Проектная практика

Осень, 2024

Введение в Physics-Informed Neural Networks (PINN)

Physics-Informed Neural Networks (PINN) представляют собой альтернативный подход (если рассматривать классические численные методы) к решению дифференциальных уравнений, объединяющий методы машинного обучения с фундаментальными физическими законами. Этот метод предлагает новый взгляд на решение сложных физических задач, особенно в случаях, когда традиционные численные методы сталкиваются с трудностями.

Основные принципы PINN

В основе PINN лежит идея использования нейронной сети для аппроксимации решения дифференциального уравнения (в общем случае многомерного). Рассмотрим общий вид такого уравнения:

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

с граничными условиями:

$$\mathcal{B}[\mathbf{u}(\mathbf{x})] = 0, \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega,$$

где $\mathcal{N}$ и $\mathcal{B}$ — дифференциальные операторы, $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ — искомая функция, Ω — область определения, а $\partial\Omega$ — её граница.

PINN аппроксимирует решение $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ нейронной сетью $\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{x})$. Обучение сети происходит путем минимизации функции потерь, которая обычно имеет вид:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{eq} + \lambda \mathcal{L}_{bc},$$

где:

— $\mathcal{L}_{eq}$ — потери на уравнении (обычно это $\mathcal{L}_{eq} = \mathrm{MSE}(\mathcal{N}[\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{x})])$);

— $\mathcal{L}_{bc}$ — потери на граничных условиях (обычно это $\mathcal{L}_{bc} = \mathrm{MSE}(\mathcal{B}[\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{x})])$);

— λ — весовой коэффициент.

Ключевые особенности PINN

1. **Физическая информированность:** PINN включают физические законы непосредственно в процесс обучения, что позволяет получать физически корректные решения.

2. **Автоматическое дифференцирование:** Для вычисления производных используется автоматическое дифференцирование, что позволяет эффективно рассчитывать градиенты сложных выражений.

3. **Гибкость:** PINN могут быть применены к широкому спектру задач, включающим обыкновенные дифференциальные уравнения (ОДУ), уравнения в частных производных (УЧП) и их системы.

Параметры и возможности оптимизации

Эффективность PINN может быть значительно улучшена путем оптимизации различных параметров:

1. **Архитектура нейронной сети:**
   - Количество скрытых слоев;
   - Число нейронов в каждом слое.
2. **Функции активации (стандартно Tanh):**
   - Традиционные (Softplus, Tanh, Sigmoid);
   - Специализированные (Sin и др.).
3. **Методы оптимизации (стандартно Adam):**
   - Градиентные методы (SGD, Adam, RMSprop);
   - Квази-ньютоновские методы (L-BFGS).
4. **Стратегии выбора точек обучения:**
   - Равномерная сетка;
   - Случайное распределение;
   - Адаптивные методы;
   - Квази-случайные последовательности.
5. **Весовой коэффициент в функции потерь (стандартно $\lambda = 1$):** Баланс между потерями на уравнении и граничных условиях.
6. **Формулировка задачи:**
   - Порядок уравнения (например, сведение ОДУ высших порядков к системам ОДУ первого порядка);
   - Выбор безразмерных переменных;
   - Преобразование координат.

Ограничения PINN

PINN сталкиваются с рядом ограничений, которые важно учитывать при их применении:

- Трудности при аппроксимации разрывных функций.
- Низкая эффективность для решения жестких и хаотических систем ОДУ.
- Проблемы с оптимизацией, включая:
  - Застревание в локальных оптимумах.
  - Сложность балансировки различных компонентов функции потерь.

Задачи

Задача 1. Решение начально-краевой задачи для уравнения Кортевега-де Вриза (КдВ) с использованием PINN.

Уравнение КдВ*:*

$$\frac{\partial u}{\partial t} + 6u\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0, \quad x \in (-L, L), \quad t > 0.$$

Начальное и граничные условия:

$$\begin{cases} u(x,0) = f(x), \quad x \in [-L, L], \\ u(-L,t) = u(L,t) = 0, \quad t > 0, \\ \dfrac{\partial u}{\partial x}(-L,t) = 0, \quad t > 0. \end{cases}$$

Задача: Реализовать PINN метод решения начально-краевой задачи для уравнения КдВ. Исследовать влияние количества нейронов и скрытых слоёв на точность и эффективнось решения.

Задача 2. Решение задачи Коши для уравнения Дуффинга с использованием PINN.

