# Implicit weak adversarial networks to solve stochastic partial differential equations

Кафедра интеллектуального анализа данных

Доклад подготовил: Папай Иван

# Постановка задачи: Эллиптические PDE

## Общая форма краевой задачи

Найти $u : \Omega \subset \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ такую, что:

$$\begin{cases} -\sum_{i=1}^{d} \partial_i \left( \sum_{j=1}^{d} a_{ij} \partial_j u \right) + \sum_{i=1}^{d} b_i \partial_i u + cu = f, & \text{в } \Omega \\ u = g \text{ (Дирихле)} \quad \text{или} \quad \frac{\partial u}{\partial \vec{n}} = g \text{ (Нейман)}, & \text{на } \partial\Omega \end{cases}$$

## Условие сильной эллиптичности

Существует $\theta > 0$ такое, что:

$$\xi^\top A(x) \xi \geq \theta |\xi|^2 \quad \forall \xi \in \mathbb{R}^d, \; x \in \Omega \text{ п.в.}$$

где $A(x) = [a_{ij}(x)] \in \mathbb{R}^{d \times d}$ симметрична.

# Параболические PDE

## Начально-краевая задача

Найти $u : \Omega \times [0, T] \to \mathbb{R}$ такую, что:

$$\begin{cases} u_t - \sum_{i=1}^{d} \partial_i \left( \sum_{j=1}^{d} a_{ij} \partial_j u \right) + \sum_{i=1}^{d} b_i \partial_i u + cu = f, & \text{в } \Omega \times [0, T] \\ \text{Граничные условия на } \partial\Omega \times [0, T] & \\ u(x, 0) = h(x), & \text{в } \Omega \end{cases}$$

## Операторная форма

$$u_t + L(x, t; u) = f$$

где

$$L(x, t; u) = -\nabla \cdot (A \nabla u) + \mathbf{b} \cdot \nabla u + cu$$

# Слабая формулировка PDE

## Общий вид эллиптического PDE

$$-\nabla \cdot (A\nabla u) + \mathbf{b} \cdot \nabla u + cu = f \quad \text{в } \Omega$$

## Слабая форма

Найти $u \in H^1(\Omega)$ такую, что:

$$\langle A[u], \varphi \rangle = 0 \quad \forall \varphi \in H^1_0(\Omega)$$

где

$$\langle A[u], \varphi \rangle = \int_\Omega (A\nabla u \cdot \nabla \varphi + \mathbf{b}\varphi \cdot \nabla u + cu\varphi - f\varphi)\, dx$$

# Ключевая идея WAN

## Минимаксная переформулировка

$$\|A[u]\|_{op} = \sup_{\varphi \neq 0} \frac{|\langle A[u], \varphi \rangle|}{\|\varphi\|_2}$$

$$u \text{ – решение} \Leftrightarrow \|A[u]\|_{op} = 0$$

## Задача оптимизации

$$\min_u \max_\varphi \frac{|\langle A[u], \varphi \rangle|^2}{\|\varphi\|_2^2}$$

- $\min_u$: найти решение PDE
- $\max_\varphi$: найти "наихудшую"тестовую функцию

# Функция потерь и обучение

## Общая функция потерь

$$L(\theta, \eta) = \underbrace{\log |\langle A[u_\theta], \varphi_\eta \rangle|^2 - \log \|\varphi_\eta\|_2^2}_{\text{Внутренняя область}} + \alpha \underbrace{L_{\text{bdry}}(\theta)}_{\text{Граница}}$$

## Adversarial обучение

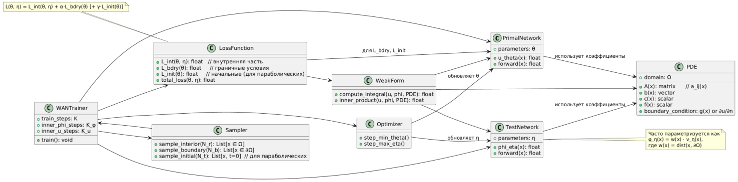
1. Фиксируем $u_\theta$, обновляем $\varphi_\eta$:

$$\eta \leftarrow \eta + \tau_\eta \nabla_\eta L(\theta, \eta)$$

2. Фиксируем $\varphi_\eta$, обновляем $u_\theta$:

$$\theta \leftarrow \theta - \tau_\theta \nabla_\theta L(\theta, \eta)$$

# Архитектура WAN: Две соревнующиеся сети




## Primal Network $u_\theta$

- Аппроксимирует **решение** PDE
- Минимизирует остаток
- Выход: $u_\theta(x)$

## Test Network $\varphi_\eta$

- Аппроксимирует **тестовую функцию**
- Максимизирует остаток
- Выход: $\varphi_\eta(x)$

# Параболические PDE: Уравнение теплопроводности

## Постановка задачи

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla u) + f(x, t), & (x, t) \in \Omega \times [0, T] \\ u(x, 0) = u_0(x), & x \in \Omega \\ u = g \text{ на } \partial\Omega \end{cases}$$

## Слабая форма с интегрированием по времени

$$\langle A[u], \varphi \rangle = \int_\Omega (u_T \varphi_T - u_0 \varphi_0) dx - \int_0^T \int_\Omega u \partial_t \varphi dx dt +$$

$+\int_0^T \int_\Omega D \nabla u \cdot \nabla \varphi dx dt$

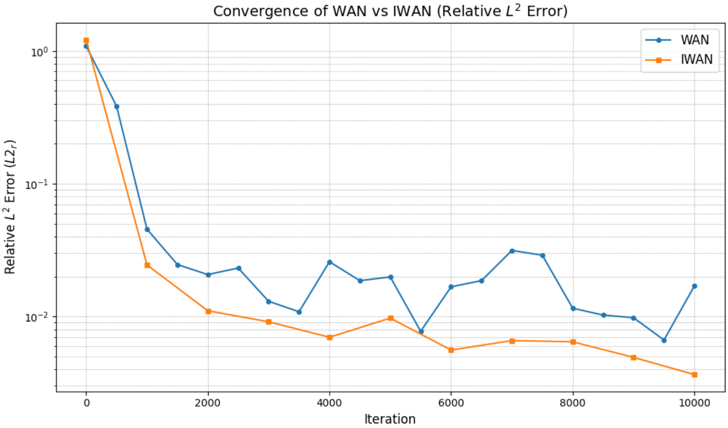
# Сравнение архитектур: WAN, IWAN, XWAN

| **Параметр** | **WAN** | **IWAN** | **XWAN** |
|---|---|---|---|
| Активации | ReLU/tanh | **SIREN (sin)** | Neural ODE |
| Производные | Кусочно-гладкие | **Аналитические** | Точные (ODE) |
| Скорость | Быстрая | Средняя | **Оч. медл.** |
| Сходимость | Медл. (гладк.) | **Быстр. (гладк.)** | Теор. идеал. |
| Память | Малая | Малая | **Огромная** |
| Практичность | **Высокая** | **Высокая** | Низкая |

## Подходы по моделированию primal network

- **IWAN** (SIREN): SIREN-Block
- **XWAN**: XNode-Block
- **WAN**: DNN

# Сравнение WAN и IWAN



# Применение к диффузионным моделям

## Связь с уравнением Фоккера-Планка

Диффузионный процесс:

$$dx_t = f(x_t, t)dt + g(t)dw_t$$

Его плотность $p(x, t)$ удовлетворяет:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\nabla \cdot (fp) + \frac{1}{2}g^2 \Delta p$$

## WAN для обучения диффузионных моделей

- Параметризация: $p_\theta(x, t)$ или $s_\theta(x, t) = \nabla \log p_\theta$
- Обучение через слабую форму Фоккера-Планка
- **Преимущество**: Не нужны сэмплы из процесса

# Заключение

### Основные свойства WAN

- **Высокие размерности**: $d \sim 100$ и более
- **Физическая интерпретация**: Слабая форма

### Что предлагается

- **IWAN**: Теория SIREN для PDE + доказательство сходимости
- **Связь**: Weak PDE solvers $\leftrightarrow$ Diffusion models
- **Приложения**: Генеративное моделирование через PDE