

УДК 519.63

MSC2020 35Q79 + 76D07

© К. С. Кузнецов¹

Численный анализ задач с массопереносом и фазовыми переходами при помощи нейронных сетей

Задачи, связанные с фазовыми переходами и массообменом, характеризуются высокой нелинейностью, подвижными границами и резкими изменениями параметров, что затрудняет их численное решение традиционными методами. Целью данной работы является исследование возможности применения нового метода Physics Informed Neural Networks, который использует нейронные сети для аппроксимации неизвестных, для решения подобных задач. С использованием данного метода были решены задачи Стефана для одной и двух фаз. Результаты вычислений продемонстрировали хорошее соответствие как с аналитическим решением, так и с результатами, полученными другими численными методами. Помимо этого был произведен численный анализ задачи движения газового пузырька, окруженного жидкостью. В дальнейшем развитии упомянутого метода для решения задач тепломассообмена имеется значительный потенциал.

Ключевые слова: *Фазовые переходы, массоперенос, задача Стефана, нейронные сети.*

DOI: <https://doi.org/10.47910/FEMJ202515>

Введение

В последние годы значительно вырос интерес научного сообщества к решению задач тепломассообмена, зачастую сопряженных с переходами рассматриваемого вещества из одной фазы в другую [1, 2]. Ярким примером такого процесса, имеющего важное практическое применение в медицине и производстве, является лазероиндуцированная кавитация [3–5]. Кавитационные пузырьки, образующиеся и схлопывающиеся под воздействием лазерного излучения, сопровождаются образованием ударных волн и кумулятивных струй, что делает их полезными для прецизионной очистки, обработки поверхностей и медицинских процедур.

¹ Институт прикладной математики ДВО РАН, 690922, г. Владивосток, ул. Радио, 7. Электронная почта: kuznetsovks@gmail.com

Тем не менее известно, что решение подобных задач такими методами, как метод конечных объемов, метод конечных разностей или метод конечных элементов, часто вызывает ряд трудностей [6]. В частности, в задачах с фазовыми переходами для отслеживания фронта перехода требуется построение густой сетки, а также использование методов, позволяющих адекватно учитывать передачу тепла или массы между фазами [7]. Другой не менее важной проблемой является время вычислений, которое в зависимости от задачи, может занимать от нескольких часов до нескольких дней [8]. При этом подобные задачи часто являются неустойчивыми, что еще больше усугубляет указанную ранее проблему.

В связи с этим возникает проблема поиска нового метода, который позволит преодолеть некоторые недостатки классических методов. В последние годы научное сообщество активно использует при моделировании физических процессов технологии искусственного интеллекта. К ним можно отнести и метод Physics Informed Neural Network (PINN) [9] — метод решения дифференциальных уравнений путем аппроксимации неизвестных нейронными сетями. Для этого составляется функционал качества, отвечающий решению поставленной задачи, и нейронная сеть обучается на его минимизацию.

Целью текущей работы является исследование возможности использования метода PINN для численного решения задач тепломассопереноса с фазовыми переходами. Для этого в работе рассматривается решение таких классических задач, как задача Стефана для одной и двух фаз, а также задача движения газового пузырька, окруженного жидкостью, под действием силы тяжести. Решение задач методом PINN сравнивается с аналитическим решением и с решениями другими численными методами.

1. Метод PINN

Одной из ключевых особенностей метода PINN является явное включение математической модели в процесс обучения нейронной сети посредством оператора невязки. Пусть $\hat{u}(\mathbf{x}, t; \zeta)$ — приближение неизвестного решения некоторой задачи, заданное нейросетевой моделью с параметрами ζ , где основное уравнение определено через оператор \mathcal{N} :

$$\mathcal{N}[u(\mathbf{x}, t)] = f(\mathbf{x}, t), \quad (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times [0, T],$$

где $f(\mathbf{x}, t)$ — правая часть, задающая воздействие внешних сил. В рамках метода PINN оператор применяется к аппроксимации \hat{u} , полученной на выходном слое нейросети, после чего происходит оценка аппроксимации при помощи невязки \mathcal{R} :

$$\mathcal{R}(\mathbf{x}, t; \zeta) = \mathcal{N}[\hat{u}(\mathbf{x}, t; \zeta)] - f(\mathbf{x}, t).$$

Функция невязки рассчитывается в специальном множестве коллокационных точек $X_r = \{(x_i, t_i)\}_{i=1}^{N_r}$, сгенерированных внутри области $\Omega \times [0, T]$.

Помимо этого для метода часто применяют обезразмеривание переменных и уравнений. Это обусловлено тем, обучение нейронной сети становится более стабильным, когда аргументы и значения функций лежат в сопоставимом диапазоне

(от 0 до 1 или от -1 до 1). Но, помимо этого, приведение системы к безразмерному виду позволяет получить безразмерные численные характеристики (например, числа Рейнольдса и Струхала), отражающие свойства моделируемого процесса.

