

PIKANs: Ein physikinformierter Ansatz des Maschinellen Lernens zur Analyse von Strömungsdynamik

Aufgabenstellung für eine wissenschaftliche
Projektarbeit/Masterarbeit

Start: Ab sofort

Betreuer: Prof. Robert J. Flassig

robert.flassig@th-brandenburg.de

20. November 2024

1 Hintergrund

Die Navier-Stokes-Gleichungen (NSE) bilden das Fundament der Strömungsmechanik und stellen aufgrund ihrer Nichtlinearität und der komplexen Turbulenzstrukturen bei hohen Reynoldszahlen eine zentrale Herausforderung dar. Die Lösung dieser Gleichungen ist nicht nur rechnerisch aufwendig, sondern auch stark abhängig von geometrischen Eigenschaften wie Hindernisformen sowie physikalischen Parametern wie Temperatur und Druck. Diese Größen beeinflussen das Strömungsverhalten maßgeblich. Insbesondere im Aeroengineering, beispielsweise bei der Optimierung von Tragflächen oder Turbomaschinen, ist ein tiefgreifendes physikalisches Verständnis dieser Einflüsse essenziell.

Das Verhalten eines Strömungssystems kann abstrakt als vektorwertige Funktion

$$\mathbf{f} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$$

betrachtet werden. Hierbei beschreibt \mathbb{R}^n den Eingaberaum, welcher geometrische Eigenschaften (z. B. Abmessungen oder Formen) sowie physikalische Größen (z. B. Reynoldszahl, Druck, Temperatur) umfasst, während \mathbb{R}^m den Ausgaberaum darstellt, welcher durch die Strömungsgrößen wie Geschwindigkeitsvektoren, Druckfelder und Temperaturverteilungen definiert ist. Die Funktion \mathbf{f} modelliert somit die Abbildung zwischen Eingabeparametern und Strömungsfeldern.

1.1 Navier-Stokes-Gleichungen als Funktion

Die Navier-Stokes-Gleichungen beschreiben die Bewegung von Fluiden und können in ihrer grundlegenden Form als Funktion \mathbf{f} aufgefasst werden, die Eingabedaten (Geometrie, physikalische Parameter) mit den zugehörigen Strömungsfeldern verknüpft. Formal lassen sich die NSE wie folgt schreiben:

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{f},$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0,$$

wobei:

- $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^3$: Geschwindigkeitsvektor des Strömungsfelds,
- $p \in \mathbb{R}$: Druck,
- ρ : Dichte,
- μ : dynamische Viskosität,
- \mathbf{f} : externe Kräfte (z. B. Gravitation).

Das Lösen der Navier-Stokes-Gleichungen entspricht somit der numerischen Approximation der Funktion \mathbf{f} . Diese Funktion bildet eine Eingabe $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, bestehend aus Geometrie- und Parameterdaten, auf eine Ausgabe $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$ ab, welche die Strömungsgrößen wie Geschwindigkeit und Druck umfasst.

1.2 Bedeutung der Funktion \mathbf{f}

Die Funktion \mathbf{f} hat zwei zentrale Anwendungsbereiche:

1. **Optimierung von Ingenieurssystemen:** Die Abbildung \mathbf{f} ermöglicht es, Designentscheidungen wie Geometrieänderungen oder Materialanpassungen effizient zu bewerten. Dadurch können beispielsweise Wirkungsgrade von Tragflächen oder Turbomaschinen optimiert werden.
2. **Beschleunigung von Simulationen:** Durch eine Approximation von \mathbf{f} mit datengetriebenen Ansätzen (z. B. neuronale Netzwerke) können die rechenintensiven Lösungen der NSE erheblich beschleunigt werden.

Ein besseres physikalisches Verständnis der Abbildung \mathbf{f} eröffnet zudem neue Möglichkeiten der **Erklärbarkeit**. Ingenieure können nicht nur die Ergebnisse nutzen, sondern auch nachvollziehen, wie physikalische und geometrische Parameter die Strömung beeinflussen. Dies führt zu einem tieferen Verständnis der zugrunde liegenden Mechanismen und verbessert die Zuverlässigkeit von Designentscheidungen.

