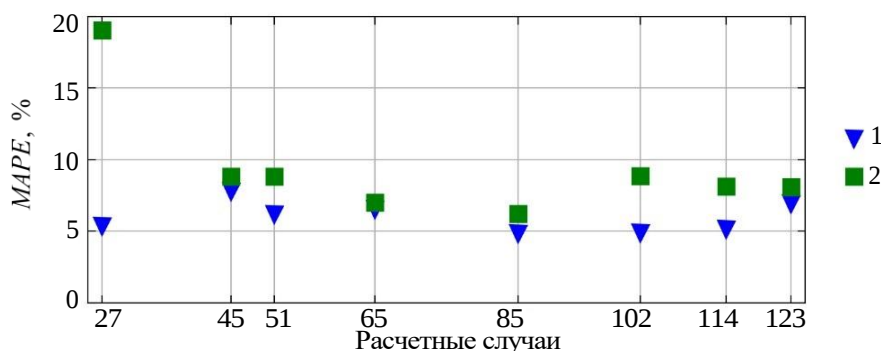


Рис. 11. Средняя абсолютная процентная ошибка, где 1 – тестовая выборка, 2 – контрольный набор

Выводы.

1. В отечественном программном продукте «Логос» выполнено численное моделирование смешения неизотермических потоков в тройниковом соединении. Проведено сравнение полученных результатов с экспериментом, погрешность составляет не более 5 %.

2. Разработана методика построения суррогатной модели неизотермического смешения потоков.

3. Разработанная методика построения суррогатной модели узла смешения неизотермических потоков показала высокую точность ($MAPE < 5\%$). Модель применима в диапазоне скоростей $U_m = 0.1 - 4$ м/с и $V_b = 0.5 - 2.5$ м/с. Предварительное сравнение с полиномиальной регрессией показало худшую сходимость ($MAPE \approx 10\%$), что подтверждает выбор RBF-модели как наиболее эффективного аппроксимирующего инструмента для данной задачи.

4. Проведена оценка влияния объема обучающих данных на точность суррогатной модели: показано, что после 85 равномерно распределенных расчетных случаев дальнейшее увеличение выборки дает лишь незначительное улучшение метрик относительно тестового набора данных. Это позволяет рекомендовать указанный объем данных как достаточный для построения модели для данного класса задач с $MAPE < 5\%$.

Результаты получены при финансовой поддержке, реализуемой в рамках государственной программы федеральной территории «Сириус» «Научно-технологическое развитие федеральной территории «Сириус» (Соглашение №18-03 от 10.09.2024).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Аркадов Г.В., Жукавин А.П., Крошилин А.Е., Паршиков И.А., Соловьев С.Л., Шишов А.В. Виртуально-цифровая АЭС – современный инструмент поддержки жизненного цикла атомных энергоблоков с ВВЭР. *Теплоэнергетика*, 2014, т. 61, № 10. с. 3-11.