При использовании метода PINN важную роль играет составление функции потерь, отвечающей решению поставленной задачи. В оригинальном методе PINN [9] все слагаемые этой функции носят вид среднеквадратичной ошибки:

$$MSE(y, \bar{y}, X) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y(X_i) - \bar{y}(X_i))^2,$$

где y, \bar{y} — некоторые функции, X — набор данных, N — число элементов в наборе данных.

В общем случае сама функция потерь J имеет вид

$$J = J_r + J_{BC} + J_{IC} + J_{data},$$

где J_r — слагаемое для невязок дифференциальных уравнений, J_{BC} — слагаемое для граничных условий, J_{data} — слагаемое для начальных условий.

Однако в такой постановке метод имеет ряд серьезных недостатков — поскольку слагаемые функции J могут иметь разный порядок, их дисбаланс может привести к неспособности решить самую простую задачу путем либо расхождения метода, либо схождения к тривиальному решению. Для того чтобы эту задачу решить, в [10] предложен алгоритм, модифицирующий вид слагаемых следующим образом:

$$MSE(y, \bar{y}, X, \eta) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\eta_i |y(X_i) - \bar{y}(X_i)|)^2,$$

где η — это набор весовых коэффициентов для каждой точки набора данных. Указанные коэффициенты обучаются вместе с нейронной сетью путем оптимизационного алгоритма, основанного на градиентном спуске:

$$\eta^{n+1} = \eta^n + \beta \frac{\partial J}{\partial \eta^n},$$

где n — номер итерации, β — шаг обучения.

Такой подход позволяет не подбирать весовые коэффициенты для слагаемых вручную, а также значительно увеличивает сходимость метода при решении самых разных задач.

Для того чтобы можно было обучить нейронную сеть, необходимо сгенерировать набор точек, называемый также обучающим датасетом либо точками коллокации, который в дальнейшем используется для расчета функции потерь. В текущей работе используется генерация точек при помощи последовательностей Соболя [11], поскольку такой подход приводит к ускорению работы метода PINN [12]. Пример обучающей выборки, сгенерированной последовательностями Соболя, представлен на рисунке 1.

Объем обучающей выборки оказывает существенное влияние на качество работы метода. Как и в других методах машинного обучения, при генерации данных

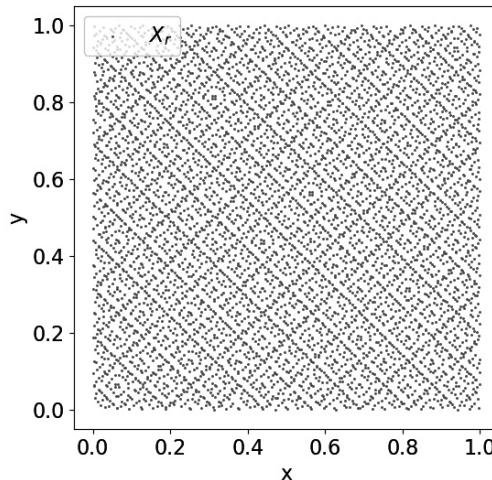


Рис. 1. Пример набора коллокационных точек, сгенерированный при помощи последовательностей Соболя.

очень важно избежать феноменов как недообучения (невозможности аппроксимации зависимостей между данным в силу недостатка объема данных), так и переобучения (запоминания зависимостей в силу избытка данных). Стоит отметить, что для каждой отдельной задачи оптимальное количество точек может отличаться, а алгоритмы с адаптивной генерацией точек на текущий момент времени недостаточно развиты для стабильной работы метода PINN. В силу этого количество точек датасета в текущей работе было выбрано эмпирически следующим образом.

1) Для одномерной нестационарной задачи объем обучающей выборки составляет

$$N_r = 8 \cdot 10^3, \quad N_b = 4 \cdot 10^2, \quad N_0 = 10^2, \quad N = N_r + N_b + N_0 = 8.5 \cdot 10^3,$$

где N_r — количество точек для расчета невязки уравнений, N_b — количество точек для расчета граничных условий, N_0 — количество точек для расчета начальных условий, N — общий объем датасета.

2) Для двумерной нестационарной задачи объем обучающей выборки составляет

$$N_r = 6 \cdot 10^4, \quad N_b = 3.2 \cdot 10^4, \quad N_0 = 8 \cdot 10^3, \quad N = 10^5.$$

Другой важной модификацией метода, используемой в текущей работе, является метод Фурье-кодирования признаков [13]. Метод заключается в проекции входных параметров на пространство тригонометрических функций разных аргументов, что позволяет нейронной сети при обучении лучше учитывать сложные зависимости приближаемых неизвестных функций от пространственно-временных переменных.

