

О НОВОМ МЕТОДЕ ЦИФРОВОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НЕСТАЦИОНАРНЫХ РЕЖИМОВ ТЕЧЕНИЯ ГАЗА В МАГИСТРАЛЬНЫХ ГАЗОПРОВОДАХ С ПРИМЕНЕНИЕМ НЕЙРОННЫХ ОПЕРАТОРОВ

УДК 004.67::622.691.4

А.В. Белинский, к.т.н., ООО «НИИгазэкономика» (Москва, Россия),
A.Belinsky@econom.gazprom.ru

Д.В. Горлов, ООО «НИИгазэкономика», D.Gorlov@econom.gazprom.ru

И.А. Пятисhev, к.ф.-м.н., ООО «НИИгазэкономика»,
I.Pyatyshev@econom.gazprom.ru

А.Е. Титов, к.т.н., ООО «НИИгазэкономика», A.Titov@econom.gazprom.ru

EDN: AVJVCN



Традиционный подход к цифровому моделированию нестационарных режимов течения газа в протяженных магистральных газопроводах основан на численном решении системы дифференциальных уравнений, которые вытекают из законов сохранения массы, импульса и энергии. Моделирование крупных газотранспортных систем численными методами требует больших вычислительных затрат. Это ограничивает применение таких моделей на практике и сдерживает развитие методов оптимизации нестационарных режимов работы газотранспортных систем при их эксплуатации. В связи с этим и в мировой, и в отечественной науке активно продолжаются исследования, направленные на создание более эффективных методов моделирования режимов транспорта газа.

В настоящей работе предложен новый метод цифрового моделирования нестационарных режимов течения газа в магистральных газопроводах, основанный на применении нейронных операторов. Последние предназначены для аппроксимации нелинейных математических отображений между бесконечномерными пространствами функций (граничных/начальных условий и решений указанной системы дифференциальных уравнений). Проведенные многосценарные вычислительные эксперименты показали, что предсказание модели с применением нейронного оператора осуществляется с высокой степенью точности. При этом такая обученная модель обладает вычислительной производительностью, на порядки превышающей традиционные численные методы, и инвариантна к изменению степени дискретизации пространственно-временной сетки. Полученные результаты показывают перспективность применения нейронных операторов для моделирования нестационарных режимов работы газотранспортной системы.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: НЕСТАЦИОНАРНОЕ ТЕЧЕНИЕ ГАЗА, МАГИСТРАЛЬНЫЙ ГАЗОПРОВОД, ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД, ФИЗИЧЕСКИ ИНФОРМИРОВАННАЯ НЕЙРОННАЯ СЕТЬ, НЕЙРОННЫЙ ОПЕРАТОР.

Цифровое моделирование технологических режимов работы газотранспортных систем (ГТС) – один из основных инструментов при решении задач их проектирования, эксплуатации и оптимизации. Цифровые модели позволяют проводить расчет параметров газового потока и определять требуемые характеристики объектов транспорта газа, например газопроводов, компрессорных станций, различного оборудования. Это дает

возможность оценивать производительность газопроводов, анализировать происходящие в них динамические процессы и определять критические условия функционирования для предотвращения аварийных ситуаций.

Одним из основных моделируемых объектов ГТС является газопровод. Его математическая модель описывается нелинейными уравнениями в дифференциальной форме, не имеющими аналитиче-

ского решения [1]. Это приводит к необходимости поиска приближенного решения. Традиционные подходы связаны с применением различных численных методов. Однако такой способ обладает рядом ограничений, обусловленных в первую очередь объемом вычислительных затрат для сложных ГТС и необходимостью их неоднократного повторения для объектов с различными характеристиками (например, различной протяжен-



A.V. Belinskiy, PhD in Engineering, NIIGazekonomika LLC (Moscow, Russia), A.Belinskiy@econom.gazprom.ru

D.V. Gorlov, NIIGazekonomika LLC, D.Gorlov@econom.gazprom.ru

I.A. Pyatyshev, PhD in Physics and Mathematics, NIIGazekonomika LLC, I.Pyatyshev@econom.gazprom.ru

A.E. Titov, PhD in Engineering, NIIGazekonomika LLC, A.Titov@econom.gazprom.ru

About the new method for digital modeling of non-stationary gas flow modes in main gas pipelines using the neural operators

The traditional approach to digital modeling of non-stationary gas flow modes in long-distance main gas pipelines is based on the numerical solution of differential equations that derive from the laws of mass, momentum, and energy conservation. The modeling of large gas transmission systems, using the numerical methods, requires large computational costs. This fact restricts the application of such models and holds down the development of methods that could be used to optimize operation of gas transmission systems in non-stationary modes. In this regard, a research, aimed to create more effective methods of gas transmission modes modeling, is being actively pursued in both global and domestic science.

The present article proposes a new method of digital modeling of non-stationary gas flow modes in main gas pipelines, which is based on the neural operators. The latter are used for approximation of non-linear mathematical mapping between infinite-dimensional spaces of the functions (the boundary/initial conditions and solutions of the mentioned system of differential equations). The multi-scenario computational experiments showed that the model prediction with a neural operator featured a high degree of accuracy. Moreover, such a trained model has a computational performance, exceeding the traditional numerical methods, and is invariant to the changes in the spatial-temporal grid discretization. The obtained results show that usage of neural operators to model operation of a gas transmission system in the non-stationary mode is a very promising approach.

KEYWORDS: NON-STATIONARY GAS FLOW, MAIN GAS PIPELINE, NUMERICAL METHOD, PHYSICS-INFORMED NEURAL NETWORK, NEURAL OPERATOR.

ности или диаметра газопровода) или по мере изменения параметров газового потока (например, давления, расхода или температуры газа).

С повышением производительности вычислительной техники при моделировании и расчете сложных технических систем все чаще начинают применять различные подходы, связанные с использованием искусственных нейронных сетей (НС), которые в той или иной мере позволяют уйти от ограничений, присущих численным методам.

В настоящей работе приведены результаты:

- исследования применимости нейросетевых подходов при расчете режимов течения газа в магистральных газопроводах, для чего рассмотрены варианты построения суррогатных моделей физических процессов с помощью НС;

- численных расчетов для обучения нейронных операторов;

- анализа точности расчета с помощью нейронных операторов и исследования обобщающей способности полученных моделей.

ТРАДИЦИОННЫЕ ПОДХОДЫ К МОДЕЛИРОВАНИЮ РЕЖИМОВ ТЕЧЕНИЯ ГАЗА В ПРОТЯЖЕННЫХ ГАЗОПРОВОДАХ

При расчетах и исследованиях в области газовой динамики применяют уравнения, которые вытекают из законов сохранения массы, импульса и энергии. В ходе моделирования параметров газового потока в газопроводе эти уравнения часто упрощают и используют в одномерной форме, описывающей изменения давления, температуры и расхода газа вдоль трубы [1]:

$$\frac{\partial p^2}{\partial x} = - \frac{16 \cdot \lambda \cdot R \cdot z \cdot T}{\pi^2 \cdot D_{\text{вн}}^5} \cdot \rho_{\text{ст}}^2 \cdot q \cdot |q|, \quad (1)$$

$$\frac{\partial p^2}{\partial t} = - \frac{4 \cdot \rho_{\text{ст}} \cdot R \cdot z \cdot T}{\pi \cdot D_{\text{вн}}^2} \cdot \frac{p}{q} \cdot \frac{\partial q^2}{\partial x}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{R \cdot T^2}{2 \cdot c_p \cdot p^2} \cdot \frac{\partial z}{\partial T} \cdot \frac{\partial p^2}{\partial x} - \frac{\pi \cdot K_{\text{то}} \cdot D_{\text{н}} \cdot (T - T_{\text{ок}})}{c_p \cdot q \cdot \rho_{\text{ст}}}, \quad (3)$$

где p – давление газа; x – координата расстояния вдоль трубы; λ – фактический коэффициент гидравлического сопротивления; R – универсальная газовая постоянная; z – коэффициент сжимаемости газа; T – температура газа; $D_{\text{вн}}, D_{\text{н}}$ – внутренний и наружный диаметр трубы соответственно; $\rho_{\text{ст}}$ – плотность газа при стандартных условиях; q – объемный расход газа; t – координата по времени; c_p – удельная изобарная теплоемкость газа; $K_{\text{то}}$ – коэффициент теплообмена трубы с внешней средой; $T_{\text{ок}}$ – температура окружающей среды.

Приведенная система параболическая, в уравнениях (1) и (2) учтены потери напора газа за счет сил трения и изменения скорости в направлении его течения, но пренебрегаются составляющие, характеризующие инерционность процесса, изменение кинетической энергии (при высоких скоростях потока) и силы гравитации в наклонных газопроводах. В целом уравнения (1) – (3) соответствуют штатному протеканию технологического процесса со сравнительно

медленно меняющимися параметрами газового потока. При этом в уравнении сохранения энергии (3) учтены процессы теплообмена через стенку трубы по закону Ньютона и наличие дроссель-эффекта изменения температуры при резких сжатиях и расширениях потока газа [1].