KANs (Kolmogorov Arnold Networks) erlauben es die Abbildung \mathbf{f} effizient zu approximieren (teilweise auch zu identifizieren). Sie stellen somit eine vielversprechende Modellarchitektur dar, die auf das Verständnis und die Erklärbarkeit physikalischer Systeme abzielt. In Kombination mit der Methode der Physically-Informed Neural Networks (PINNs) sollen diese Netzwerke genutzt werden, um physikalische Modelle, wie die stationären Navier-Stokes-Gleichungen (NSE), zu lösen und dabei Einblicke in die Abhängigkeit des Strömungsfelds von Designparametern und Randbedingungen zu gewinnen. Physically-Informed Kolmogorov-Arnold-Netzwerke (PIKANs) bieten also eine neue Möglichkeit, physikalische Prinzipien direkt in maschinelle Lernmodelle zu integrieren. Ziel dieser Arbeit ist es, mögliche Anwendungen von PIKANs zu identifizieren und zu untersuchen, ob die Einflüsse geometrischer und physikalischer Parameter auf die Strömungsdynamik in einem physikalisch erklärbaren Kontext dargestellt werden können.

1.3 Kolmogorov-Arnold-Netzwerke (KANs)

Kolmogorov-Arnold-Netzwerke (KANs) sind eine vielversprechende Alternative zu Multi-Layer-Perceptrons (MLPs) und zeichnen sich durch eine solide mathematische Grundlage aus. Während MLPs als eine Art Feedforward-Neuronale Netzwerke auf dem universellen Approximationssatz basieren, beruhen KANs auf dem Kolmogorov-Arnold-Darstellungssatz. Ein wesentlicher struktureller Unterschied besteht darin, dass KANs Aktivierungsfunktionen auf den Kanten des Netzwerks anwenden, während MLPs diese in den Knoten verwenden, siehe Abbildung 1. Dieser Unterschied führt häufig dazu, dass KANs sowohl in der Modellgenauigkeit als auch in der Interpretierbarkeit besser abschneiden als MLPs [1].

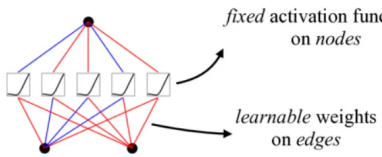
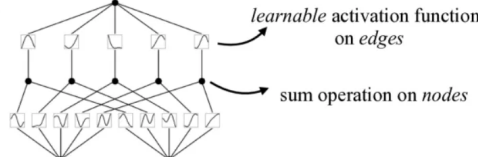
Model	Multi-Layer Perceptron (MLP)	Kolmogorov-Arnold Network (KAN)
Theorem	Universal Approximation Theorem	Kolmogorov-Arnold Representation Theorem
Formula (Shallow)	$f(\mathbf{x}) \approx \sum_{i=1}^{N(e)} a_i \sigma(\mathbf{w}_i \cdot \mathbf{x} + b_i)$	$f(\mathbf{x}) = \sum_{q=1}^{2n+1} \Phi_q \left(\sum_{p=1}^n \phi_{q,p}(x_p) \right)$
Model (Shallow)	<p>(a)</p> 	<p>(b)</p> 

Abbildung 1: Unterschied zwischen klassischen MLP Netzwerken und KANs. Credit: [1]

1.3.1 Mathematische Grundlage

Die Struktur von KANs leitet sich aus dem Kolmogorov-Arnold-Darstellungssatz ab, der eine multivariate stetige Funktion als Superposition von Funktionen einer einzigen Variablen ausdrückt. Für eine glatte Funktion $\mathbf{f} : [0, 1]^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ lautet die Darstellung in einem KAN:

$$\mathbf{f}(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{q=0}^{2n} \Phi_q \left(\sum_{p=1}^n \phi_{q,p}(x_p) \right), \quad (1)$$

wobei:

- $\phi_{q,p}(x_p)$ univariate Funktionen sind, die auf jede Eingabevariable x_p angewendet werden,
- Φ_q äußere Funktionen sind, die die Ergebnisse dieser univariaten Funktionen kombinieren.

Diese Struktur ermöglicht es dem Netzwerk, komplexe Beziehungen in den Daten effektiv zu zerlegen, indem Aktivierungsfunktionen auf den Kanten verwendet werden. Dies verbessert sowohl die Interpretierbarkeit als auch die Genauigkeit des Modells.