Выглядит преобразование следующим образом:

$$\gamma(x) = [\cos(2\pi \mathbf{B}x), \sin(2\pi \mathbf{B}x)]^T,$$

где x — входная переменная, $\gamma(x)$ — проекция входной переменной, $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{m \times d}$ — матрица коэффициентов, генерируемая случайной выборкой из $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$, где σ^2 может быть использован как гиперпараметр метода.

В качестве нейронной сети для аппроксимации неизвестных используется обычная полносвязная нейронная сеть с Фурье-кодированием входных признаков. Гиперпараметры нейронных сетей, используемых в качестве аппроксимации неизвестных функций, являются следующими:

1) архитектура сети состоит из слоя Фурье-кодирования признаков с 16 нейронами, 4 скрытых полносвязных слоев с функциями активации $\text{th}(x) = (e^x - e^{-x})/(e^x + e^{-x})$ и выходного слоя с одним нейроном и линейной функцией активации;

2) оптимизатор Adam с шагом обучения $lr = 2 \cdot 10^{-4}$;

3) обучение останавливается либо по достижении заданного количества эпох $M = 5 \cdot 10^4$, либо по прекращении изменения функции потерь в течение 1000 эпох;

В этой работе для аппроксимации каждой неизвестной используется отдельная нейронная сеть. По сравнению с использованием одной масштабной нейронной сети для аппроксимации всех неизвестных такой подход требует меньше вычислительных ресурсов, работает быстрее и приводит к лучшей сходимости за счет того, что у каждой неизвестной функции своя зависимость от входных пространственно-временных характеристик. Типичная архитектура нейронной сети схематично представлена на рисунке 2.

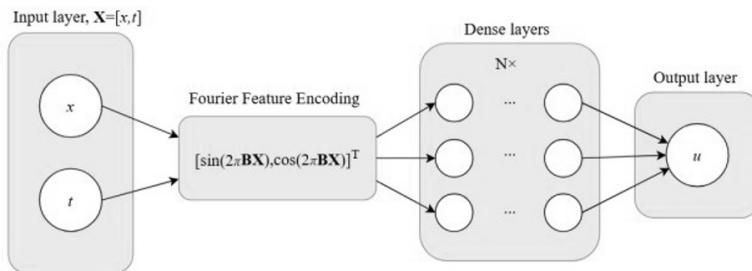


Рис. 2. Схематичное изображение архитектуры нейронной сети.

Реализация метода осуществлялась на языке программирования Python при помощи библиотеки Tensorflow [14]. При расчете численных экспериментов использовался персональный ноутбук со следующими характеристиками: графический процессор NVIDIA GeForce RTX 3070 Ti Laptop, центральный процессор Intel Core i5-12700H, 16 GB оперативной памяти.

2. Однофазная задача Стефана

Задача Стефана со свободной границей для одной фазы описывается уравнением теплопроводности со следующими условиями:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} - \lambda \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} = 0, \quad t \in [0, T], x \in [0, s(t)], \quad (1)$$

$$\theta|_{t=0} = \theta_0, \quad s|_{t=0} = s_0, \quad (2)$$

$$\theta|_{x=0} = \theta_1, \quad \theta(s(t), t) = \theta_m, \quad \rho H \frac{ds}{dt} = k \frac{\partial \theta}{\partial x}|_{x=s(t)}. \quad (3)$$

Здесь θ — температура, [К], $s(t)$ — положение подвижной границы между фазами, [м], λ — коэффициент температуропроводности, [м²/с], k — коэффициент теплопроводности, [Вт/м·К], H — скрытая теплота, [Дж].

Для решения такой задачи с учетом особенностей метода, указанных в предыдущем разделе, хорошо подойдет метод выпрямления фронта. Суть названного подхода заключается во введении новой переменной

$$\xi = \frac{x}{s(t)}.$$

В функции новых переменных $\psi(\xi, t) = \theta(x, t)$ система (1)–(3) примет вид

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\xi}{s} \frac{\partial s}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial \xi} - \frac{1}{s^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \xi^2} = 0, \quad \xi \in [0, 1], t \in [0, T] \quad (4)$$

$$\psi(\xi, 0) = \theta_0(\xi s(0)), \quad s(0) = s_0, \quad (5)$$

$$\psi(0, t) = \theta_1, \quad \psi(1, t) = \theta_m, \quad \frac{1}{s} \frac{\partial \psi}{\partial \xi}|_{\xi=1} = -\lambda \frac{ds}{dt}. \quad (6)$$

Для верификации метода рассмотрим решение задачи (1)–(3) со следующими параметрами:

$$s_0 = 0, \quad \theta_m = \theta_0 = 1, \quad \theta_1 = e^k t, \quad \theta_2 = e^{kt-s}, \quad T = 1, \quad k = 1.$$

Существует аналитическое решение такой задачи, которое имеет вид

$$s(t) = kt, \quad \theta(x, t) = e^{kt-x}$$

Численное решение методом PINN осуществлялось в постановке (4)–(6), где функция температуры $\theta(\xi, t)$ и функция положения границы раздела фаз $s(t)$ были аппроксимированы отдельными нейронными сетями. Полученное решение было преобразовано обратно к исходным переменным и представлено на рисунке 3.