Использование указанных равенств вместе с дополнительными уравнениями, учитывающими специфику транспортировки газа (расчеты необходимых коэффициентов, параметров и их средних значений) [2], позволяет создавать общие модели ГТС и проводить расчеты, принимая во внимание различные факторы, влияющие на параметры газового потока в газопроводе.

Система уравнений (1) – (3) не имеет аналитического решения и, как правило, решается численно на дискретной сетке пространственно-временной области. Например, можно применить подходы, связанные с решением дифференциальных уравнений (ДУ) в частных производных второго порядка методом конечных разностей (FDM, от англ. finite-difference method). Это численный метод, используемый для решения ДУ в частных производных на пространственно-временной сетке [3]. Он является одним из наиболее распространенных методов численного анализа и применяется для приближенного нахождения решений ДУ, которые могут быть слишком сложными или невозможными для аналитического решения, как в рассматриваемом случае.

Численное решение обычно вычислительно затратно, особенно для структурно сложных ГТС. При этом в случае изменения первоначально заданных граничных или начальных условий, параметров модели, а также степени дискретизации сетки требуется полный пересчет. Наконец, для увеличения точности расчетов необходимо повышать степень дискретизации, что приводит к росту

требований к вычислительным ресурсам и времени расчета.

ПРИМЕНЕНИЕ ФИЗИЧЕСКИ ИНФОРМИРОВАННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ И НЕЙРОННЫХ ОПЕРАТОРОВ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ГАЗОПРОВОДОВ

Значительное количество новых исследований в области моделирования динамики реальных технических систем связано с методами, в основе которых лежит использование машинного обучения (МО). Реализация моделей МО, где ДУ играют ключевую роль, позволяет учитывать физические свойства системы (объекта, процесса) в рамках обучения НС.

В последнее время получили популярность физически информированные нейронные сети (PINNs, от англ. physics-informed neural networks), которые представляют собой альтернативу численному решению ДУ [4–7]. Этот метод объединяет НС с физической информацией о реальном объекте или процессе и соответствующими данными о физических ограничениях (граничные и начальные условия). Идея заключается в том, чтобы обучить НС приближать решение ДУ, удовлетворяя при этом начальным и граничным условиям [8]. Численное решение необходимо только для оценки полученного с помощью PINNs результата, при обучении модели оно не используется.

Физически информированные нейронные сети позволяют аппроксимировать сложные функции без необходимости введения сложных динамически адаптивных сеток или преобразований [1]. Однако, как и многие другие методы глубокого МО, PINNs могут быть менее интерпретируемыми по сравнению с традиционными численными методами, требуют подбора архитектуры сети для решаемой задачи, аккуратной настройки гиперпараметров. При этом существенный недостаток, объединяющий PINNs и численные решения, заключается в необ-

ходимости проведения повторного расчета при изменении граничных или начальных условий, параметров модели, а также дискретизации сетки, в данном случае – переобучения или, по крайней мере, дообучения модели.

Существуют и другие модификации НС, не требующие обучающего набора данных, например конкурентные PINNs (cPINNs) [9] или методы прямой энергии (DEM и mDEM, от англ. direct energy method и mixed direct energy method), где в функцию потерь включается информация о потенциальной энергии объекта [10, 11]. Указанные модификации образуют класс методов, получивший название «нейронный метод конечных элементов» (Neural-FEM, от англ. neural finite element method) [12]. Другой подход – вариант адаптации глубокой сверточной НС для отображения данных между конечномерными пространствами [13], что приводит к зависимости от сетки и требует модификаций и настройки для разных разрежений и последующего дообучения.

Наибольший интерес для моделирования нестационарных режимов течения газа в магистральных газопроводах представляют методы МО, где НС может работать не с одним набором параметров ДУ в частных производных, а с целым семейством, т.е. параметры можно варьировать. В этом случае посредством нейронного оператора выполняется отображение между множествами исходных функций и решениями семейства уравнений [14]. Так же, как традиционные НС могут приближать сложные нелинейные функции, используя комбинацию линейных преобразований и нелинейных функций активации, нейронные операторы способны аппроксимировать сложные математические отображения между бесконечномерными пространствами. Иными словами, они могут обрабатывать сложные отношения и взаимосвязи в данных, используя структуру, включающую и линейные, и нелинейные

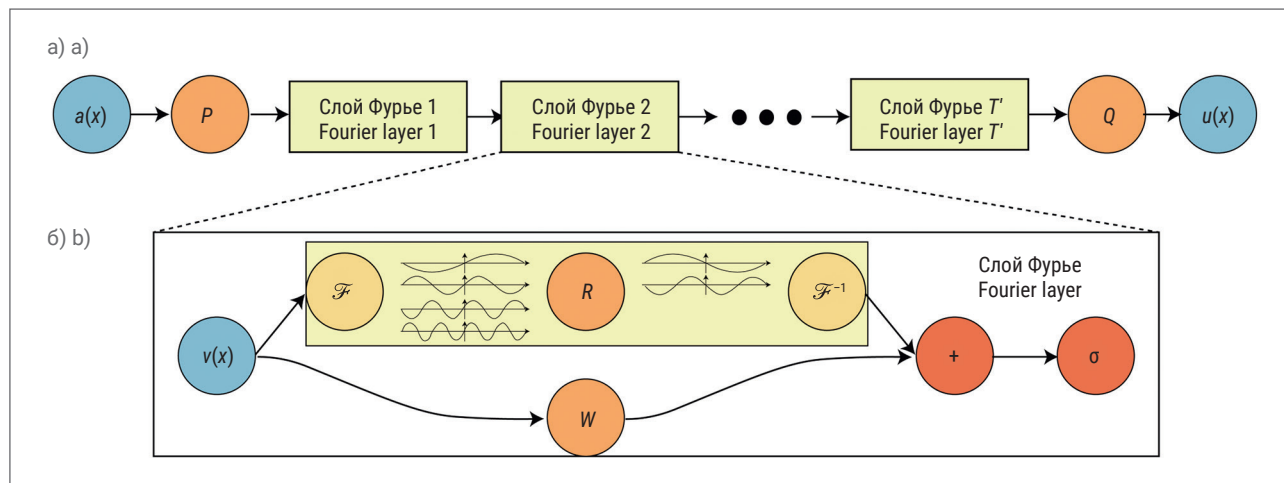


Рис. 1. Нейронный оператор Фурье [16]: а) архитектура; б) пример реализации слоя Фурье: $a(x)$ – входная функция-параметр; P, Q – преобразования, связанные с требуемым изменением размерности данных; $u(x)$ – выходная функция, описывающая целевое состояние объекта; $u(x)$ – функция, описывающая изменения данных при прохождении через промежуточные слои; \mathcal{F} и \mathcal{F}^{-1} – прямое и обратное преобразование Фурье; R – линейное преобразование (сдвиг), применяемое к спектральным компонентам входной функции слоя Фурье; W – линейное преобразование (сдвиг) в пространственной области; σ – нелинейная функция активации

Fig. 1. Fourier neural operator [16]: a) architecture; b) example of a Fourier layer implementation: $a(x)$ – input function-parameter; P, Q – transformations associated with the required change in data dimension; $u(x)$ – output function describing the target state of the object; $u(x)$ – function that describes how data changes as it passes through intermediate layers; \mathcal{F} and \mathcal{F}^{-1} – direct and inverse Fourier transform; R – linear transformation (shift) applied to the spectral components of the input function of the Fourier layer; W – linear transformation (shift) in the spatial domain; σ – non-linear activation function

компоненты. Это позволяет нейронным операторам эффективно моделировать сложные системы, например связанные с динамикой жидкостей и газов и изменением параметров исследуемого объекта во времени и пространстве, которые трудно обработать с помощью традиционных методов.

Обученный нейронный оператор может на порядки быстрее выдавать решение, чем при использовании традиционных подходов. Такая модель позволяет получить желаемую инвариантность от точности дискретизации координатной сетки при использовании обученной модели. Среди главных преимуществ нейронного оператора необходимо отметить следующее: обучить его потребуется только один раз – решения для нового набора исходных данных получаются путем прямого прохода через НС, прямым расчетом без численного решения каких-либо уравнений. Вместе с тем сложность такого подхода связана с необходимостью построения самих операторов.

