

С.Д. Алпар¹ * , Р.Н. Файзулин¹ , Ф.К. Токмухамедова¹ 

¹Международный университет информационных технологий, г. Алматы, Казахстан

*e-mail: s.alpar@iitu.edu.kz

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ФИЗИКО-ИНФОРМИРОВАННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ И МЕТОДА РУНГЕ-КУТТЫ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ОДНОМЕРНЫХ УРАВНЕНИЙ ЭЙЛЕРА

Аннотация

Данное исследование представляет из себя модель, описывающую физический процесс, связанный с движением газа по трубопроводам при помощи системы одномерных уравнений Эйлера. В работе будет использоваться численное решение системы уравнений Эйлера через физико-информированные нейронные сети, метод, который объединяет современные подходы моделей глубокого обучения вместе с физическими условиями задачи, которые задают дифференциальные уравнения, начальные и граничные условия. Для валидации модели будет использоваться аналитическое решение системы одномерных уравнений Эйлера, которое будет сравниваться с численным решением, полученным при помощи модели глубокого обучения в виде сравнения графиков и расчета метрик. Также для относительного сравнения этой модели будет проведено сравнение с классическим численным методом Рунге-Кутты 4 порядка, где метод глубокого обучения показал более высокое качество в сравнении с классическим методом. Полученная модель имеет высокое качество и может быть использована в моделировании газовых потоков, причем качество модели глубокого обучения было значительно выше в относительном сравнении с классическим методом Рунге-Кутты 4 порядка, что подчеркивает эффективность и новизну использования методов глубокого обучения в сравнении с классическими методами.

Ключевые слова: глубокое обучение, уравнения Эйлера, физико-информированные нейронные сети, вычислительная гидродинамика.

С.Д. Алпар¹, Р.Н. Файзулин¹, Ф.К. Токмухамедова¹

¹Халықаралық ақпараттық технологиялар университеті, Алматы қ., Қазақстан

ЭЙЛЕРДІҢ БІР ӨЛШЕМДІ ТЕНДЕУЛЕРІН ШЕШУ ҮШІН ФИЗИКА-АҚПАРАТТАНДЫРЫЛҒАН НЕЙРОНДЫҚ ЖЕЛІЛЕР МЕН РУНГЕ-КУТТА ӘДІСІНІҢ САЛЫСТЫРМАЛЫ ТАЛДАУЫ

Аңдатпа

Бұл зерттеу бір өлшемді Эйлер тендеулер жүйесін қолдана отырып, құбырлар арқылы газдың қозғалысымен байланысты физикалық процесті сипаттайтын модель болып табылады. Бұл жұмыста физика-ақпараттандырылған нейрондық желілер арқылы Эйлер тендеулер жүйесінің сандық шешімі қолданылады, бұл әдіс дифференциалдық тендеулерді, бастапқы және шекаралық шарттарды белгілейтін есептердің физикалық жағдайларымен бірге терең оқыту модельдерінің заманауи тәсілдерін біріктіреді. Модельді тексеру үшін Эйлердің бір өлшемді тендеулер жүйесінің аналитикалық шешімі қолданылады, ол графиктерді салыстыру және метрикаларды есептеу түрінде терең оқыту моделінің көмегімен алынған сандық шешіммен салыстырылады. Сондай-ақ, осы модельді салыстырмалы салыстыру үшін классикалық 4-ші ретті Рунге-Кутта (РК4) сандық әдісімен салыстыру жүргізіледі, мұнда терең оқыту әдісі классикалық әдіспен салыстырғанда жоғары сапаны көрсетті. Алынған модель жоғары сапаға ие және оны газ ағындарын модельдеуде қолдануға болады, ал терең оқыту моделінің сапасы классикалық РК4 әдісімен салыстырғанда анағұрлым жоғары болды, бұл классикалық әдістермен салыстырғанда терең оқыту әдістерін қолданудың тиімділігі мен жаңалығын көрсетеді.

Түйін сөздер: терең оқыту, Эйлер тендеулері, физика-ақпараттандырылған нейрондық желілер, есептеу гидродинамикасы.