1.3.2 Allgemeine Darstellung

Der Kolmogorov-Arnold-Darstellungssatz lässt sich auf Funktionen $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ verallgemeinern, bei denen f stetig ist und einen Vektor vom n -dimensionalen Raum in den m -dimensionalen Raum abbildet. Eine solche Funktion kann dargestellt werden als:

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \left(\sum_{q=0}^{2n} \Phi_{1q} \left(\sum_{p=1}^n \phi_{1q,p}(x_p) \right), \dots, \sum_{q=0}^{2n} \Phi_{mq} \left(\sum_{p=1}^n \phi_{mq,p}(x_p) \right) \right),$$

wobei:

- $\Phi_{iq} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ stetige Funktionen für jede Ausgabedimension $i = 1, \dots, m$ sind,
- $\phi_{iq,p} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ stetige univariate Funktionen für jede Eingabevariable x_p und jede Ausgabedimension i sind.

1.3.3 Vorteile von PINNs bzw. PIKANs

PINNs bieten mehrere Vorteile im Vergleich zu traditionellen numerischen Ansätzen:

- Sie benötigen keine expliziten diskreten Gitterpunkte oder numerischen Löser.
- Sie sind flexibel und können für komplexe Geometrien und Parameterbereiche angepasst werden.
- Die Integration physikalischer Gesetzmäßigkeiten gewährleistet konsistente und erklärbare Modelle.
- Die KAN Topologie erlaubt zusätzlich, analytische Gleichungen zwischen Eingangs- und Ausgangsgrößen und damit Gesetzmäßigkeiten vernetzt von bloßen Sensitivitäten zu identifizieren.

Als Basis können neben einfachen Neuronalen Netzen (u.a. MLPs) eben auch KANs genutzt werden. Weitere Details gibt es hier [1].

1.4 Anwendung: Inkompressible 2D Strömung um ein NACA-Profil

Physics-Informed Neural Networks (PINNs) sind eine Klasse von neuronalen Netzwerken, die physikalische Gesetzmäßigkeiten direkt in den Lernprozess integrieren. Dies geschieht durch die Einbindung von partiellen Differentialgleichungen (PDEs) wie den Navier-Stokes-Gleichungen in die Verlustfunktion des Netzwerks. Auf diese Weise können PINNs physikalische Systeme modellieren, ohne auf große Mengen an Trainingsdaten angewiesen zu sein, und gleichzeitig physikalisch konsistente Lösungen liefern.

Um ein Physics-Informed Neural Network (PINN) zu trainieren, wird die Lösung der inkompressiblen stationären Navier-Stokes-Gleichungen für ein Strömungsfeld angestrebt. Das zugrunde liegende Modell basiert auf einem KAN, das zur Approximation des Strömungsfelds verwendet wird. Dieses Netzwerk wird auf einem Gitter trainiert, das die räumlichen Koordinaten des betrachteten Strömungsbereichs umfasst. Die Verlustfunktion des PINN (dann eben PIKAN) kombiniert verschiedene physikalische Gesetzmäßigkeiten und Randbedingungen, um eine konsistente und physikalisch plausible Lösung sicherzustellen. Die Hauptkomponenten der Verlustfunktion sind:

- **Kontinuitätsgleichung:** Die Divergenzfreiheit der Strömung wird durch die Erhaltung der Masse beschrieben.
- **Impulsgleichungen:** Die Navier-Stokes-Gleichungen stellen sicher, dass die Bewegungsgleichungen für jede Komponente der Geschwindigkeit erfüllt sind.
- **Randbedingungen:** Zusätzlich werden Randbedingungen berücksichtigt, wie zum Beispiel:
 - *No-Slip-Bedingung:* Die Geschwindigkeit ist an den Wänden null.
 - *Inlet-Bedingung:* Am Eintritt wird eine feste Geschwindigkeit vorgegeben.
 - *Outlet-Bedingung:* Der Druck am Ausgang wird auf null gesetzt.

Die Verlustfunktion kombiniert diese physikalischen Residuen und Randbedingungen in einer Gesamtfehlermetrik, die während des Trainings minimiert wird.

1.4.1 Trainingsprozess

Der Trainingsprozess für das PIKAN erfolgt wie folgt:

1. **Definition des Modells:** Das KAN wird mit spezifischen Parametern (z. B. Netzwerkbreite und -höhe) definiert.
2. **Berechnung der Residuen=Wie gut ist die Physik abgebildet:** Die Residuen der Navier-Stokes-Gleichungen werden mit Hilfe von Jacobi- und Hesse-Matrizen (Batch-Gradientenberechnungen) bestimmt.
3. **Optimierung:** Ein Optimierungsalgorithmus wird verwendet, um die Parameter des Netzwerks zu aktualisieren und die Verlustfunktion zu minimieren.