Один из вариантов операторов, способных выучивать отображения

между пространствами функций, – DeepONet (от англ. deep operator network) [15]. Его ключевая идея основана на универсальной теореме аппроксимации функций и заключается в использовании двух отдельных НС: сеть, называемая *branch* (ветвь), обрабатывает входные функции, а другая, называемая *trunk* (ствол), – точки, в которых эти функции оцениваются. Несмотря на то что DeepONet способен аппроксимировать широкий спектр операторов, он может испытывать трудности с обобщением за пределами семейства функций-параметров и диапазонов данных, на которых он был обучен, хотя обладает свойством инвариантности к дискретизации пространственно-временной сетки.

В работе [16] авторы предложили решение этой проблемы посредством применения быстрого преобразования Фурье, когда дифференцирование функции в физическом пространстве заменяется умножением ее преобразования Фурье на множитель, зависящий от частоты, что используется в спектральных методах

для решения ДУ, в том числе с применением НС [17]. Нейронный оператор Фурье (FNO, от англ. Fourier neural operator) [16] значительно увеличивает эффективность приближения отображения между пространствами функций и является одним из наиболее перспективных подходов к построению моделей сложных динамических систем.

Интегральное ядро FNO представляет собой функцию, используемую в интегральных преобразованиях и определяющую отображение входной функции в выходную. Предложенный подход предполагает наличие набора наблюдений a_j , представляющих входные данные (например, результат численного решения), выбранные из распределения μ , и $u_j = G^\dagger(a_j)$, представляющих, соответственно, выходные данные. Цель состоит в поиске аппроксимации G^\dagger путем создания параметрического отображения G входных данных в выходные (рис. 1а).

Для этого выбираются параметры θ для нейронного оператора G_θ из параметрического пространства $\Theta \in \Theta$ таким образом, чтобы

функция $G(\cdot, \theta)$, определенная ими, наилучшим образом приближала исходное отображение:

$$G_\theta : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{U}, \theta \in \Theta, \quad (4)$$

$$G(\cdot, \theta^\dagger) = G_{\theta^\dagger} \approx G^\dagger, \quad (5)$$

где G_θ – нейронный оператор, осуществляющий отображение между входными \mathcal{A} и выходными \mathcal{U} функциональными пространствами; \mathcal{A} – пространство входных функций-параметров, содержащее все возможные входные данные или исходные условия для модели; \mathcal{U} – пространство выходных функций, содержащее все возможные выходные данные или решения, которые модель стремится предсказать; θ^\dagger – оптимальный набор параметров для нейронного оператора; G_{θ^\dagger} – нейронный оператор G_θ , параметризованный θ^\dagger ; G^\dagger – оптимальный оператор, который точно отображает $\mathcal{A} \rightarrow \mathcal{U}$.

Это определяет подход к обучению в бесконечномерных пространствах с использованием функционала C , который измеряет различия между предсказанием нейронного оператора $G(\cdot, \theta)$ и отображением G^\dagger для разных наблюдений a_j и предполагает нахождение параметров θ модели таким образом, чтобы среднее значение функционала по всему распределению входных данных было минимальным:

$$\min_{\theta \in \Theta} E_{a \sim \mu} [C(G(a, \theta), G^\dagger(a))], \quad (6)$$

где $E_{a \sim \mu}$ – математическое ожидание вероятностного распределения μ на пространстве входных функций-параметров \mathcal{A} для оценки различия $G(a, \theta)$ и $G^\dagger(a)$ и минимизации функционала C на всем пространстве входных данных.

В контексте МО это обычно достигается путем обучения модели на выборке данных, взятых из распределения μ , и минимизации средней ошибки между предсказанными и «истинными» значениями. Описанный подход позволяет модели лучше обобщать и работать с данными, которые она

ранее не видела, но которые подчиняются тому же распределению.

Поскольку a_j и u_j являются функциями, они дискретизированы на некоторой сетке с набором узлов D_j . Нейронный оператор обучается на дискретизированных данных, но способен выдавать результаты для любых точек в множестве \mathcal{D} , даже если эти точки не входят в изначальные наборы. Это делает оператор инвариантным к конкретной дискретизации, позволяя ему работать с различными разрешениями и сетками данных.

Архитектура нейронного оператора предполагает итеративную последовательность шагов, на каждом из которых происходит преобразование входных данных с использованием комбинации линейных и нелинейных операций. Изначально производится преобразование P начальных данных с помощью полносвязной НС в промежуточное представление $u_0(x)$ (пространство большей размерности):

$$u_0(x) = P(a(x)), \quad (7)$$

которое затем итеративно обновляется на каждом шаге $u_t \rightarrow u_{t+1}$ путем интегрального преобразования:

$$u_{t+1}(x) = \int_D \kappa(x, y, a(x), a(y); \varphi) \cdot u_t(y) \cdot dy + W \cdot u_t(x), \quad (8)$$

$$(\mathcal{K}(a; \varphi) \cdot u_t)(x) = \int_D \kappa(x, y, a(x), a(y); \varphi) \cdot u_t(y) \cdot dy, \quad (9)$$

где D – область интегрирования; $\kappa(x, y, a(x), a(y); \varphi)$ – функция ядра интегрального оператора, зависящая от точек x и y , входных данных $a(x)$ и $a(y)$ и обучаемых параметров φ ; W – переменная смещения; $\mathcal{K}(a; \varphi)$ – интегральный оператор; $(\mathcal{K}(a; \varphi) \cdot u_t)(x)$ – результат применения интегрального оператора к функции u_t в точке x ; $u_t(y)$ – значение функции u_t в точке y .

Обновления $u_t \rightarrow u_{t+1}$ включают применение интегрального оператора \mathcal{K} и нелинейной функции активации σ :

$$u_t(x) = (\mathcal{K}_1 \circ \sigma_1 \circ \dots \circ \sigma_1 \circ \mathcal{K}_0) \cdot u_0(x), \quad (10)$$

где $u_t(x)$ – функция, описывающая промежуточные изменения данных после прохождения через T слоев Фурье (рис. 2); \mathcal{K}_i – интегральные преобразования в последовательных слоях Фурье НС; \mathcal{K}_0 – начальное интегральное преобразование на первом слое Фурье; σ_i – нелинейные функции активации, применяемые после каждого слоя Фурье; σ_1 – первая функция активации, применяемая после начального интегрального преобразования; $u_0(x)$ – функция, описывающая промежуточные изменения данных после преобразования P и до начального интегрального преобразования на первом слое Фурье.

На последнем шаге промежуточное представление преобразуется в выходные данные $u(x) = Q(u_t(x))$ с помощью преобразования Q , которое отображает $u_t(x)$ в пространство выходных данных \mathcal{U} искомой размерности:

$$u(x) = Q(u_t(x)). \quad (11)$$

Функция ядра интегрального оператора $\kappa(x, y, a(x), a(y); \varphi)$ из уравнения (9) определяет, как каждая точка y входной функции u_t влияет на текущее состояние функции в точке x , а параметры φ – то, как функция ядра будет взаимодействовать с входными данными и текущим состоянием функции, чтобы задать новое состояние. В контексте МО эти параметры могут быть оптимизированы в процессе обучения для достижения наилучшего приближения исходной функции или оператора. Если убрать зависимость от функции a и положить $\kappa_\varphi(x, y) = \kappa_\varphi(x - y)$, то уравнение (9) преобразуется в оператор свертки, что увеличивает скорость процесса обучения модели.

Для вычисления по уравнению (9) параметризация κ_φ осуществляется путем быстрого преобразования Фурье (fast Fourier transform):



$$(\mathcal{H}(\varphi) \cdot u_t)(x) = \mathcal{F}^{-1}(R_\varphi \cdot (\mathcal{F} \cdot u_t)(x)), \quad \forall x \in D, \quad (12)$$

где $(\mathcal{H}(\varphi) \cdot u_t)(x)$ – интегральный оператор Фурье; \mathcal{F} и \mathcal{F}^{-1} – прямое и обратное преобразование Фурье; R_φ – тензор, полученный из преобразования Фурье функции ядра, параметризованный $\varphi \in \Theta_{\mathcal{H}}$; u_t – текущее состояние функции (рис. 16).

Для более эффективной аппроксимации функции интегрального ядра при преобразовании Фурье учитывается только несколько первых низкочастотных гармоник (гиперпараметр в FNO), что влияет на размерность тензора весов R_φ . При этом низкочастотные компоненты отражают общие тенденции и структуры в данных, которые меньше зависят от конкретного разрешения сетки, но несут большую часть информации. После обработки данных и обучения параметров модели выполняется обратное преобразование Фурье. Этот процесс обеспечивает восстановление информации о данных.