S.D. Alpar¹, R.N. Faizulin¹, F.K. Tokmukhamedova¹

¹International Information Technology University, Almaty, Kazakhstan

COMPARATIVE ANALYSIS OF PHYSICS-INFORMED NEURAL NETWORKS AND THE RUNGE-KUTTA METHOD FOR SOLVING ONE-DIMENSIONAL EULER EQUATIONS

Abstract

This study presents a model describing the physical process associated with gas flow through pipelines using a system of one-dimensional Euler equations. In this work the numerical solution of the system of Euler equations through physically informed neural networks is used, a method that combines modern approaches of deep learning models together with the physical conditions of the problem, which specify the differential equations, initial and boundary conditions. For the validation of the model, the analytical solution of the system of one-dimensional Euler equations will be used and compared with the numerical solution obtained by the deep learning model in the form of graph comparison and metrics calculation. Also, for the relative comparison of this model will be compared with the classical 4-th order Runge-Kutta (RK4) numerical method, where the deep learning method showed higher quality compared to the classical method. The obtained model is of high quality and can be used in gas flow modeling, and the quality of the deep learning model was significantly higher in relative comparison with the classical RK4 method, which emphasizes the effectiveness and novelty of using deep learning methods in comparison with classical methods.

Keywords: deep learning, Euler equations, physically informed neural networks, computational fluid dynamics.

Введение

Основные положения. В исследовании разработана модель для описания движения газа по трубопроводам на основе системы одномерных уравнений Эйлера с использованием физико-информированных нейронных сетей (PINN). Для валидации модели проведено сравнение численного решения, полученного с помощью PINN, с аналитическим решением и классическим методом Рунге-Кутты 4-го порядка. Результаты показали, что метод глубокого обучения обеспечивает более высокое качество моделирования по сравнению с традиционными численными методами, так как учитывает физические условия задачи. Это подтверждает эффективность использования PINN в вычислительной гидродинамике и демонстрирует их преимущество перед классическими подходами.

Прогноз поведения газа в трубопроводах при помощи моделей глубокого обучения и вычислительной гидродинамики способствует эффективному распределению и транспортировке газа, оказывая эффект на оптимизацию инфраструктуры и различных отраслей промышленности, связанных с транспортными системами.

Математическая модель, которая способна описывать физический процесс связан с движением газа по трубопроводам, с учетом сохранения массы, импульса и энергии движения жидкости, представляет из себя систему одномерных уравнений Эйлера [1,2] в частных производных. При помощи современных численных методов [3-5] можно с высокой точностью смоделировать основные физические величины, такие как плотность, давление и скорость, принимая во внимание эффекты турбулентности и распространение ударных волн в трубопроводах.

В данной статье физико-информированные нейронные сети [6-10] будут использоваться в качестве численной модели, решающей систему одномерных уравнений Эйлера. Архитектура модели представляет из себя полносвязанные нейронные сети, где в качестве функции потерь используется взвешенная сумма [11] среднеквадратичных ошибок от физического уравнения и ошибок начальных и граничных условий. Эффективность модели оценена при помощи валидации с аналитическим решением в виде расчета метрик и графического сравнения графиков, где модель показала высокое качество. Также было проведено сравнение с классическим численным методом Рунге-Кутты 4 порядка (RK4), где метод глубокого обучения смог показать более высокие показатели в относительном сравнении для метрики L_∞ , что является нормой, измеряющей точность и определяется следующим образом:

$$L_{\infty} = \|\hat{u} - u\|$$

где \hat{u} и u — аналитическое и численное решения соответственно.

Методология исследования

Система одномерных уравнений Эйлера описывает физический процесс, связанный с движением газа в трубопроводах. Физический процесс наблюдается на временном множестве $t \in [0, 0.1]$ и пространственном множестве $x \in [0, 1]$. Уравнение неразрывности в системе описывает сохранение общей массы в объеме жидкости в течение всего времени и записывается в следующем виде:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} = 0, \quad (1)$$

где ρ [кг/м³] – плотность газа, u [м/с] – компонент скорости потока.

Уравнение импульса в системе, объясняемое законами движения Ньютона, формирует ударную волну и влияет на ускорение потока газа и записывается в следующем виде:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p)}{\partial x} = 0, \quad (2)$$

где p - давление, [кг/мс²].