Результаты говорят о высокой точности метода PINN при решении задачи со свободной границей.

Время решения задачи (1)–(3) методом PINN составило 5 минут.

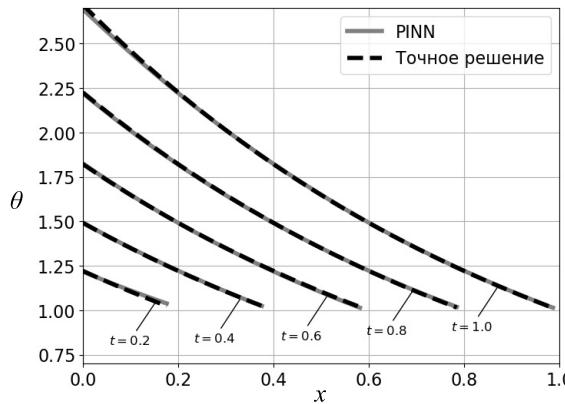


Рис. 3. Сравнение решения задачи Стефана для одной фазы методом PINN с аналитическим решением.

3. Двухфазная задача Стефана

В случае двухфазной задачи Стефана будем рассматривать уравнение теплопроводности в виде [1]

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} \left(1 - \frac{1}{\text{Ste}} \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) - \text{Fo}(\phi) \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} = 0, \quad x \in [0, 1], t \in [0, 1]. \quad (7)$$

Здесь [Дж/кг·К], $\text{Ste} = H/c_{p,l}\theta_s$ — число Стефана, c_p — удельная теплоемкость, H — скрытая теплота плавления, [Дж/кг], ϕ — функция фазы, зависящая от температуры, а нелинейное слагаемое $\frac{\partial \phi}{\partial t}$ учитывает фазовый переход:

$$\phi = \frac{1}{2} \left(1 + th \left(\frac{\theta_m - \theta}{\delta} \right) \right),$$

где δ — параметр регуляризации. Число Фурье, Fo , также зависит от фазы:

$$\text{Fo}(\phi) = (1 - \phi) \frac{k_l t_s}{c_{p,l} \rho_l L^2} + \phi \frac{k_s t_s}{c_{p,s} \rho_s L^2}$$

В таком виде функция ϕ может быть интерпретирована как объемная доля твердой фазы, а скорость перехода одной фазы в другую и ширина зоны плавления регулируются параметром δ . Подход хорошо работает при использовании метода, основанного на градиентном спуске, которым является метод PINN, в силу использования функции гиперболического тангенса, являющейся достаточно гладкой. При этом заметим, что использование слишком малого параметра регуляризации δ может привести к так называемому “градиентному взрыву” — ситуации, когда решение разрушается из-за наличия слишком больших градиентов в некоторой его зоне.

Уравнение (7) дополняется начальными и граничными условиями:

$$\theta|_{t=0} = \theta_0, \quad \theta|_{x=0} = \theta_1, \quad \theta|_{x=1} = \theta_2.$$

Рассмотрим решение численного эксперимента со следующими параметрами, представленными в размерности международной системы единиц, при этом температура — в градусах Цельсия, $^{\circ}\text{C}$:

$$L = 0.01, \quad t_s = 10, \quad \delta = 0.5, \quad \rho_l = 1000, \quad \rho_s = 917, \quad \theta_s = 60,$$

$$k_l = 0.6, \quad k_s = 2.2, \quad c_{p,l} = 4180, \quad c_{p,s} = 2100, \quad H = 3.34 \cdot 10^5,$$

$$\theta_0(x) = \begin{cases} 25, & x \leq 0.3L, \\ -7.5, & x > 0.3L, \end{cases}, \quad \theta_1 = 25, \quad \theta_2 = 7.5.$$

Для сравнения результатов использовался метод конечных разностей в постановке задачи с энталпийей. Результаты расчетов представлены на рисунке 4, где сплошной линией представлено решением методом PINN, звездами обозначено решение методом конечных разностей.

Стоит отметить, что, несмотря на некоторое несоответствие в полученных результатах, метод PINN демонстрирует более физичное поведение — в постановке, где левая граница нагрета больше правой, фронт смены фаз будет идти слева направо, в то время как в решении, полученном методом конечных разностей, такого поведения не наблюдается.

Подход с использованием функции ϕ при использовании метода PINN достаточно прост и позволяет за счет нелинейности избежать введения дополнительных неизвестных и усложнения системы. Подход может быть распространен и на задачи Стефана в двумерном и трехмерном случаях [1].