Переход в пространство Фурье позволяет обучаться на непрерывных функциях, вместо того чтобы ограничиваться дискретизированными векторами, тем самым повышается обобщающая способность модели и снижается ее чувствительность к изменениям в точности дискретизации, обеспечивая инвариантность к различным сеточным конфигурациям и количественному изменению входных параметров моделируемого объекта в широком диапазоне. Нейронный оператор Фурье, по оценке авторов [16], представляет собой первый метод на основе МО, успешно моделирующий турбулентные течения для уравнений Навье – Стокса. Кроме того, он на три порядка быстрее, чем традиционные модели.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

Обучение нейронного оператора осуществляется на основе выборок данных, содержащих динамику

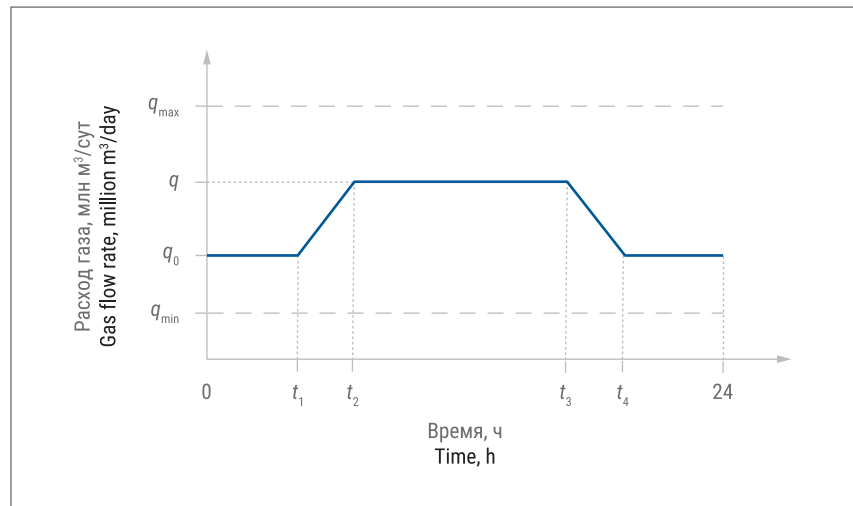


Рис. 2. Принцип формирования вариантов граничных условий по расходу газа на конце трубы (правое граничное условие)

Fig. 2. Principle of forming various options of boundary gas flow conditions at the end of the pipe (right boundary condition)

значений интересующих режимно-технологических параметров работы моделируемого объекта (в настоящей работе – газопровода). Обучающие выборки могут быть получены путем наблюдений за режимом работы реального газопровода или путем их синтеза, т.е. составления на основе результатов численного решения системы уравнений (1) – (3). Вычислительный эксперимент, результаты которого приведены в настоящей работе, предусматривает использование синтезированных обучающих выборок.

В качестве граничных условий выбран следующий вариант: $p(0, t)$, $q(L, t)$, $T(0, t)$, где $p(0, t)$ – левое граничное условие по p (в начале трубы); $q(L, t)$ – правое граничное условие по q (в конце трубы); $T(0, t)$ – левое граничное условие по T (задание правого граничного условия может привести к неустойчивости решения) [1].

В рамках решаемой задачи для расчета параметров газового потока (p и q) через уравнения (1) – (3) применялась неявная разностная схема. Для снижения вычислительной нагрузки использовался метод прямой-обратной прогонки [18].

В ходе численного решения были промоделированы различные сце-

нарии задания граничных условий при изменении температуры газа, диаметра и протяженности газопровода:

- левое граничное условие по p (в начале трубы) задавалось как линейная функция относительно t внутри диапазона от 6,0 до 7,5 МПа с разным коэффициентом наклона, температура постоянна;

- в конце трубы (правое граничное условие) расход до некоторого момента времени t_1 не меняется, затем до момента времени t_2 линейно растет или убывает в пределах до q_{\max} или q_{\min} соответственно, до момента времени t_3 поддерживается на плато и далее линейно возвращается к первоначальному значению к моменту времени t_4 , образуя профили-«шляпы» (рис. 2).

Значения q_{\max} и q_{\min} устанавливались в зависимости от левого граничного условия $p(0, t)$ в начале трубы на указанных временных промежутках в соответствии с формулой [19, с. 39]:

$$p_s^2 - p_f^2 = c \cdot \Delta \cdot \lambda \cdot \frac{T_{cp}}{z_{cp}} \cdot z_{cp} \cdot L \cdot D_{вн}^{-5} \cdot q^2, \quad (13)$$

где p_s и p_f – давление в начале и конце газопровода соответственно; Δ – относительная плотность газа по воздуху; z_{cp} – средний коэффициент сжимаемости газа;

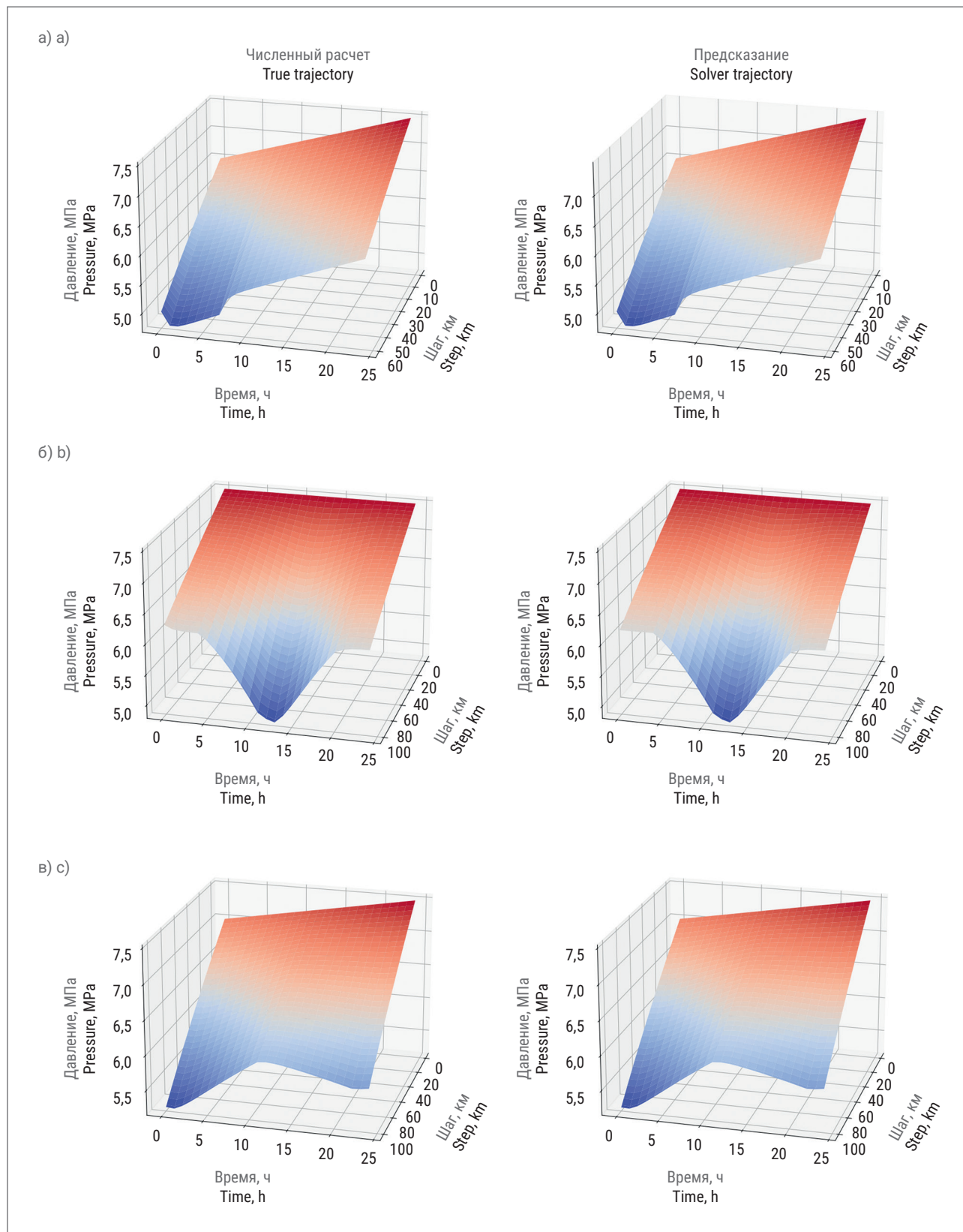


Рис. 3. 3D-отображение предсказания изменения давления газа в трубопроводе протяженностью: а) 60 км (диаметр – 1420 мм, толщина стенки – 16,5 мм) при температуре 293 К; б) 100 км (диаметр – 1220 мм, толщина стенки – 12,0 мм) при температуре 283 К; в) 100 км (диаметр – 1020 мм, толщина стенки – 12,0 мм) при температуре 303 К
Fig. 3. 3D representation of the predicted gas pressure change in the pipeline with the length of: а) 60 km (diameter – 1420 mm, wall thickness – 16.5 mm) at 293 K; б) 100 km (diameter – 1220 mm, wall thickness – 12.0 mm) at 283 K; в) 100 km (diameter – 1020 mm, wall thickness – 12.0 mm) at 303 K