Последним уравнением в системе является уравнение энергии, вытекающее из принципов сохранения энергии, и описывающее сохранение энергии в потоках жидкости и имеющее вид:

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial[u(E + p)]}{\partial x} = 0, \quad (3)$$

где E - энергия, [Дж/м³], и γ – удельная теплоемкость равная 1.4:

$$E = \frac{p}{\gamma - 1} + \frac{1}{2}\rho u^2, \quad (4)$$

Начальные условия задаются в виде следующей системы, граничные условия принимают те же значения в обоих концах отрезка:

$$(\rho, u, p)_{t=0} = \begin{cases} (1, 0, 1), & 0 \leq x \leq 0.5, \\ (0.125, 0, 0.1), & 0.5 \leq x \leq 1, \end{cases} \quad (5)$$

Систему в общей форме можно переписать в следующем виде для дальнейшего моделирования:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \mathcal{N}[U; \lambda] = 0, \quad x \in \Omega, t \in [0, t_f], \quad (6)$$

$$U(x, 0) = \mathcal{J}(x), \quad x \in \Omega, \quad (7)$$

$$U(x, t) = \mathcal{B}(t), \quad x \in \partial\Omega, t \in [0, t_f], \quad (8)$$

где операторы $\mathcal{J}(\cdot)$, $\mathcal{B}(\cdot)$, $\mathcal{N}(\cdot)$ представляют из себя операторы начального условия, граничного условия и оператор пространственных производных уравнения, соответственно.

Вместе с λ - параметром дифференциального уравнения и t_f - общим временем физического эксперимента, где начальные условия определены в области Ω , а граничные условия в области $\partial\Omega$.

Для физико-информированных нейронных сетей обозначим функцию $f(x, t)$ в следующем виде:

$$f(x, t) = \frac{\partial U}{\partial t} + \mathcal{N}[U; \lambda] = \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\rho}{E} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\rho u}{u(E+p)} \right] = 0, \quad (9)$$

где функция потерь, представляющая из себя взвешенную среднеквадратичную сумму ошибок, будет иметь вид:

$$\mathcal{L} = (1 - \alpha)(\mathcal{L}_J + \mathcal{L}_B) + \alpha\mathcal{L}_F, \quad 0 \leq \alpha \leq 1, \quad (10)$$

где отдельные функции потерь для начального \mathcal{L}_J и граничных условий \mathcal{L}_B вместе с физической функцией потерь \mathcal{L}_F , соответственно, принимают вид:

$$\mathcal{L}_J = \frac{1}{N_I} \sum_{i=1}^{N_I} (J(x_i^i) - U(x_i^i, t_i^i))^2, \quad (11)$$

$$\mathcal{L}_B = \frac{1}{N_B} \sum_{i=1}^{N_B} (B(t_B^i) - U(x_B^i, t_B^i))^2, \quad (12)$$

$$\mathcal{L}_F = \frac{1}{N_F} \sum_{i=1}^{N_F} f(x_F^i, t_F^i)^2. \quad (13)$$

Далее, при помощи алгоритма оптимизации ADAM параметры модели будут находиться в следующем виде:

$$\theta^* = \arg \min_{\theta} \mathcal{L}(\theta), \quad (14)$$

Для классического численного метода использован метод РК4 для интегрирования по времени, для уравнения вида:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \mathcal{N}[U], \quad (15)$$

Шаги для метода РК4 записываются в виде:

$$U^{(1)} = U^n + \frac{\Delta t}{2} \mathcal{N}^n$$

$$U^{(2)} = U^n + \frac{\Delta t}{2} \mathcal{N}^{(1)}$$

$$U^{(3)} = U^n + \Delta t \mathcal{N}^{(2)}$$

$$U^{n+1} = U^n + \frac{\Delta t}{6} (\mathcal{N}^n + 2\mathcal{N}^{(1)} + 2\mathcal{N}^{(2)} + \mathcal{N}^{(3)}), \quad (16)$$

Так как, схема РК4 аппроксимирует только время, необходимы схемы для аппроксимации конвективных и вязких пространственных производных, которые обеспечат второй порядок по пространству.

