Исследование влияния вида задачи для уравнения гармонического осциллятора на решение PINN

Донецков А.Д.*, Бакакин В.Д., Жулев Е.М.
НИЯУ МИФИ

22 декабря 2024 г.

Аннотация

В данном отчёте рассматривается применение метода физически – информированных нейронных сетей **PINN** (Physics-Informed Neural Networks) для решения уравнения гармонического осциллятора с вынуждающей силой. Исследуется влияние различных формулировок задачи Коши на точность и сходимость метода PINN. Представлены сравнительные результаты, демонстрирующие различия в скорости сходимости, устойчивости обучения и точности. Дополнительно проведён анализ устойчивости методов и их применимость к системам с резонансом.

Содержание

1 Введение **3**

2 Постановка задачи **3**

2.1 ОДУ второго порядка 3

2.2 Системы ОДУ первого порядка 4

2.2.1 Система (2) 4

2.2.2 Система (3) 4

3 Ключевые особенности PINN **4**

4 Методология **5**

4.1 Архитектура нейронной сети 5

4.2 Функционал потерь 5

4.3 Процесс обучения 5

4.4 Параметры эксперимента 5

*E-mail: andrey.donetskov@gmail.com

5 Результаты **5**
5.1 Система ОДУ второго порядка (1) 6
5.2 Система ОДУ первого порядка (2) 7
5.3 Альтернативная система ОДУ первого порядка (3) 8
5.4 Сравнительный анализ 9

6 Анализ устойчивости и сходимости **9**
6.1 Устойчивость обучения 9
6.2 Сходимость метода 9

7 Заключение **9**

8 Список литературы **10**

1 Введение

Одной из важных задач в области вычислительной физики и механики является решение уравнений движения гармонического осциллятора. Классический гармонический осциллятор описывается различными дифференциальными уравнениями как второго, так и первого порядка. В последнее десятилетие активно развиваются нейросетевые методы решения дифференциальных уравнений, в частности метод физически-информированных нейронных сетей (PINN) [1, 2].

Метод PINN позволяет интегрировать физические законы непосредственно в процесс обучения нейронной сети, что обеспечивает получение решений, согласующихся с заданными дифференциальными уравнениями и граничными условиями. Однако эффективность метода может зависеть от выбора формулировки задачи Коши.

Цель данного исследования — сравнить влияние различных формулировок задачи Коши для уравнения гармонического осциллятора на точность и эффективность метода PINN.

2 Постановка задачи

Рассматриваются три различных формулировки задачи Коши для уравнения гармонического осциллятора с вынуждающей силой, по два набора параметров для каждой — для случаев резонанса и его отсутствия:

2.1 ОДУ второго порядка

Уравнение вида

$$\begin{cases} \dfrac{d^2x}{dt^2} + \omega_0^2 x = -A\cos(\omega t), \\ x(0) = x_0, \\ \dfrac{dx}{dt}(0) = v_0. \end{cases} \tag{1}$$

непосредственно описывает динамику гармонического осциллятора.

Применение:

- **Физика колебаний:** Моделирование механических систем, таких как пружинные маятники или электрические колебательные контуры, где присутствуют гармонические колебания.
- **Анализ устойчивости:** Исследование устойчивости систем, подверженных периодическим внешним воздействиям.

2.2 Системы ОДУ первого порядка

2.2.1 Система (2)

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = y, \\ \dfrac{dy}{dt} = -\omega_0^2 x - A\cos(\omega t), \\ x(0) = x_0, \\ y(0) = v_0. \end{cases} \tag{2}$$

2.2.2 Система (3)

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = \omega_0 y - \dfrac{A}{\omega}\sin(\omega t), \\ \dfrac{dy}{dt} = -\omega_0 x, \\ x(0) = x_0, \\ y(0) = \dfrac{v_0}{\omega_0}. \end{cases} \tag{3}$$

Применение:

- **Численные методы:** Многие численные алгоритмы, такие как методы Рунге – Кутты, разработаны для систем первого порядка, что делает эту форму удобной для компьютерного моделирования.
- **Сложные системы:** Анализ систем с несколькими степенями свободы, где каждая степень описывается своим уравнением первого порядка.