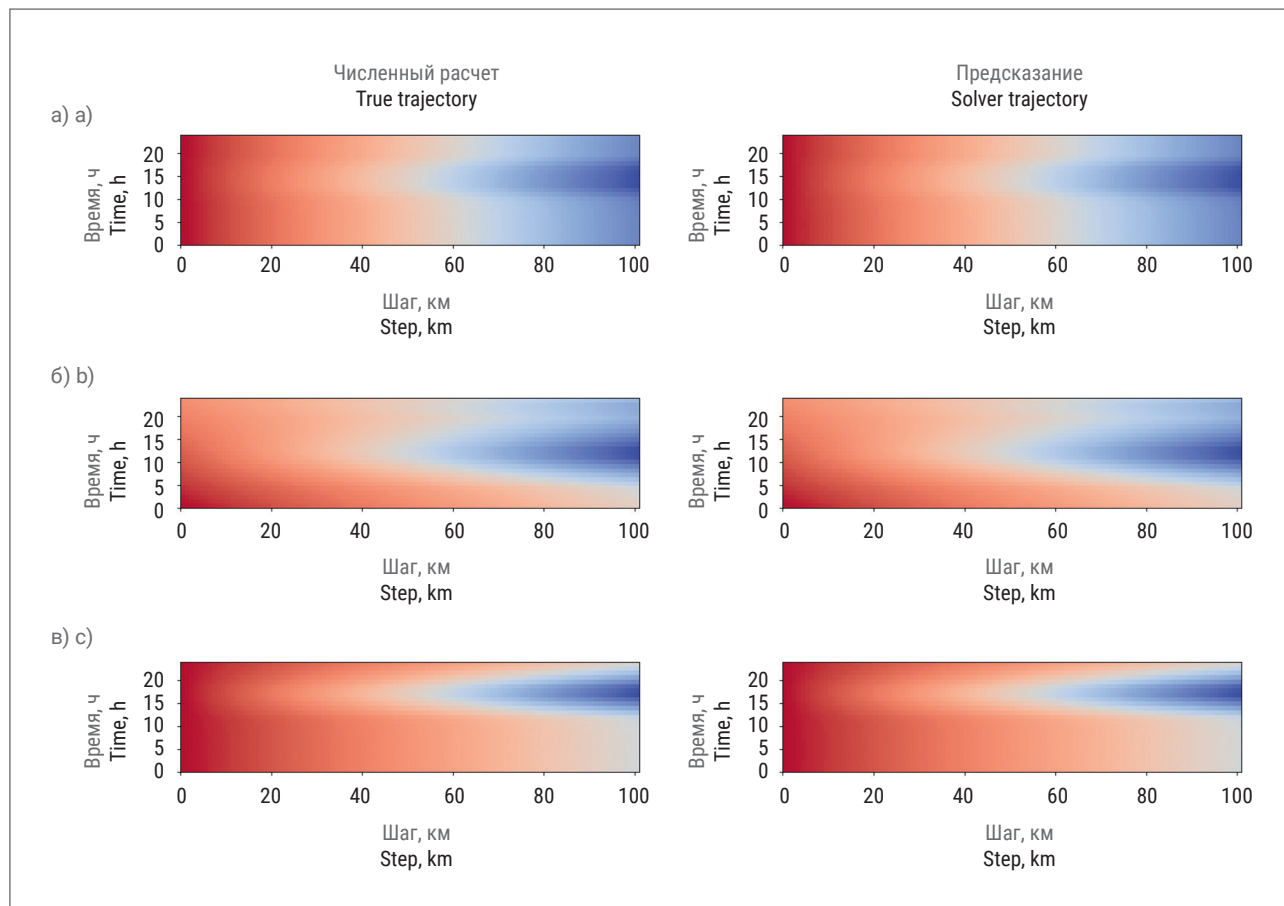


Рис. 4. 2D-отображение предсказания изменения давления газа в трубопроводе протяженностью: а) 100 км (диаметр – 1220 мм, толщина стенки – 12,0 мм) при температуре 303 К; б) 60 км (диаметр – 1020 мм, толщина стенки – 12,0 мм) при температуре 283 К; в) 100 км (диаметр – 1420 мм, толщина стенки – 16,5 мм) при температуре 293 К
Fig. 4. 2D representation of the predicted gas pressure change in the pipeline with the length of: а) 100 km (diameter – 1220 mm, wall thickness – 12.0 mm) at 303 K; б) 60 km (diameter – 1020 mm, wall thickness – 12.0 mm) at 283 K; в) 100 km (diameter – 1420 mm, wall thickness – 16.5 mm) at 293 K

L – протяженность газопровода; $c = 9,0553 \cdot 10^{-5}$ (если q измеряется в млн м³/сут, p – в МПа, L – в км). Значение p_r задавалось из расчета уменьшения давления газа в конце трубы: для случая q_{\max} – в 1,5 раза, для q_{\min} – в 1,2 раза.

Таким образом, было взято декартово произведение всевозможных комбинаций, часть из которых отброшена в соответствии с физическими ограничениями (13). Проведена дискретизация сетки по времени и пространству.

В рамках работы был сформирован фреймворк на языке программирования Python (версия 3.10.9) для подготовки набора сценариев, моделирования численного решения и последующего МО нейронных операторов Фурье.

В результате численного решения получен набор данных, включающий рассчитанные массивы p и q , а также массив, содержащий граничные условия, диаметр и протяженность газопровода. Объем обучающей выборки составил всего более 300 тыс. ед. обучающих примеров, каждый из которых содержал динамику режимно-технологических параметров, характеризующих нестационарный режим течения газа по газопроводу. Эти данные в дальнейшем использовались для обучения нейронных операторов и оценки полученных на его основе предсказаний параметров модели.

Исходные данные для обучения нейронного оператора Фурье, полученные при решении системы уравнений (1) – (3) численными

методами, были случайно разделены на обучающую (80 %), валидационную (10 %) и тестовую (10 %) выборки.

Выполнена процедура вычисления интегрального оператора, включающая инициализацию слоев, на которых происходит выполнение быстрого преобразования Фурье, обучение модели и формирование тензора весовых коэффициентов R_{ϕ} , а также обратное преобразование Фурье (см. рис. 16). В зависимости от набора данных для них задавалось количество входных-выходных каналов и членов ряда Фурье, используемых для приближенного представления входной функции. После расчета интегрального ядра осуществлялось построение НС, на входе которой применялся линейный слой, увеличивающий