- [2] Гололобов С.М., Дружаев А.А., Семенов А.А., Чернаков В.А. Возможности по применению программно-технического комплекса «Виртуально-цифровая АЭС с ВВЭР» для обеспечения безопасности эксплуатации АЭС. *13-й Междунар. науч.-практ. конф. по атомной энергетике «Безопасность, эффективность, ресурс»*. Тезисы доклада на конференции, Севастополь, 3–6 октября 2017, с. 19–20.
- [3] Petruzzi, Alessandro, D'Auria, Francesco. Thermal-hydraulic system codes in nuclear reactor safety and qualification procedures. *Science and Technology of Nuclear Installations*, 2008, art. 460795, p. 16.
- [4] Forrester A.I.J., Sobester A., Keane A.J. *Engineering design via surrogate modelling: A practical guide*. Chichester, Wiley, 2008, 210 p.
- [5] Корнев А.В., Козелков А.С. Применение отечественных суперкомпьютерных технологий для создания перспективных образцов авиационной техники. *Современные информационные технологии и ИТ-образование*, 2021, т. 17, № 2, с. 250–264.
- [6] Jun Yang, Xi Sui, Yanping Huang, Ling Zhao, Minyun Liu, Assessment of reactor flow field prediction based on deep learning and model reduction. *Annals of Nuclear Energy*, 2022, vol. 179, art. 109367.
- [7] Palmi K., Kubinski W., Darnowski P. Prediction of the evolution of the nuclear reactor core parameters using artificial neural network. *Annals of Nuclear Energy*, 2025, vol. 211, art. 110891.
- [8] Коновалов И.А., Соколов А.Н., Баринев А.А., Зырянова Т.К. Разработка методики построения суррогатных моделей оборудования на примере модели гидравлики устройства газоудаления. *Теплоэнергетика*, 2023, № 2, с. 71–77.
- [9] Asouti V., Kontou M., Giannakoglou K. Radial Basis function surrogates for uncertainty quantification and aerodynamic shape optimization under uncertainties. *Fluids*, 2023, vol. 8, № 11, art. 292.
- [10] Gagliardi F., Giannakoglou K.C. A two-step radial basis function-based CFD mesh displacement tool. *Advances in Engineering Software*, 2019, vol. 128, pp. 86–97.
- [11] Roshani G.H., Nazemi E., Shama F., Imani M. Designing a simple radiometric system to predict void fraction percentage independent of flow pattern using radial basis function. *Metrology and Measurement Systems*, 2018, vol. 25, № 2, pp. 347–358.
- [12] Xu K., Wang G., Zhang L., Wang L. Multi-objective optimization of jet pump based on RBF neural network model. *Journal of Marine Science and Engineering*, 2021, vol. 9, № 2, art. 236.
- [13] Yang C., Yang J., Qin Y. Research on comparative of multi-surrogate models to optimize complex truss structures. *KSCE Journal of Civil Engineering*, 2024, vol. 28, № 6, pp. 2268–2278.
- [14] De Gooijer B.M., Havinga J., Geijselaers H. J. M., Van den Boogaard A. H. Radial basis function interpolation of fields resulting from nonlinear simulations. *Engineering with Computers*, 2024, vol. 40, № 1, pp. 129–145.
- [15] Флетчер К. *Вычислительные методы в динамике жидкостей. Т.1. Основные положения и общие методы*. Москва, Мир, 1991, 504 с.
- [16] Patankar, S. V. *Numerical heat transfer and fluid flow*. Washington, Hemisphere, 1980, Chapter 6.4 «The Pressure-Correction Equation», pp. 126–131.
- [17] Igarashi M., Tanaka M., Kawashima S., Kamide H. Experimental study on fluid mixing for evaluation of thermal striping in T-pipe junction. *10th International Conference on Nuclear Engineering: Proceesing*, USA, Arlington, April 14–18, 2002, pp. 383–390.

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:

Минин С.В., Королева А.П., Шевченко Ю.А., Шлыкова А.О. Суррогатная модель смешения неизотермических потоков на основе результатов трехмерного численного моделирования. *Математическое моделирование и численные методы*, 2026, № 2, с. 44–65.

Минин Сергей Витальевич — старший инженер-исследователь, Научно-технологический университет «Сириус». e-mail: minin.sv@talantiuspeh.ru

Королева Анастасия Павловна — канд. техн. наук, руководитель группы, Научно-технологический университет «Сириус». e-mail: koroleva.anp@talantiuspeh.ru

Шевченко Юрий Андреевич — канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник, Научно-технологический университет «Сириус». e-mail: shevchenko.yuriy.a@gmail.com

Шлыкова Ангелина Олеговна — младший научный сотрудник, Научно-технологический университет «Сириус». e-mail: shlykova.ao@talantiuspeh.ru

Surrogate model for non-isothermal flow mixing derived from 3D numerical simulation data

© S.V. Minin¹, A.P. Koroleva¹, Y.A. Shevchenko^{1,2},
A.O. Shlykova¹

¹Sirius University of Science and Technology, Federal territory «Sirius», 354340, Russia

² Institute of Applied Mathematics FEB RAS, Vladivostok, 690041, Russia

Application of classical approaches to modeling complex fluid flow processes in technical systems is associated with significant computational costs, which limits their use in optimization problems and repeated parametric studies. Surrogate modeling is one of the effective tools for reducing computational complexity in solving such problems. This paper proposes a methodology for constructing surrogate models of complex hydrodynamic processes based on numerical simulation data. A tee-junction for mixing non-isothermal flows is considered as the object of study. A Radial Basis Function (RBF) neural network was used for approximation. The training dataset was formed based on the results of three-dimensional numerical modeling performed in the domestic software package "Logos," validated against experimental data. An analysis of the influence of RBF model hyperparameters and the size of the initial dataset on prediction accuracy was conducted. A comparison of the surrogate and numerical simulation results showed a high degree of agreement (mean absolute error less than 5% for both velocity and temperature), confirming the effectiveness of the proposed methodology. The obtained results demonstrate the potential of its application for accelerating engineering calculations and the possibility of integration into domestic system-level 1D simulation software packages, which is particularly relevant in the context of developing digital twin technologies and import-independent engineering solutions.