Схема “против потока” для конвективных слагаемых:

$$-u \frac{\partial \xi_i^t}{\partial x} = -\frac{u_R \xi_R - u_L \xi_L}{\Delta x}, \quad (17)$$

Где значения u_R и u_L определяются как среднее между узловыми точками:

$$u_R = \frac{u_i^t + u_{i+1}^t}{2}, u_L = \frac{u_i^t + u_{i-1}^t}{2}, \quad (18)$$

Функции ξ_R и ξ_L , зависящие от знаков u_R и u_L , определяются следующим образом:

$$\xi_R = \begin{cases} \xi_i^t, u_R \geq 0 \\ \xi_{i+1}^t, u_R < 0 \end{cases}, \xi_L = \begin{cases} \xi_{i-1}^t, u_L \geq 0 \\ \xi_i^t, u_L < 0 \end{cases}, \quad (19)$$

Центральная разностная схема для вязких слагаемых:

$$\frac{\Delta F(u)_i^t}{\Delta x} = \frac{F(u)_{i+1}^t - F(u)_{i-1}^t}{2\Delta x}, \quad (20)$$

Для обеспечения устойчивости по времени используется условие Куранта-Фридрихса-Леви (CFL), которое пересчитывается на каждой итерации по времени n :

$$s_{max}^{(n)} = \max_i \left[|u_i^n| + \sqrt{\frac{\gamma p_i^n}{\rho_i^n}} \right], \quad \Delta t^{(n)} = \frac{CFL \Delta x}{s_{max}^{(n)}}, \quad (21)$$

Результаты исследования

Для обучения модели глубокого обучения были использованы следующие гиперпараметры: конфигурация нейронной сети, количество итераций, скорость обучения, коэффициент α для балансировки функций ошибок, функция активации σ , количество точек для физической ошибки, начальных и граничных условий, N_F , N_I , N_B , соответственно и количество точек для пространства и времени N_x , N_t . Список гиперпараметров и их значения представлены в таблице 1.

Таблица 1. Входные значения для модели глубокого обучения

Конфигурация Н.С.	Кол-во итераций	Скорость обучения	α	$\sigma(\cdot)$	N_F	N_I	N_B	N_x	N_t
[9 × 20]	42500	$3,25 \times 10^{-4}$	5×10^{-4}	Tanh	14000	40	60	256	256

Поиск гиперпараметров был реализован через grid search [7, 11], наиболее лучшие результаты для скорости обучения и коэффициента α дают маленькие значения (10^{-3} , 10^{-4} и т.д.), что обеспечивает более устойчивое решение и снижает переобучение, для функции активации практически всегда наилучшим выбором является Tanh. В качестве конфигурации нейронной сети лучше всего использовать большее количество слоев (от 5 до 10 слоев), с небольшим количеством нейронов в слоях (от 20 до 32 нейронов). На рисунке 1 изображено решение системы уравнений Эйлера в аналитическом виде, и численном видах для методов

глубокого обучения и метода РК4 для временных значений $t = 0.08, 0.09, 0.1$ для физических характеристик плотности ρ , скорости u , и давления p .