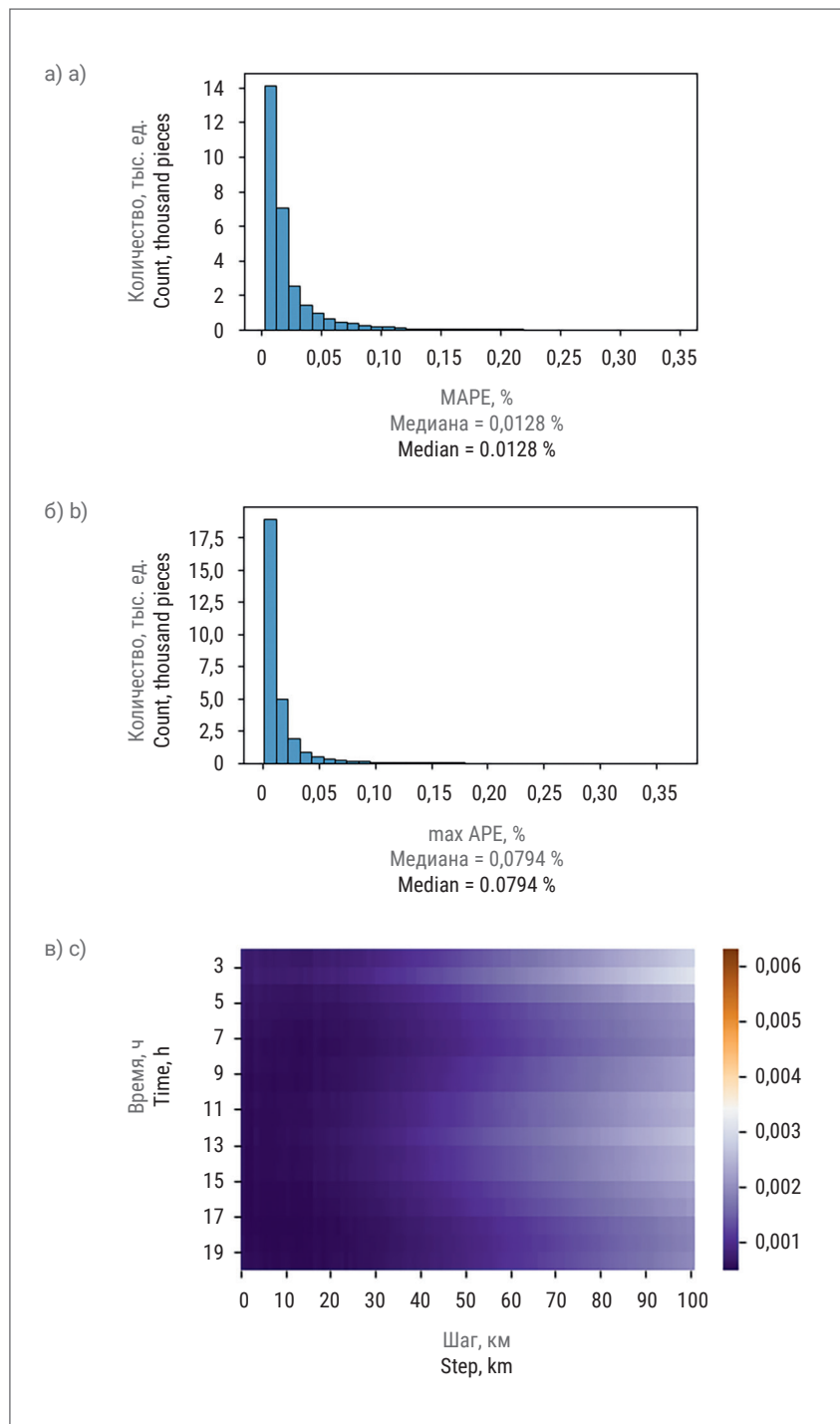


Рис. 5. Результаты оценки предсказания давления газа в газопроводе:
а) распределение средней абсолютной процентной ошибки (MAPE);
б) распределение максимума абсолютной процентной ошибки (max APE);
в) усредненная абсолютная разница «истинных» и предсказанных значений, МПа
Fig. 5. Assessment of predicted gas pressure in the pipeline: a) mean absolute percentage error (MAPE) distribution; b) maximum absolute percentage error (max APE) distribution; c) average of absolute difference between the true and predicted values, MPa

выходных данных, и линейный слой, выполняющий окончательную проекцию на пространственно-временную область. При обучении модели в качестве оптимизатора использовался оптимизатор AdamW (с L2-регуляризацией), планировщика – ступенчатый планировщик скорости обучения MultiStepLR, функции потерь – среднеквадратичная ошибка (MSELoss), которая измеряет среднее значение квадрата разности между предсказанными и «истинными» значениями. Требование к НС – возможность прямого вывода решения на основе начальных и (или) граничных условий.

На рис. 3 приведено 3D-отображение результатов предсказания давления газа в газопроводе для нескольких случайных примеров сценариев при разных температурах газа, а также диаметрах и протяженности трубы. Слева представлены результаты численного расчета для примера из тестовой выборки, а справа – моделирования (предсказания FNO). Видно, что предсказание осуществляется с высокой степенью точности.

На рис. 4 показано 2D-отображение результатов предсказания давления газа в газопроводе для нескольких случайных примеров сценариев при разных температурах газа, а также диаметрах и протяженности трубы. Слева по-прежнему представлены результаты численного расчета для примера из тестовой выборки, а справа – предсказания.

На рис. 5а и 5б приведены распределения средней абсолютной процентной ошибки (MAPE, от англ. mean absolute percentage error) и максимума абсолютной процентной ошибки (max APE, от англ. maximum absolute percentage error) между предсказанными и «истинными» значениями давления газа в газопроводе для всех сценариев тестовой выборки, а на рис. 5в – усредненная абсолютная разница в каждом из узлов пространственно-временной сетки.

размерность входных данных, далее следовали четыре сверточных слоя интегрального оператора Фурье, четыре полносвязных

линейных слоя с функцией активации GELU (от англ. Gaussian Error Linear Unit), на выходе – линейный слой, понижающий размерность

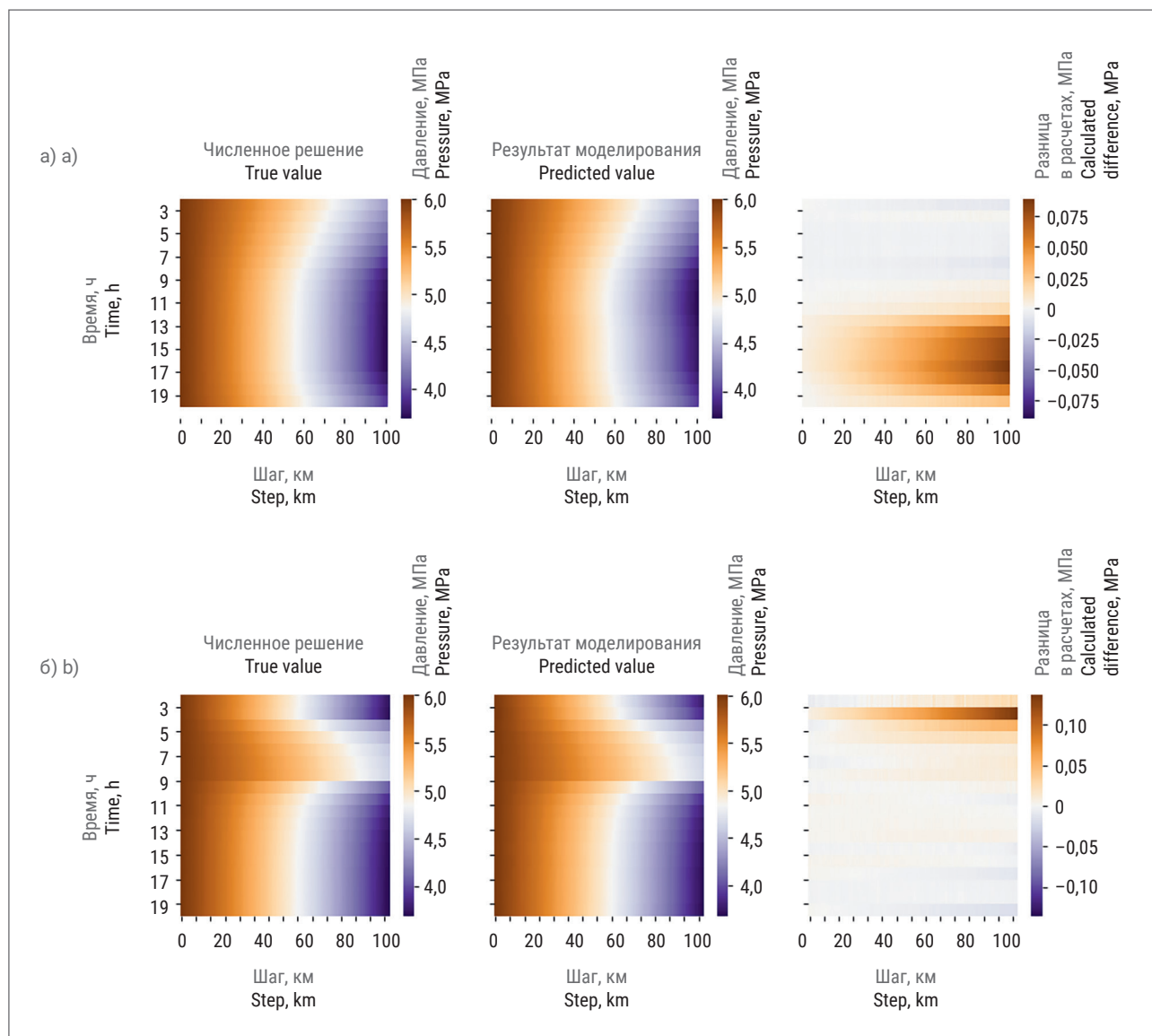


Рис. 6. Абсолютная разница между предсказанными и «истинными» значениями давления газа: а) сценарий с наибольшей абсолютной процентной ошибкой ($MAPE \approx 0,35\%$); б) сценарий с наибольшим максимумом абсолютной процентной ошибки ($\max APE \approx 3,68\%$)
Fig. 6. Absolute difference between predicted and true gas pressure values: a) scenario with the largest mean absolute percentage error ($MAPE \approx 0.35\%$); b) scenario with the highest maximum absolute percentage error ($\max APE \approx 3.68\%$)

Результаты моделирования одного из типовых сценариев (труба протяженностью 100 км, диаметром 1020 мм, толщиной стенки 12,0 мм) приведены на рис. 6. Видно, что совпадение «истинных» значений (результат численного решения) со значениями, предсказанными нейронным оператором, весьма точное (рис. 7). Аналогичный вывод сделан для подавляющего большинства исследованных тестовых режимов (т.е. тех режимов, которые нейронный оператор «не видел» при обучении).