Стоит отметить, что скорости расчета двухфазной задачи Стефана методом конечных разностей и методом PINN сопоставимы друг с другом и составляют порядка 10 минут.

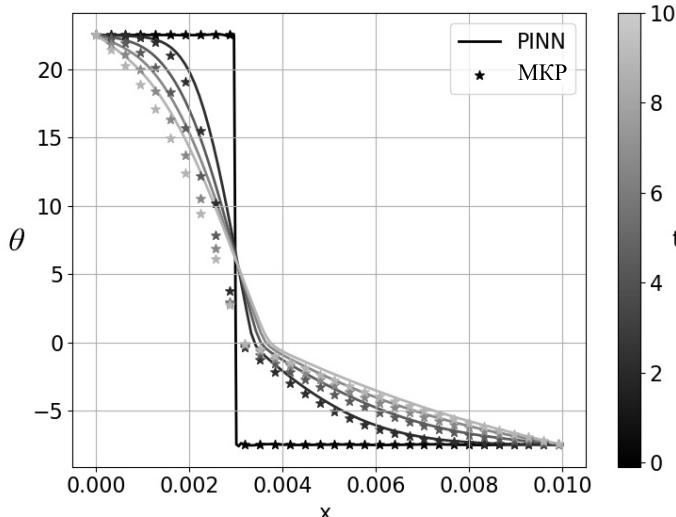


Рис. 4. Сравнение решения задачи Стефана для двух фаз с решением, полученным методом конечных разностей.

4. Течение газового пузырька в вязкой жидкости

Движение вязкой жидкости под действием силы тяжести в двумерной области Ω описывается уравнениями Навье–Стокса:

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

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g} + \mathbf{F}_s, \quad \mathbf{x} \in \Omega \times [0, T].$$

Здесь $\mathbf{u} = (u, v)$ — вектор-функция скорости, [м/с], p — давление, [Па], μ — вязкость, [Па·с], $\mathbf{g} = (0, -g)$ — вектор ускорения свободного падения, [м/с²], \mathbf{F}_s — объемная сила.

Для того чтобы смоделировать движение двухфазной жидкости, прибегнем к методу объема жидкости [15], который использует функцию объемной доли фракции для разделения фаз:

$$\rho(\alpha_g) = (1 - \alpha_g)\rho_l + \alpha_g\rho_g, \quad \mu(\alpha_g) = (1 - \alpha_g)\mu_l + \alpha_g\mu_g.$$

Для корректного расчета функции объемной доли газовой фазы добавляется уравнение адvectionии:

$$\frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \alpha_g = 0. \quad (8)$$

Учет разницы давлений на границе раздела фаз осуществляется при помощи метода Continuum Surface Force [16]:

$$\mathbf{F}_s = \sigma \kappa \nabla \alpha_g, \quad (9)$$

где σ — коэффициент поверхностного натяжения, $\kappa = -\nabla \cdot (\nabla \alpha_g / |\nabla \alpha_g|)$

При решении задачи также будем использовать обезразмеривание, которое частично поможет избежать проблемы со сходимостью в методе PINN, появляющейся в силу разницы соотношений физических характеристик разных фаз.

В безразмерном виде система уравнений (8)–(9) примет вид

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + Sh(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \frac{Sh}{\rho(\alpha_g)} \nabla p - \\ - \frac{Sh}{Re(\alpha_g)} \nabla^2 \mathbf{u} - \frac{Sh}{Fr^2} \cdot \mathbf{e} - \frac{Sh}{We(\alpha_g)} \kappa \nabla \alpha_g = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega \times [0, 1], \end{aligned} \quad (11)$$

$$\frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + Sh \mathbf{u} \cdot \nabla \alpha_g = 0, \quad (12)$$

где $Re(\alpha_g)$ — число Рейнольдса, $We(\alpha_g)$ — число Вебера, Sh — число Струхала, Fr — число Фруда, определяемые следующим образом:

$$Re = \frac{u_s \rho L}{\mu}, \quad We = \frac{\rho L u_s^2}{\sigma}, \quad Sh = \frac{T u_s}{x_s}, \quad Fr = \frac{u_s}{\sqrt{gL}}.$$

Здесь u_s — относительное значение скорости.

Система (10)–(12) дополняется начальными и граничными условиями [17]:

$$u|_{t=0} = v|_{t=0} = 0, \quad \alpha_g|_{t=0} = \begin{cases} 1, & \sqrt{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2} \leq r_0, \\ 0, & \sqrt{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2} > r_0, \end{cases}$$

$$\Gamma_1 : u = 0, \quad v = 0; \quad \Gamma_2 : u = 0, \quad \frac{\partial v}{\partial n} = 0,$$

где $\Gamma = \partial\Omega = \Gamma_1 \cup \Gamma_2$, Γ_1, Γ_2 — границы расчетной области. Геометрия и граничные условия схематично изображены на рисунке 5 с размерами области, имеющими раз мерность [м].