Примечание: Разные системы дифференциальных уравнений первого порядка могут быть полезны в случаях, когда форма упрощает аналитическое или численное решение, в зависимости от характера внешней силы или других факторов.

3 Ключевые особенности PINN

Преимущества PINN:

- Интеграция физических законов в процесс обучения для получения физически корректных решений.
- Использование автоматического дифференцирования для эффективного вычисления градиентов сложных выражений.
- Применимость к различным задачам, включая ОДУ, УЧП и их системы.

Ограничения PINN:

- Трудности с аппроксимацией разрывных функций.
- Низкая эффективность при решении жестких и хаотических систем ОДУ.
- Застревание в локальных оптимумах.
- Сложности в балансировке различных компонентов функции потерь.

4 Методология

4.1 Архитектура нейронной сети

- **Входной слой:** 1 нейрон (время t).
- **Скрытые слои:** 5 слоёв по 20 нейронов каждый с функцией активации sin.
- **Выходной слой:** 1 или 2 нейрона (в зависимости от системы ОДУ).

4.2 Функционал потерь

Функционал потерь определяется как

$$loss = loss_{interior} + \lambda_{bc} \cdot loss_{boundary},$$

где:

1. $loss_{interior}$ — потери на уравнении (MSE по residual), учитывающие форму дифференциального уравнения.
2. $loss_{boundary}$ — потери на граничных условиях (MSE между предсказанием и истинным значением).

Весовой коэффициент ограничения (λ_{bc}) выбран равным 50.

4.3 Процесс обучения

Обучение модели проводилось с использованием оптимизатора Adam с шагом обучения 10^{-3} для минимизации функции потерь. Этот оптимизатор показал наилучшие результаты в предварительных экспериментах. Функцией активации был выбран синус.

4.4 Параметры эксперимента

- **Интервал обучения:** $[-5, 15]$.
- **Шаг разбиения:** 0.05.
- **Количество запусков:** 5 для каждой системы и каждого случая (с резонансом и без него).
- **Метрика оценки: MAE** (mean absolute error).

5 Результаты

Для каждой системы было произведено пять запусков обучения, как для случая с резонансом, так и без него. Результаты представлены ниже.

5.1 Система ОДУ второго порядка (1)

Рис. 1: Функция потерь для ОДУ второго порядка

Рис. 2: Функция потерь для ОДУ второго порядка с резонансом

Без резонанса		**С резонансом**	
MAE $x, 10^{-2}$	**MAE** $\frac{dx}{dt}, 10^{-2}$	**MAE** $x, 10^{-2}$	**MAE** $\frac{dx}{dt}, 10^{-2}$
1.1879	2.4357	1.1877	2.4116
1.2033	2.4247	1.2502	2.5555
1.6343	3.0803	1.4000	2.8247
1.2127	2.4514	1.2128	2.4863
1.1406	2.3287	1.2032	2.3616
1.2758	**2.5442**	**1.2508**	**2.5279**

Таблица 1: ОДУ второго порядка

- Высокая точность и быстрая сходимость.
- Возможные проблемы с локальными минимумами.

5.2 Система ОДУ первого порядка (2)

Рис. 3: Функция потерь для системы ОДУ первого порядка

Рис. 4: Функция потерь для системы ОДУ первого порядка с резонансом

Без резонанса		**С резонансом**	
MAE $x, 10^{-2}$	**MAE** $\frac{dx}{dt}, 10^{-2}$	**MAE** $x, 10^{-2}$	**MAE** $\frac{dx}{dt}, 10^{-2}$
4.8092	9.8869	0.43286	0.8909
3.5429	7.2853	0.32455	0.6793
3.6680	7.4666	0.96157	1.9562
3.6264	7.4309	0.64427	1.3446
2.5681	5.4567	0.32558	0.6419
3.6429	**7.5053**	**0.5378**	**1.1026**

Таблица 2: ОДУ первого порядка

- Более стабильный, но медленный процесс обучения.
- Без резонанса среднее MAE больше ОДУ второго порядка в 3 раза.
- Лучшая ОДУ для резонанса.