Уравнение Дуффинга:

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \delta\frac{dx}{dt} + \alpha x + \beta x^3 = \gamma\cos(\omega t), \quad t > 0.$$

Начальные условия:

$$\begin{cases} x(0) = x_0, \\ \dfrac{dx}{dt}(0) = v_0. \end{cases}$$

Задача: Реализовать PINN метод решения задачи Коши для уравнения Дуффинга. Исследовать влияние параметров на поведение системы. Сравнить результаты с классическими численными методами.

Задача 3. Исследование эффективности различных методов оптимизации при обучении PINN.

Уравнение теплопроводности:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad x \in (0, L), \quad t > 0.$$

Начальные и граничные условия:

$$\begin{cases} u(x,0) = f(x), \quad x \in [0, L], \\ u(0,t) = u(L,t) = 0, \quad t > 0. \end{cases}$$

Задача: Реализовать PINN метод решения начально-краевой задачи для уравнения теплопроводности. Сравнить эффективность различных оптимизаторов (SGD, Adam, RMSprop, L-BFGS).

Задача 4. Решение задачи Коши для системы уравнений Лотки-Вольтерры(«хищник-жертва») с использованием PINN.

Система уравнений Лотки-Вольтерры(«хищник-жертва»):

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = \alpha x - \beta xy, \\ \dfrac{dy}{dt} = -\gamma y + \delta xy, \end{cases} \qquad t > 0.$$

Начальные условия:

$$\begin{cases} x(0) = x_0, \\ y(0) = y_0. \end{cases}$$

Задача: Реализовать PINN метод решения задачи Коши для системы уравнений Лотки-Вольтерры(«хищник-жертва»). Исследовать влияние параметров на динамику популяций. Сравнить результаты с классическими численными методами.

Задача 5. Исследование влияния весового коэффициента в функции потерь PINN на точность решения.

Двумерное уравнение Пуассона:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y), \quad x \in \Omega.$$

Граничные условия Дирихле:

$$u(x, y) = g(x, y), \quad (x, y) \in \partial\Omega.$$

Задача: Реализовать PINN метод решения краевой задачи для уравнения Пуассона. Исследовать влияние весового коэффициента λ в функции потерь PINN на точность и эффективность решения.

Задача 6. Исследование влияния выбора точек обучения на решение PINN.

Дифференциальное уравнение Бесселя:

$$x^2 \frac{d^2 y}{dx^2} + x \frac{dy}{dx} + (x^2 - \alpha^2) y = 0.$$

Задача: Исследовать различные стратегии выбора точек обучения (равномерная сетка, случайное распределение, адаптивный выбор, квази-случайные последовательности) для нахождения функций Бесселя с помощью PINN.

Задача 7. Исследование влияния выбора функций активации на решение PINN для нахождения функции Эйри.

Дифференциальное уравнение Эйри:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} - xy = 0, \quad x \in (a, b).$$

Граничные условия:

$$\begin{cases} y(0) = \dfrac{1}{3^{2/3}\Gamma(2/3)}, \\ \dfrac{dy}{dx}(0) = -\dfrac{1}{3^{1/3}\Gamma(1/3)}. \end{cases}$$

Задача: Исследовать влияние различных функций активации (Sigmoid, Tanh, Softplus, Sin) на точность и эффективность нахождения функции Эйри с помощью PINN.

Задача 8. Исследование влияния вида задачи для уравнения гармонического осциллятора с вынуждающей силой на решение PINN.

Различные формулировки задачи Коши для уравнения гармонического осциллятора с вынуждающей силой:

— ОДУ второго порядка:

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

— Система ОДУ первого порядка:

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

— Альтернативная система ОДУ первого порядка:

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = \omega_0 y + \dfrac{1}{\omega}\sin(\omega t) \\ \dfrac{dy}{dt} = -\omega_0 x, \\ x(0) = x_0, \\ y(0) = \dfrac{v_0}{\omega_0}; \end{cases}$$

— Другие.

Задача: Исследовать влияние различных формулировок задачи на точность и эффективность решения задачи Коши для уравнения гармонического осциллятора с вынуждающей силой методом PINN.

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 //PyTorch. — 2024. — URL: https://pytorch.org/docs/stable/index.html.

4. TensorFlow documentation //TensorFlow. — 2024. — URL: https://www.tensorflow.org/api_docs.

5. PyKAN: Python Library for Kolmogorov-Arnold Network //GitHub. — 2024. — URL: https://kindxiaoming.github.io/pykan/