Полученные результаты показывают, что предсказание осуществляется с высокой степенью точности. Подавляющее большинство предсказанных сценариев имеют значения $\max APE$, не превышающие 2 %, при этом все сценарии укладываются в диапазон до 1 % по MAPE. Таким образом, модель на основе FNO способна осуществлять предсказания не только на исходном наборе параметров моделируемого объекта, но и обобщать решение для нового набора параметров. Кроме того, отобра-

жение между бесконечномерными пространствами функций посредством нейронного оператора позволяет предсказывать решение для разной степени дискретизации пространственно-временной области, что также подтверждается проведенными исследованиями. В таблице собраны результаты оценки скорости обучения/предсказания модели FNO в зависимости от используемого процессора (CPU или GPU) и исходного численного решения уравнений газовой динамики (1) – (3), описывающих

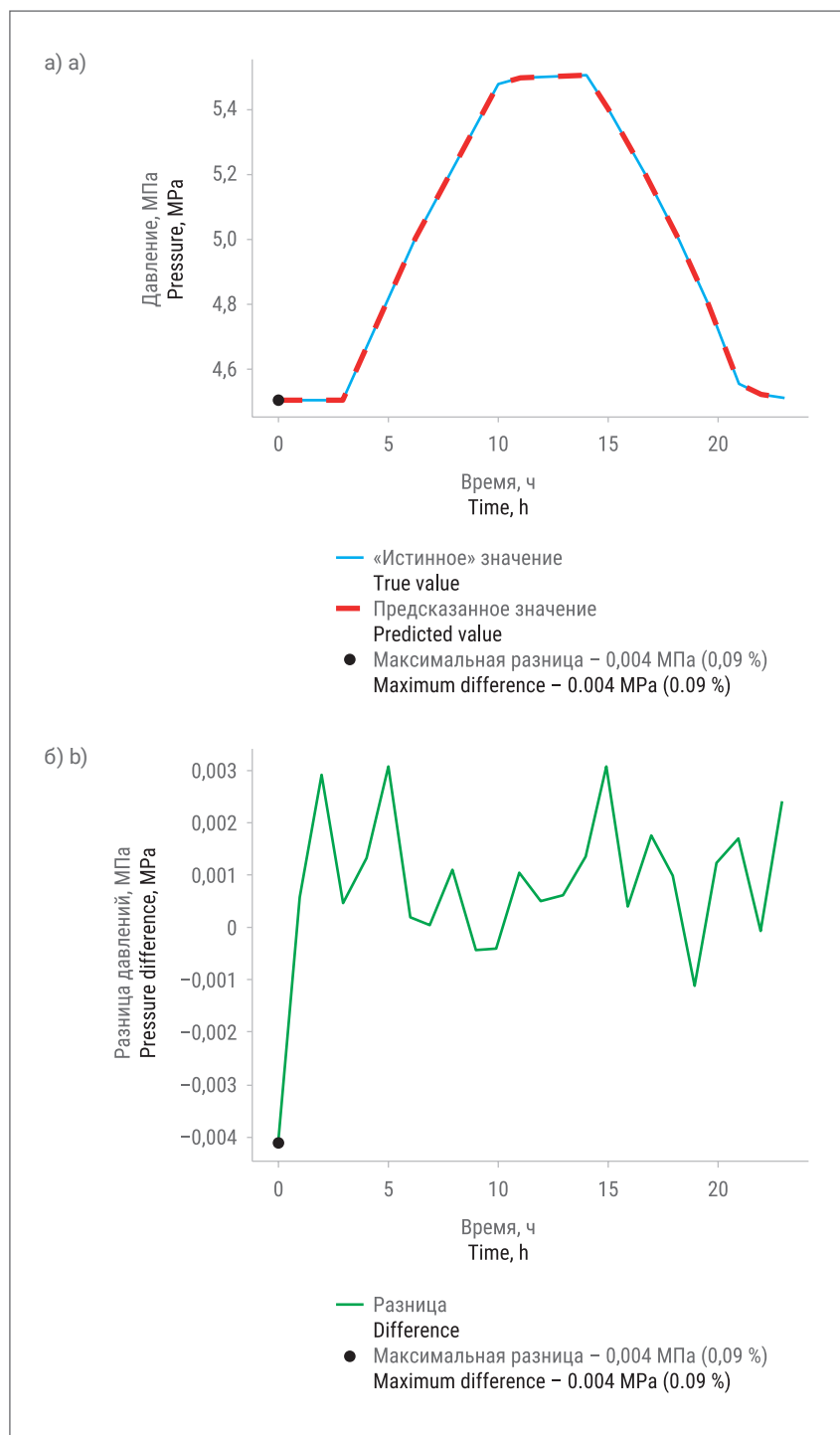


Рис. 7. Результат моделирования значений давления газа в конце трубы: а) «истинные» и предсказанные значения; б) отклонение предсказанного значения от «истинного»
Fig. 7. Result of gas pressure modeling at the end of the pipe: a) true and predicted values; b) deviation of the predicted value from the true value

математическую модель транспортировки газа по магистральному газопроводу.

В рамках исследования также были проанализированы возможность использования модели

DeerONet для прогнозирования давления и объемного расхода газа и ее обобщающая способность. Модель показала хорошие результаты для линейно меняющихся граничных условий. Однако

при кусочно-линейной зависимости давления от времени средний показатель качества предсказания параметра на всей координатной сетке для выбранного примера существенно ухудшился. Максимальное значение MAPE в отдельных случаях превышало 10 %. Проведенные многовариантные расчеты показали, что модель DeerONet обладает более низкой обобщающей способностью, чем FNO.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Применение нейросетевых подходов, основанных на использовании нейронных операторов, связано с изучением зависимостей между входными и выходными данными на основе обучающей выборки. В этом случае обученная модель может не только на порядки быстрее выдавать решение, но и сохранять инвариантность к изменению степени дискретизации пространственно-временной сетки. Для применения таких методов нужен набор исходных данных для обучения, который можно получить на основе численного решения ДУ, описывающих математические модели объектов ГТС.

Среди нейронных операторов, подходящих для решения задачи расчета параметров газового потока по объектам ГТС, рассмотрены DeerONet и FNO. Как показали результаты исследований, DeerONet испытывает трудности с обобщением решения для новых наборов данных (параметров моделируемых газопроводов). При этом предсказания модели с применением нейронного оператора Фурье осуществляются с высокой степенью точности – максимальная ошибка для подавляющего большинства рассмотренных сценариев не превышает 2 % с учетом изменения значений параметров моделируемого объекта на новые, которые модель «не видела» в процессе обучения. Вместе с тем, отдельные редкие сценарии характеризуются повышенной ошибкой. Для ее снижения требуется тон-



Результаты оценки скорости обучения/предсказания модели нейронного оператора Фурье (FNO) и численного решения (FDM)
Results of the learning/prediction rate evaluation by the Fourier neural operator (FNO) and numerical solution (FDM)

Время Time	Модель Model				
	FNO-обучение на CPU Intel Core i9-11900KF FNO learning on Intel Core i9-11900KF CPU	FNO-обучение на GPU Nvidia RTX 3060TI FNO learning on Nvidia RTX 3060TI GPU	FNO-обучение на GPU NVIDIA A100 FNO learning on NVIDIA A100 GPU	FNO-предсказание на GPU (один сценарий) FNO prediction on GPU (one scenario)	Численное решение FDM (один сценарий) FDM numerical solution (one scenario)
Эпохи (среднее), с Epoch (average), s	109	33,6	3,56	–	–
Общее, с Common, s	8720	2690,0	534,00	0,0005*	0,015

* В случае необходимости одновременного проведения большого числа расчетов (например, при моделировании нестационарного режима работы крупной газотранспортной системы, решении задачи оптимизации режима транспорта газа и др.) среднее время моделирования одного сценария может быть дополнительно снижено на несколько порядков за счет использования нейронного оператора в пакетном режиме.
* Where large amount of simultaneous calculations is required (for example, to model non-stationary operating mode of a large gas transmission system, to optimize gas transmission mode and etc.), an average modeling time of one scenario can be further reduced by several orders through the use of a neural operator in batch mode.