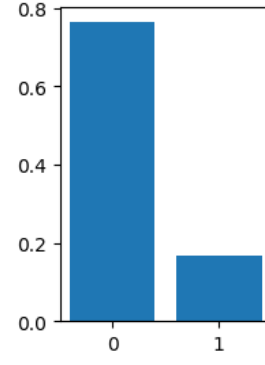
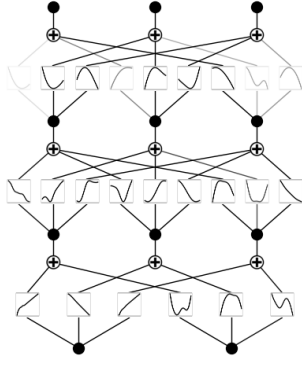
1.4.2 Illustration: Inkompressible 2D Strömung um ein NACA-Profil

Hier wurde ein einfaches PIKAN trainiert, welches für ein 2D Problem die Koordinaten (x, y) als Eingangsgrößen lernt, und damit das Strömungsfeld (Geschwindigkeits- und Druckkomponenten) an der jeweiligen Koordinate ausgibt. Das PIKAN besteht aus nur 2 inneren Schichten (Layern) die jeweils nur 3 Knoten (Neuronen) besitzen. Abbildung 2a zeigt qualitativ die einzelnen Transferglieder entsprechend der KAN Struktur nach dem PI-Training. Die Abbildung 2b stellt die Wichtigkeit der Eingangsgrößen dar, dabei ist auf der Abzisse $0 \equiv x$ und $1 \equiv y$. Die Ordinate beschreibt die relative, mittlere Wichtigkeit der jeweiligen Eingangsgröße auf die 3 Ausgangsgrößen über die L1-Norm.

Abbildung 3 zeigt die errechneten 2D Strömungsfeldgrößen des PIKANs für ein gegebenes NACA Profil (definiertes Profil, beispielsweise Schnitt durch einen Rotor einer Windkraftanlage oder auch Tragfläche von einem Flugzeug).

2 Ziele der Arbeit

1. Training eines KANs als PIKAN basierend auf den stationären Navier-Stokes-Gleichungen (vorhandene Implementierungen können erweitert werden).
2. Analyse der Einflüsse von Designparametern (z. B. Geometrie) und physikalischen Parametern (z. B. Reynoldszahl) auf das vorhergesagte Strömungsfeld.



(a) Struktur eines trainierten KANs, um auf Basis der Eingangsgrößen (x, y) (Koordinaten) das Strömungsfeld (Geschwindigkeits- und Druckkomponenten) an der jeweiligen Koordinate vorherzusagen. Die Eingangsgrößen sind unten im Eingangslayer, gefolgt von 2 Netzwerkschichten mit jeweils 3 Knoten/Neuronen sowie einer Ausgangsschicht mit 3 Knoten (v_x, v_y, p) , welche das stationäre Strömungsfeld an der Stelle (x, y) beschreiben.

(b) L1-Norm (=mittleres Maß für den Einfluss auf die Ausgänge des KANs) für die beiden Eingangsgrößen (x, y) (hierbei steht 0 für x und 1 für y). Man erkennt, dass die x -Position einen stärkeren Einfluss hat. Dies begründet sich in der stärkeren horizontalen Variation des Strömungsfeldes.

Abbildung 2: Visualisierung der Struktur eines KANs und der Bedeutung der Eingangsgrößen.