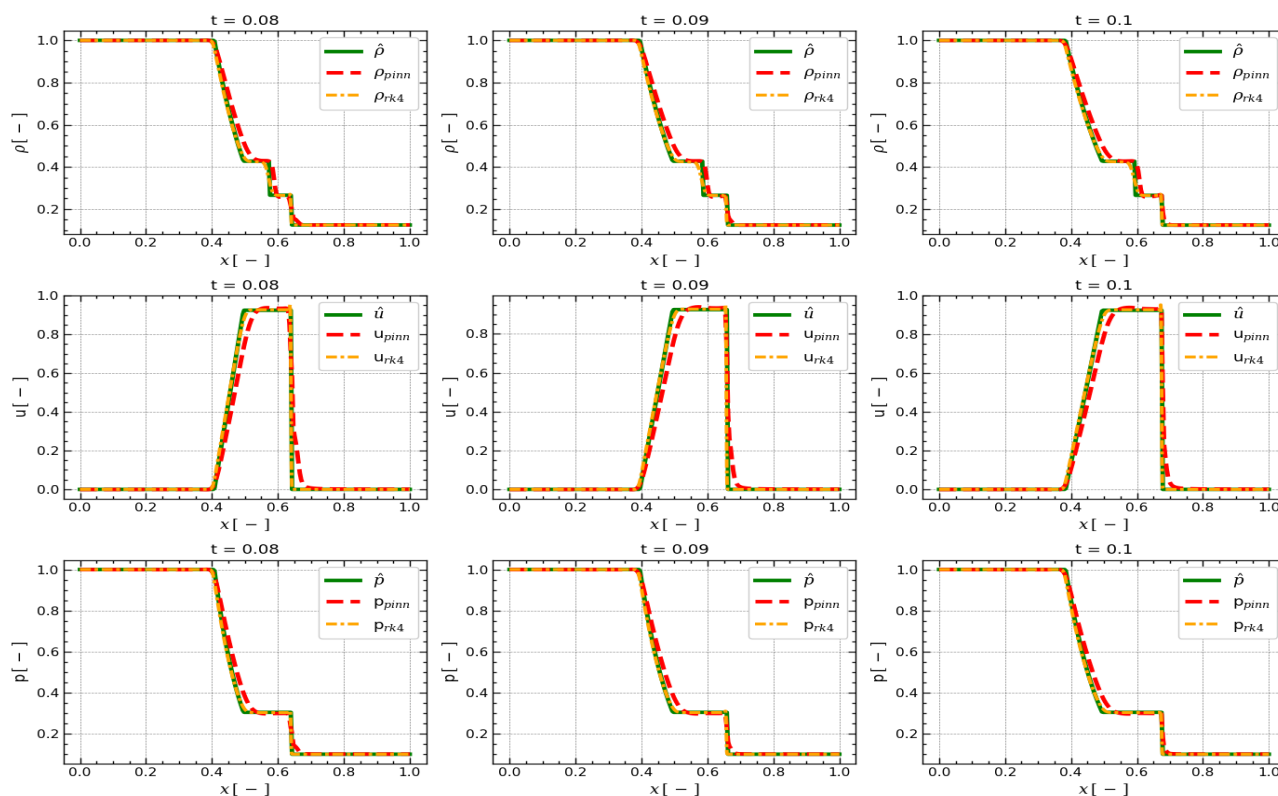


Рисунок 1. Решение уравнений Эйлера для временных значений $t = 0.08, 0.09, 0.1$, где (ρ, u, p) численные решения и $(\hat{\rho}, \hat{u}, \hat{p})$ точное решение

Данные графики иллюстрируют эффективность метода глубокого обучения в основных профилях физических характеристик для разных временных значений и способность модели описывать физический процесс. Также в сравнении с методом РК4 модель глубокого обучения показывает более гладкие профили для скорости и давления, уменьшая колебания. В таблице 2 приведены расчеты метрик L_∞ для методов глубокого обучения и РК4.

Таблица 2. Сравнительный анализ метрик для моделей

Модель	Плотность L_∞	Скорость L_∞	Давление L_∞
Физико-информированная нейронная сеть	0,019	0,163	0,026
РК4	0,089	0,447	0,121

Дискуссия

Исходя из этих расчетов, модель глубокого обучения превосходит модель РК4, имея более низкие показатели для метрики L_∞ для физических характеристик плотности, скорости и давления. В относительном сравнении с РК4 для показателей плотности, скорости и давления значения метрик L_∞ меньше на 78.62 %, 63.47 %, 78.47 % для модели глубокого обучения.

Для данной задачи и набора параметров метод PINN показал более высокую точность в сравнении с классическим методом РК4. Преимущества PINN – лучшая обобщающая способность и возможность напрямую адаптировать функцию потерь под граничные условия. Однако в сравнении с методом РК4, который является более простым в реализации, метод PINN требует анализа в выборе архитектуры модели и настройки гиперпараметров.

Заключение

В данной статье был рассмотрен физический процесс движения газа в трубопроводе. Была приведена математическая модель системы одномерных уравнений Эйлера, где было описано каждое уравнение и его физический смысл относительно всей системы и общего физического процесса, также был приведен общий вид этой проблемы.