кая настройка FNO. Дальнейшие исследования связаны с повышением обобщающей способности модели и адаптацией нейронных операторов для моделирования более крупных фрагментов ГТС,

включающих газопроводы и компрессорные станции.
Полученные в работе результаты показывают перспективность применения нейронных операторов для моделирования нестационар-

ных режимов работы ГТС и возможность получать робастные решения за значительно меньшее время в сравнении с широко используемыми сейчас численными методами. ■

ТРУБЫ И ТРУБОПРОВОДНАЯ АРМАТУРА

бесшовные

сварные



Специализированные
решения под ваш проект



Поставки
по всей России



Наши партнеры:

ПАО «НОВАТЭК»
ПАО «ГАЗПРОМ»
ПАО «НК «РОСНЕФТЬ»



ЭКОПРОМ
ваш надёжный поставщик

+7 (921) 992-39-59
ekoprome@yandex.ru

ЛИТЕРАТУРА

1. Сарданашвили С.А. Расчетные методы и алгоритмы (трубопроводный транспорт газа). М.: РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина, 2005. 577 с. EDN: YKXYKD.
2. СТО Газпром 2-3.5-051-2006. Нормы технологического проектирования магистральных газопроводов. М.: ИРЦ Газпром, 2006. 196 с.
3. Mazumder S. Numerical methods for partial differential equations: Finite difference and finite volume methods. New York, NY, USA: Academic Press, 2015. 484 p.
4. Strelow E.L., Gerisch A., Lang J., Pfetsch M.E. Physics informed neural networks: A case study for gas transport problems // J. Comput. Phys. 2023. Vol. 481. Article ID 112041. DOI: 10.1016/j.jcp.2023.112041. EDN: RXJJWR.
5. Li L., Li Y., Du Q., et al. ReF-nets: Physics-informed neural network for Reynolds equation of gas bearing // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 2022. Vol. 391. Article ID 114524. DOI: 10.1016/j.cma.2021.114524. EDN: JBVXGY.
6. Zhang C., Shafieezadeh A. Nested physics-informed neural network for analysis of transient flows in natural gas pipelines // Engineering Applications of Artificial Intelligence. 2023. Vol. 122. Article ID 106073. DOI: 10.1016/j.engappai.2023.106073. EDN: NNMAMN.
7. Tucny J.M., Durve M., Montessori A., Succi S. Learning of viscosity functions in rarefied gas flows with physics-informed neural networks // Comput. Fluids. 2024. Vol. 269. Article ID 106114. DOI: 10.1016/j.compfluid.2023.106114.
8. 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 // J. Comput. Phys. 2019. Vol. 378. P. 686–707. DOI: 10.1016/j.jcp.2018.10.045.
9. Zeng Q., Kothari Y., Bryngelson S.H., Schäfer F. Competitive physics informed networks // arXiv: сайт. URL: <https://arxiv.org/abs/2204.11144> (дата обращения: 23.04.2024).
10. Nguyen-Thanh V.M., Zhuang X., Rabczuk T. A deep energy method for finite deformation hyperelasticity // European Journal of Mechanics – A/Solids. 2020. Vol. 80. Article ID 103874. DOI: 10.1016/j.euromechsol.2019.103874.
11. Fuhg J.N., Bouklas N. The mixed deep energy method for resolving concentration features in finite strain hyperelasticity // J. Comput. Phys. 2022. Vol. 451. Article ID 110839. DOI: 10.1016/j.jcp.2021.110839. EDN: CCXXBN.
12. Hildebrand S., Klinge S. Comparison of neural fem and neural operator methods for applications in solid mechanics // arXiv: сайт. URL: <https://arxiv.org/abs/2307.02494> (дата обращения: 23.04.2024).
13. Bhatnagar S., Afshar Y., Pan S., et al. Prediction of aerodynamic flow fields using convolutional neural networks // Computational Mechanics. 2019. Vol. 64, No. 2. P. 525–545. DOI: 10.1007/s00466-019-01740-0. EDN: SCSRDE.
14. Kovachki N., Li Z., Liu B., et al. Neural operator: Learning maps between function spaces // arXiv: сайт. URL: <https://arxiv.org/abs/2108.08481> (дата обращения: 23.04.2024).
15. Lu L., Jin P., Karniadakis G.E. DeepONet: Learning nonlinear operators for identifying differential equations based on the universal approximation theorem of operators // arXiv: сайт. URL: <https://arxiv.org/abs/1910.03193> (дата обращения: 23.04.2024).
16. Li Z., Kovachki N., Azizzadenesheli K., et al. Fourier neural operator for parametric partial differential equations // arXiv: сайт. URL: <https://arxiv.org/abs/2010.08895> (дата обращения: 23.04.2024).
17. Jiang C., Kashinath K., Prabhat, Marcus M. Enforcing physical constraints in CNNs through differentiable PDE layer // OpenReview: сайт. URL: <https://openreview.net/forum?id=q2noHUqMkK> (дата обращения: 23.04.2024).
18. Самарский А.А. Теория разностных схем. 3-е изд., испр. М.: Наука, 1989. 616 с.
19. Сухарев М.Г., Самойлов Р.В. Анализ и управление стационарными и нестационарными режимами транспорта газа. М.: РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина, 2016. 399 с.

REFERENCES

- (1) Sardanashevili S.A. *Computing Methods and Algorithms (Gas Pipeline Transportation)*. Moscow: Gubkin University; 2005. (In Russian)
- (2) OAO Gazprom (open joint stock company). *STO Gazprom 2-3.5-051-2006 (company standard). Norms of technological design of main gas pipelines*. Moscow: Gas Industry Information and Advertising Center; 2006. (In Russian)
- (3) Mazumder S. *Numerical Methods for Partial Differential Equations: Finite Difference and Finite Volume Methods*. New York, NY, USA: Academic Press; 2015.
- (4) Strelow EL, Gerisch A, Lang J, Pfetsch ME. Physics informed neural networks: A case study for gas transport problems. *J. Comput. Phys.* 2023; 481: article ID 112041. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2023.112041>.
- (5) Li L, Li Y, Du Q, Liu T, Xie Y. ReF-nets: Physics-informed neural network for Reynolds equation of gas bearing. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2022; 391: article ID 114524. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2021.114524>.
- (6) Zhang C, Shafieezadeh A. Nested physics-informed neural network for analysis of transient flows in natural gas pipelines. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*. 2023; 122: article ID 106073. <https://doi.org/10.1016/j.engappai.2023.106073>.
- (7) Tucny JM, Durve M, Montessori A, Succi S. Learning of viscosity functions in rarefied gas flows with physics-informed neural networks. *Comput. Fluids*. 2024; 269: article ID 106114. <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2023.106114>.
- (8) Raissi M, Perdikaris P, Karniadakis GE. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *J. Comput. Phys.* 2019; 378: 686–707. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>.
- (9) Zeng Q, Kothari Y, Bryngelson SH, Schäfer F. *Competitive physics informed networks*. Available from: <https://arxiv.org/abs/2204.11144> [Accessed: 23 April 2024].
- (10) Nguyen-Thanh VM, Zhuang X, Rabczuk T. A deep energy method for finite deformation hyperelasticity. *European Journal of Mechanics – A/Solids*. 2020; 80: article ID 103874. <https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2019.103874>.
- (11) Fuhg JN, Bouklas N. The mixed deep energy method for resolving concentration features in finite strain hyperelasticity. *J. Comput. Phys.* 2022; 451: article ID 110839. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2021.110839>.
- (12) Hildebrand S, Klinge S. *Comparison of neural fem and neural operator methods for applications in solid mechanics*. Available from: <https://arxiv.org/abs/2307.02494> [Accessed: 23 April 2024].
- (13) Bhatnagar S, Afshar Y, Pan S, Duraisamy K, Kaushik S. Prediction of aerodynamic flow fields using convolutional neural networks. *Computational Mechanics*. 2019; 64(2): 525–545. <https://doi.org/10.1007/s00466-019-01740-0>.
- (14) Kovachki N, Li Z, Liu B, Azizzadenesheli K, Bhattacharya K, Stuart A, et al. *Neural operator: Learning maps between function spaces*. Available from: <https://arxiv.org/abs/2108.08481> [Accessed: 23 April 2024].
- (15) Lu L, Jin P, Karniadakis GE. *DeepONet: Learning nonlinear operators for identifying differential equations based on the universal approximation theorem of operators*. Available from: <https://arxiv.org/abs/1910.03193> [Accessed: 23 April 2024].
- (16) Li Z, Kovachki N, Azizzadenesheli K, Liu B, Bhattacharya K, Stuart A, et al. *Fourier neural operator for parametric partial differential equations*. Available from: <https://arxiv.org/abs/2010.08895> [Accessed: 23 April 2024].
- (17) Jiang C, Kashinath K, Prabhat, Marcus M. *Enforcing physical constraints in CNNs through differentiable PDE layer*. Available from: <https://openreview.net/forum?id=q2noHUqMkK> [Accessed: 23 April 2024].
- (18) Samarskii AA. *Theory of Difference Schemes*. 3rd ed. Moscow: Science [Nauka]; 1989. (In Russian)
- (19) Sukharev MG, Samoylov RV. *Analysis and Control of Stationary and Non-Stationary Gas Transport Modes*. Moscow: Gubkin University; 2016. (In Russian)