Keywords: mathematical modeling, surrogate model, neural networks, non-isothermal flow mixing

REFERENCES

- [1] Arkadov G.V., Zhukavin A.P., Kroshilin A.E., Parshikov I.A., Solov'ev S.L., Shishov A.V. The virtual digital nuclear power plant: a modern tool for supporting the lifecycle of VVER-based nuclear power units. *Thermal Engineering*, 2014, vol. 61, no. 10, pp. 697–705.
- [2] Gololobov S.M., Druzhaev A.A., Semenov A.A., Chernakov V.A. Vozmozhnosti po primeneniyu programmno-tekhnicheskogo kompleksa «Virtual'no-tsifrovaya AES s VVER» dlya obespecheniya bezopasnosti ekspluatatsii AES [Possibilities of using the software and hardware complex «Virtual Digital NPP with VVER» to ensure the safety of NPP operation]. In: *Proc. of the 13th Int. Sci.-Pract. Conf. on Nuclear Power "Safety, Efficiency, Resources"*. Book of Abstracts., Sevastopol, October 3–6, 2017. pp. 19–20.
- [3] Petruzzi, Alessandro, D'Auria, Francesco. Thermal-hydraulic system codes in nuclear reactor safety and qualification procedures. *Science and Technology of Nuclear Installations*, 2008, art. 460795, p. 16.
- [4] Forrester A.I.J., Sobester A., Keane A.J. *Engineering design via surrogate modelling: A practical guide*. Chichester, Wiley, 2008, 210 p.
- [5] Kornev A.V., Kozelkov A.S. Application of domestic supercomputer technologies for the development of promising models of aviation equipment. *Modern Information Technologies and IT-Education*, 2021, vol. 17, no. 2, pp. 250–264.
- [6] Jun Yang, Xi Sui, Yanping Huang, Ling Zhao, Minyun Liu. Assessment of reactor flow field prediction based on deep learning and model reduction. *Annals of Nuclear Energy*, 2022, vol. 179, art. 109367.
- [7] Palmi K., Kubinski W., Darnowski P. Prediction of the evolution of the nuclear reactor core parameters using artificial neural network. *Annals of Nuclear Energy*, 2025, vol. 211, art. 110891.
- [8] Konovalov I.A., Sokolov A.N., Barinov A.A., Zyryanova T.K. Developing a technique for constructing surrogate models of equipment on the example of a hydraulic model of a gas-removal device. *Thermal Engineering*, 2023, vol. 70, no. 2, pp. 139–144.
- [9] Asouti V., Kontou M., Giannakoglou K. Radial Basis Function Surrogates for Uncertainty Quantification and Aerodynamic Shape Optimization under Uncertainties. *Fluids*, 2023, vol. 8, no. 11, art. 292.
- [10] Gagliardi F., Giannakoglou K.C. A two-step radial basis function-based CFD mesh displacement tool. *Advances in Engineering Software*, 2019, vol. 128, pp. 86–97.
- [11] Roshani G.H., Nazemi E., Shama F., Imani M. Designing a simple radiometric system to predict void fraction percentage independent of flow pattern using radial basis function. *Metrology and Measurement Systems*, 2018, vol. 25, no. 2, pp. 347–358.
- [12] Xu K., Wang G., Zhang L., Wang L. Multi-objective optimization of jet pump based on RBF neural network model. *Journal of Marine Science and Engineering*, 2021, vol. 9, no. 2, art. 236.
- [13] Yang C., Yang J., Qin Y. Research on comparative of multi-surrogate models to optimize complex truss structures. *KSCE Journal of Civil Engineering*, 2024, vol. 28, no. 6, pp. 2268–2278.
- [14] De Gooijer B.M., Havinga J., Geijselaers H. J. M., Van den Boogaard A. H. Radial basis function interpolation of fields resulting from nonlinear simulations. *Engineering with Computers*, 2024, vol. 40, no. 1, pp. 129–145.
- [15] Fletcher C. A. J. *Computational Methods in Fluid Dynamics. V.1. Fundamental and General Techniques*. Berlin, Springer-Verlag, 1991, 401 p.

- [16] Patankar, S. V. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Washington, Hemisphere, 1980, Chapter 6.4 «The Pressure-Correction Equation», pp. 126-131.
- [17] Igarashi M., Tanaka M., Kawashima S., Kamide H. Experimental study on fluid mixing for evaluation of thermal striping in T-pipe junction. *10th International Conference on Nuclear Engineering: Proceesing*, USA, Arlington, April 14–18, 2002, pp. 383–390.

Minin S.V., Senior Research Engineer, Sirius University of Science and Technology. e-mail: minin.sv@talantiuspeh.ru

Koroleva A.P., Cand. Sc. (Eng.), Professor, Head of Department, Sirius University of Science and Technology. e-mail: koroleva.anp@talantiuspeh.ru

Shevchenko Y.A., Cand. Sc. (Eng.), Senior Research Associate, Sirius University of Science and Technology. e-mail: shevchenko.yuriy.a@gmail.com

Shlykova A.O., Junior Research Associate, Sirius University of Science and Technology. e-mail: shlykova.ao@talantiuspeh.ru