5.3 Альтернативная система ОДУ первого порядка (3)

Рис. 5: Функция потерь для альтернативной системы ОДУ

Рис. 6: Функция потерь для альтернативной системы ОДУ с резонансом

Без резонанса		**С резонансом**	
MAE $x, 10^{-2}$	**MAE** $\frac{dx}{dt}, 10^{-2}$	**MAE** $x, 10^{-2}$	**MAE** $\frac{dx}{dt}, 10^{-2}$
1.0991	2,3144	1.0198	2.2316
2.4914	5,1818	0.2385	0.5340
1.0468	2,2011	1.2542	2.6190
0.4407	0,9656	1.3087	2.7650
0.9234	1,9852	0.2077	0.4756
1.2003	**2.5296**	**0.8058**	**1.7250**

Таблица 3: Альт. ОДУ первого порядка

- Большая точность по сравнению с первой системой.
- Менее стабильный процесс обучения.
- Достигается точность, близкая к ОДУ второго порядка.

5.4 Сравнительный анализ

Система	**Среднее MAE** x**,** 10^{-2}	**Среднее MAE** $\frac{dx}{dt}$**,** 10^{-2}
ОДУ второго порядка (1)	1.1769	2.3757
ОДУ первого порядка (2)	3.1845	7.3041
Альт. ОДУ первого порядка (3)	1.3004	2.1330

Таблица 4: Сравнительное среднее значение MAE для различных систем без резонанса

Из таблицы 4 видно, что система второго порядка и альтернативная система первого порядка показывают наименьшие значения MAE, что свидетельствует о большей точности и эффективности этих формулировок задачи Коши. Так же хочется заметить, что MAE x приблезительно в 2 раза меньше MAE $\frac{dx}{dt}$ во всех экспериментах.

6 Анализ устойчивости и сходимости

6.1 Устойчивость обучения

Система второго порядка показывает высокую точность, однако часто застревает в локальных минимумах, что снижает устойчивость метода. Система первого порядка (2) демонстрирует более стабильное обучение, но с худшей точностью. Альтернативная система первого порядка (3) сочетает в себе преимущества обеих предыдущих систем, обеспечивая хорошую точность и относительно стабильное обучение.

6.2 Сходимость метода

Быстрая сходимость наблюдается для системы второго порядка, что делает её предпочтительной при отсутствии сложных динамических особенностей. Альтернативная система первого порядка показывает сбалансированную скорость сходимости и точность, что может быть полезно в более сложных случаях, таких как системы с резонансом.

7 Заключение

Проведённое исследование показывает, что выбор постановки задачи Коши существенно влияет на эффективность и точность метода PINN. Для конкретных приложений имеет смысл сравнить различные формулировки задачи, чтобы подобрать оптимальный вариант. В случае гармонического осциллятора с вынуждающей силой:

- **Использование исходного уравнения второго порядка** даёт быструю сходимость к точному решению, однако могут возникать проблемы с попаданием в локальные минимумы.

- **Преобразование уравнения к системе первого порядка** повышает устойчивость обучения, но может снижать точность и увеличивать время сходимости.

- **Альтернативная система первого порядка** позволяет достичь результата, близкого к исходному уравнению, при этом обладая более стабильным процессом оптимизации.

Дополнительно, при наличии резонанса, методы, демонстрирующие лучшую устойчивость и точность, становятся более предпочтительными, так как они способны более точно моделировать сложные динамические поведения системы.

Для дальнейших исследований рекомендуется рассмотреть расширение метода PINN на более сложные системы ОДУ и УЧП, а также исследовать влияние других архитектур нейронных сетей и методов оптимизации на эффективность решения.

Полный код для воспроизведения результатов доступен в репозитории на GitHub: https://github.com/PracticalOscillations/Practice3.

Мы приглашаем заинтересованных исследователей использовать и развивать представленный подход.

8 Список литературы

Список литературы

[1] Lagaris I.E., Likas A., Fotiadis D.I. Artificial neural networks for solving ordinary and partial differential equations. //IEEE Transactions on Neural Networks, 1998. Т. 9. № 5. С. 987–1000.

[2] Raissi M., Perdikaris P., Karniadakis G.E. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. //Journal of Computational Physics, 2019. Т. 378. С. 686–707.

[3] PyTorch documentation.