Для того чтобы аппроксимировать функцию объемной доли нейронной сетью, ограничив ее в пределах $[0, 1]$, используем на выходном слое логистическую функцию активации в качестве регуляризации. Для того чтобы избежать значений, означающих смешение фаз вне зоны их раздела, будем использовать следующую кусочно непрерывную аппроксимацию:

$$\hat{\alpha}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0, & \text{если } S(Y) < 0.1, \\ S(Y(\mathbf{x}; W)), & \text{если } 0.1 \leq S(Y) \leq 0.9, \\ 1, & \text{если } S(Y) > 0.9, \end{cases}$$

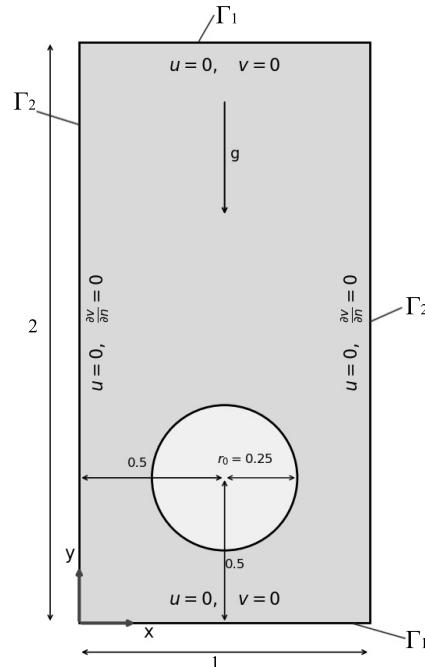


Рис. 5. Изображение геометрии и граничных условий.

где $\hat{\alpha}(\mathbf{x}) \in [0, 1]$ — аппроксимация функции объемной доли, $Y(\mathbf{x}; W)$ — выход нейронной сети до активации, а $S(z) = 1/(1 + e^{-z})$ — логистическая функция.

В качестве численного эксперимента рассматривается эталонный пример [17] с параметрами задачи

$$\rho_l = 10^3 \left[\frac{\text{М}}{\text{кг}^3} \right], \rho_g = 10^2 \left[\frac{\text{М}}{\text{кг}^3} \right], \mu_l = 10 \text{ [Па} \cdot \text{с]}, \mu_g = 1 \text{ [Па} \cdot \text{с]}, g = 0.98 \left[\frac{\text{М}}{\text{с}^2} \right].$$

Стоит отметить, что параметры, используемые при расчете эталонного примера, являются нефизическими и используются только для верификации сходимости разных методов при решении данной задачи, а не для моделирования реального физического процесса.

Полученные в результате расчета численного эксперимента вертикальная и горизонтальная компоненты скорости u и v представлены на рисунке 6, давление p — на рисунке 7, функция объемной доли газовой фазы α_g — на рисунке 8. Значения приведены в финальный момент времени $t = 3$ с.

По представленным результатам видно некоторое несоответствие метода PINN с высокоточным решением, полученным методом конечных элементов. Несмотря на это, решение, полученное методом PINN, смогло охватить качественное поведение пузырька и окружающей его жидкости, а именно поднятие под действием выталкивающей силы, а также деформацию под действием силы поверхностного трения на границе между двумя фазами. Время расчета численного эксперимента составило 3 часа, что сопоставимо со временем расчета классическим методом на мелкой сетке [17].

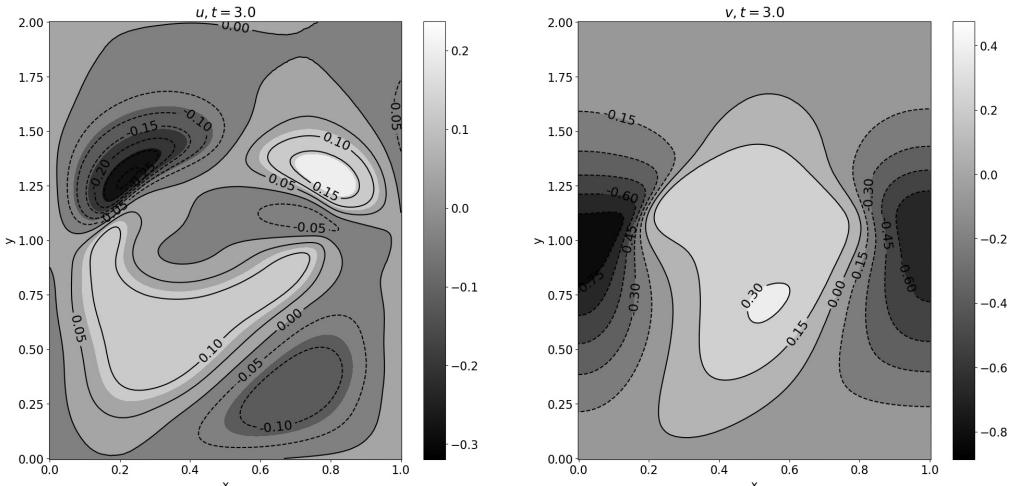


Рис. 6. Горизонтальная и вертикальная компоненты вектор-функции скорости в момент времени $t = 3$ с, полученные в ходе решения задачи (10)–(12) методом PINN.