Физико-информированные нейронные сети были использованы в качестве метода для моделирования задачи, где была описана методология использования полносвязанных нейронных сетей для решения уравнений в частных производных. Была описана функция потерь, необходимая для настройки параметров модели, которая представляет из себя взвешенную сумму среднеквадратичных ошибок, совмещающую в себе физическую ошибку и ошибки начальных и граничных условий, также были приведены входные данные необходимые для обучения модели. В ходе сравнительного анализа графиков и расчета метрик с аналитическим решением и численным решением метода РК4 было установлено высокое качество модели, где модель глубокого обучения имела более низкие ошибки по сравнению с РК4 и более гладкие профили.

Тем самым результаты моделирования одномерных уравнений Эйлера при помощи модели глубокого обучения дает важное представление о поведении и общей физики процесса, связанного с движением газа в трубопроводе, отражая распространение ударных волн и динамические характеристики потока для плотности, скорости и давления.

References

- [1] Lora-Clavijo, F. D., Cruz-Pérez, J. P., Guzmán, F. S., González, J. A. Exact solution of the 1D riemann problem in Newtonian and relativistic hydrodynamics // *Revista Mexicana De Física E.* – 2013. – Vol. 59(1). – P. 28–50. URL: http://rmf.smf.mx/pdf/rmf-e/59/1/59_1_28.pdf
- [2] Endres, E. E., Jenssen, H. K. COMPRESSIBLE 1D EULER EQUATIONS WITH LARGE DATA: a CASE STUDY // *Journal of Hyperbolic Differential Equations.* – 2009. – Vol. 06(02). – P. 389–406. <https://doi.org/10.1142/s0219891609001800>
- [3] Teixeira, F. L., Sarris, C., Zhang, Y., Na, D., Berenger, J., Su, Y., Okoniewski, M., Chew, W. C., Backman, V., Simpson, J. J. Finite-difference time-domain methods // *Nature Reviews Methods Primers* – 2023. – Vol. 3(1). <https://doi.org/10.1038/s43586-023-00257-4>
- [4] High-Order Numerical Schemes for Compressible Flows // *TU Delft Repository* – 2016. <https://repository.tudelft.nl/record/uuid:e4297489-60e2-403e-a246-1b1ea4c4ea63>
- [5] Droniou, J. Finite volume schemes for diffusion equations: Introduction to and review of modern methods // *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences.* – 2014. – Vol. 24(08). – P. 1575–1619. <https://doi.org/10.1142/s0218202514400041>
- [6] T. Rabczuk, K.-J. Bathe (Eds.). *Machine Learning in Modeling and Simulation. In Computational Methods in Engineering & the Sciences.* Springer International Publishing. – 2023. <https://doi.org/10.1007/978-3-031-36644-4>
- [7] Raissi, M., Perdikaris, P., Karniadakis, G. E. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations // *Journal of Computational Physics.* – 2019. – Vol. 378. – P. 686–707. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>
- [8] Markidis, S. The Old and the New: Can Physics-Informed Deep-Learning Replace Traditional Linear Solvers? // *Frontiers in Big Data.* – 2021. – Vol. 4. <https://doi.org/10.3389/fdata.2021.669097>
- [9] Faroughi, S. A., Ramin Soltanmohammadi, Datta, P., Seyed Kourosh Mahjour, Shirko Faroughi. Physics-Informed Neural Networks with Periodic Activation Functions for Solute Transport in Heterogeneous Porous Media // *Mathematics.* – 2023. – Vol. 12(1). P.63. <https://doi.org/10.3390/math12010063>
- [10] Wang, Y., Zhong, L. NAS-PINN: Neural architecture search-guided physics-informed neural network for solving PDEs // *Journal of Computational Physics.* – 2024. – Vol. 496. – P. 112603. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2023.112603>
- [11] de Wolff, T., Carrillo, H., Martí, L., Sanchez-Pi, N. Towards Optimally Weighted Physics-Informed Neural Networks in Ocean Modelling // *ArXiv.org.* – 2021. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2106.08747>