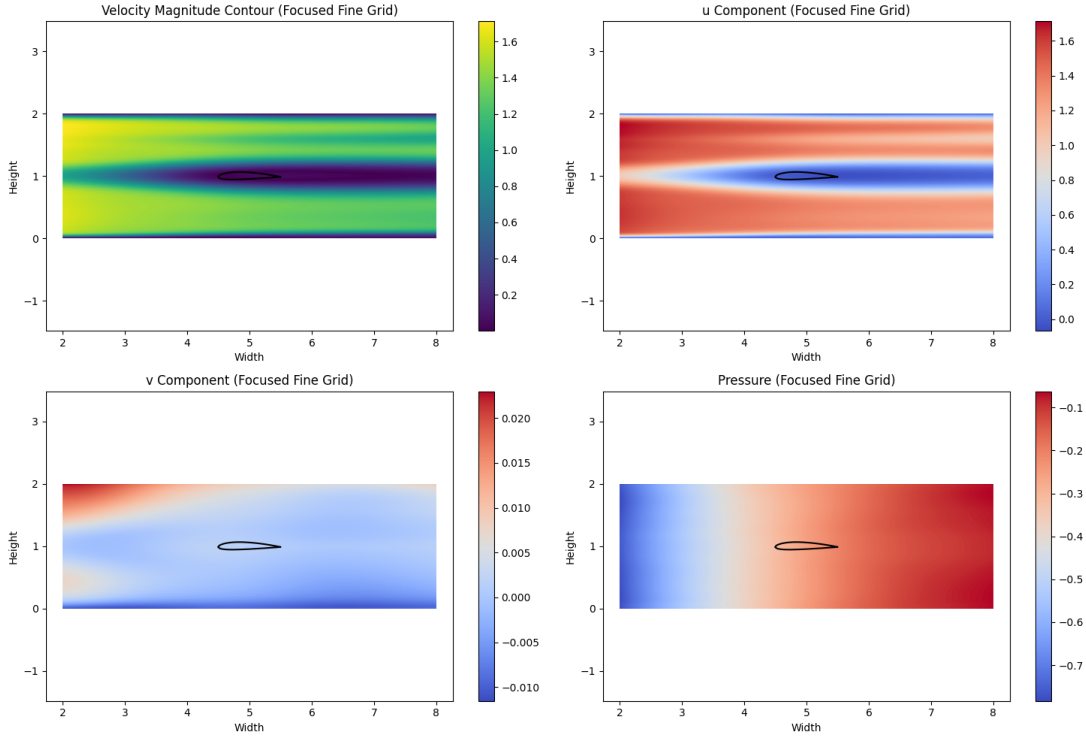


Abbildung 3: PIKAN basierte Berechnung der stationären Strömungsgrößen

3. Untersuchung der Erklärbarkeit der KAN-Topologie:
 - Welche Beziehungen zwischen Netzwerktopologie und physikalischen Parametern können hergestellt werden?
 - Liefert die Netzwerktopologie Einblicke, die mit klassischen numerischen Methoden (z. B. CFD) schwer zugänglich sind?
4. Vergleich der Ergebnisse mit Referenzlösungen aus numerischen Strömungssimulationen.

3 Vorgehensweise

1. Einarbeitung in die Grundlagen von KAN-Netzwerken, PINNs und den stationären Navier-Stokes-Gleichungen.
2. Anpassung und Erweiterung der vorhandenen Implementierungen für KAN-Netzwerke und stationäre NSE.
3. Training des PINN-Modells mit verschiedenen Geometrien und Reynoldszahlen.
4. Evaluation der Ergebnisse und Ableitung physikalisch interpretierbarer Aussagen.
5. Dokumentation der Ergebnisse und Darstellung der Stärken und Schwächen von KAN-Netzwerken als PINNs.

4 Erlernbare Kompetenzen

- Umgang mit modernen Machine-Learning-Methoden, insbesondere KAN-Netzwerken und PINNs.
- Verständnis und numerische Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen.
- Analyse und Visualisierung physikalischer Strömungsphänomene.
- Bewertung von Erklärbarkeit und Generalisierungsfähigkeit von neuronalen Netzwerken.

5 Erwartete Ergebnisse

- Ein funktionierendes PINN-Modell auf Basis eines KAN-Netzwerks zur Lösung stationärer Navier-Stokes-Gleichungen.
- Analyseergebnisse, die den Einfluss von Designparametern (z. B. Geometrien) und physikalischen Parametern (z. B. Reynoldszahl) auf das Strömungsfeld zeigen.
- Eine Bewertung, inwiefern die Topologie von KAN-Netzwerken physikalische Erklärbarkeit unterstützt.

6 Voraussetzungen

- Kenntnisse in Python-Programmierung und/oder Willen und Motivation, sich diese anzueignen.
- Interesse an mathematischer Modellierung und datengetriebenen Methoden.
- Teamfähigkeit - die Arbeit ist in unsere aktuellen Forschungsaktivitäten eingebettet.

Literatur

- [1] Ziming Liu, Yixuan Wang, Sachin Vaidya, Fabian Ruehle, James Halverson, Marin Soljačić, Thomas Y. Hou, Max Tegmark, *KAN: Kolmogorov-Arnold Networks*, 2024. Verfügbar unter: <https://arxiv.org/abs/2404.19756>.
- [2] Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). *Physics-Informed Neural Networks: A Deep Learning Framework for Solving Forward and Inverse Problems Involving Partial Differential Equations*. Journal of Computational Physics. DOI: 10.1016/j.jcp.2018.10.045.