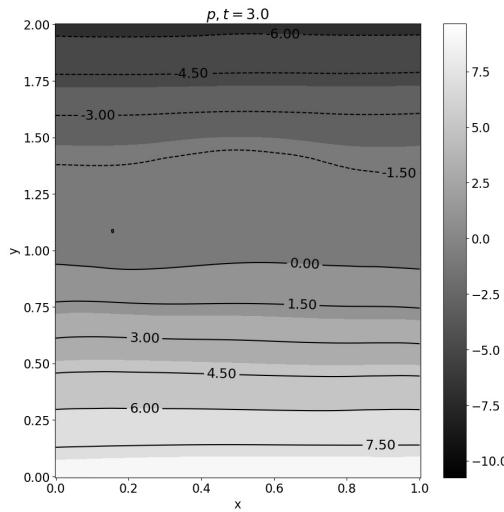


Рис. 7. Давление в момент времени $t = 3$ с, полученное в ходе решения задачи (10)–(12) методом PINN.

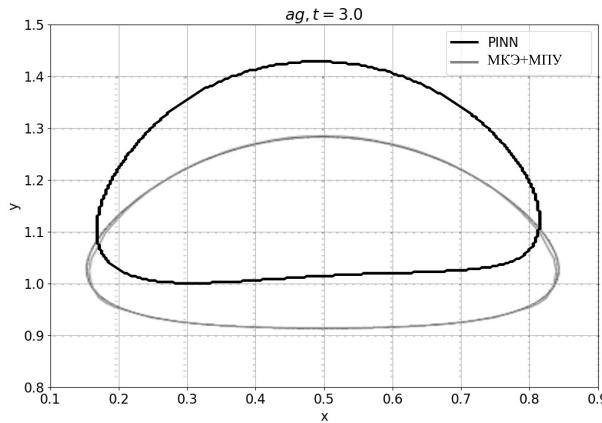


Рис. 8. Функция объемной доли газовой фазы в момент времени $t = 3$ с, полученная в ходе решения задачи (10)–(12) методом PINN в сравнении с решением, полученным методом конечных элементов с использованием метода поверхности уровня [17].

5. Результаты и обсуждение

В работе была рассмотрена возможность решения задач с массопереносом и смешанной фазой при помощи метода PINN, основанного на нейронных сетях. Результат показал, что метод на ряде тестовых задач, таких как задача Стефана, хорошо повторяет результаты классических алгоритмов.

В то же время для более сложных задач, таких как задача движения пузырька,

результат, полученный при помощи PINN, показывает общее соответствие в поведении решения, но на текущем этапе дает значимую погрешность.

Стоит отметить, что скорость вычислений на основе усовершенствованного метода PINN сильно возросла по сравнению с оригинальным методом и уже стала сопоставима со временем расчета классических алгоритмов. Однако при расчете сложных нелинейных задач, требующих построения мелкой сетки и использования малых шагов по времени, метод PINN в перспективе может дать выигрыш во времени в разы.

Одним из направлений дальнейшего развития работы может стать подход с использованием нейронных сетей с двумя выходными значениями для каждой из фаз. Например, для системы (10)–(12)

$$u = (1 - \alpha_g)u_l + \alpha_g u_g, \quad p = (1 - \alpha_g)p_l + \alpha_g p_g$$

Исследование подобного подхода может прояснить влияние роли значений аппроксимируемых функций, имеющих разный порядок для каждой из фаз, на сходимость метода.

Другим направлением развития может стать использование метода функции уровня [18], который является распространенным при решении подобного рода задач.

Список литературы

- [1] Zimmerman A. G., Kowalski J., “Monolithic Simulation of Convection-Coupled Phase-Change: Verification and Reproducibility”, *Recent Advances in Computational Engineering*, Springer International Publishing, Cham, 2018, 177–197 doi 10.1007/978-3-319-93891-2_11.
- [2] Danaila I., Moglan R., Hecht F., Le Masson S., “A Newton method with adaptive finite elements for solving phase-change problems with natural convection”, *Journal of Computational Physics*, **274**, (2014), 826–840 doi 10.1016/j.jcp.2014.06.036.
- [3] Дац Е. П., Кудряшов А. П., Чудновский В. М., “Влияние теплофизических характеристик жидкой фазы на динамику парового пузырька в процессе лазерной кавитации”, *Дальневост. матем. журн.*, **25**:1, (2025), 39–47.
- [4] Гузев М. А., Дац Е. П., Пахалюк Ю. П., Чудновский В. М., “Численное моделирование эволюции парового пузыря в условиях лазероиндуцированной кавитации”, *Дальневост. матем. журн.*, **23**:2, (2023), 178–183.
- [5] Чудновский В. М., Гузев М. А., Василевский Ю. В., Дац Е. П., “Особенности кавитации, инициированной на лазерном нагревательном элементе вблизи твердой плоской поверхности”, *Письма в ЖТФ*, **50**:18, (2024), 3–6.
- [6] Gomez H., Bures M., Moure A., “A review on computational modelling of phase-transition problems”, *Phil. Trans. R. Soc. A*, **377**, (2019), 20180203 doi 10.1098/rsta.2018.0203.
- [7] Tubini N., Gruber S., Rigon R., “A method for solving heat transfer with phase change in ice or soil that allows for large time steps while guaranteeing energy conservation”, *The Cryosphere*, **15**:6, (2021), 2541–2568 doi 10.5194/tc-15-2541-2021.
- [8] Ramakrishnan T., Bhalla A. P. S., “A consistent, volume preserving, and adaptive mesh refinement-based framework for modeling non-isothermal gas–liquid–solid flows with phase change”, *Int. J. Multiphase Flow*, **183**, (2025), 105060.
- [9] Raissi M., Perdikaris P., Karniadakis G., “Physics-Informed Neural Networks: A Deep Learning Framework for Solving Forward and Inverse Problems Involving Nonlinear Partial Differential Equations”, *J. Comput. Phys.*, **378**, (2018), 686–707.

- [10] McClenny L. D., Braga-Neto U. M., “Self-adaptive physics-informed neural networks”, *J. Comput. Phys.*, **474**, (2023), 111722 doi 10.1016/j.jcp.2022.111722.
- [11] Соболь И. М., “О распределении точек в кубе и приближенном вычислении интегралов”, *Журн. вычисл. матем. и матем. физики*, **7**:4, (1967), 784–802.
- [12] Wu C., Zhu M., Tan Q., Kartha Y., “A comprehensive study of non-adaptive and residual-based adaptive sampling for physics-informed neural networks”, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, **403**, (2023), 115671 doi 10.1016/j.cma.2022.115671.
- [13] Tancik M., Srinivasan P. P., Mildenhall B., Fridovich-Keil S., “Fourier Features Let Networks Learn High Frequency Functions in Low Dimensional Domains”, 2020, arXiv: 2006.10739.
- [14] Abadi et M. al., “TensorFlow: A system for large-scale machine learning”, *12th USENIX Symposium on Operating Systems Design and Implementation (OSDI 16)*, 2016, 265–283.
- [15] Harlow F. H., Welch J. E., “Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with Free Surface”, *Phys. Fluids*, **8**:12, (1965), 2182–2189 doi 10.1063/1.1761178.
- [16] Brackbill J. U., Kothe D. B., Zemach C., “A continuum method for modeling surface tension”, *J. Comput. Phys.*, **100**:2, (1992), 335–354 doi 10.1016/0021-9991(92)90240-Y.
- [17] Hysing et S. al., “Quantitative benchmark computations of two-dimensional bubble dynamics”, *Int. J. Numer. Methods Fluids*, **60**:11, (2009), 1259–1288 doi 10.1002/fld.1934.
- [18] Osher S., Sethian J. A., “Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on Hamilton – Jacobi formulations”, *J. Comput. Phys.*, **79**:1, (1988), 12–49.

Поступила в редакцию
5 августа 2025 г.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22-19-00189-П).

*Kuznetsov K. S.*¹ Numerical Analysis of Mass Transfer and Phase Change Problems Using Neural Networks. *Far Eastern Mathematical Journal*. 2025. V. 25. No 2. P. 218–231.

¹ Institute for Applied Mathematics, Far Eastern Branch, Russian Academy of Sciences

ABSTRACT

Problems related to phase change and mass transfer are characterized by high nonlinearity, moving boundaries and sharp changes in parameters, which complicates their numerical solution by traditional methods. The aim of this work is to study the possibility of using a new method Physics Informed Neural Networks, which uses neural networks to approximate unknowns, to solve such problems. The method was applied to solve Stefan problems for one and two phases, as well as to numerically analyze the problem of the motion of a gas bubble surrounded by a liquid. The method demonstrated good agreement with other solutions for Stefan problems and made it possible to simulate the bubble motion, although with some errors. There is significant potential for further development of this method for solving heat and mass transfer problems.

Key words: *Phase change, mass transfer, Stefan problem, neural networks.*