Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»
Кафедра «школы бакалавриата (школа)»

Оценка работы___100___
Руководитель от УрФУ Кошелев А.А.

Тема задания на практику

Методы решения дифференциальных уравнений на основе искусственных нейронных сетей.

ОТЧЕТ
Вид практики Производственная практика
Тип практики Производственная практика, Научно-исследовательская работа

Руководитель практики от предприятия (организации) Кошелев АА
ФИО руководителя Подпись

Студент Кузнецов И.А.
ФИО студента

Специальность (направление подготовки) 01.03.01 Математика

Группа МЕН-490102

Екатеринбург 2023

Содержание

1 Введение

В последние годы нейронные сети получили широкое распространение, они широко используются для анализа и генерации изображений и видео, обработки естественных языков (перевод, чат-боты), медицинской диагностике, финансовых прогнозах и так далее.

Одним из перспективных направлений в этой области являются так называемые PINN – Physics-Informed Neural Networks, физически-информированные нейронные сети. Классические нейронные сети используют большую выборку реальных данных, однако в естественно-научных областях, таких как физика, химия, биология и т.д. зачастую может просто не хватать нужного объёма данных для обучения. PINN способны обойти это ограничения, используя в обучении знания законов физики, описываемые дифференциальными уравнениями в частных производных. Это позволяет использовать неполные и зашумленные данные, что делает их полезными в реальных научных задачах. Однако, вычислительная сложность PINN выше, чем у классических нейронных сетей, что требует большого количества вычислительных мощностей.

Впервые терми PINN был введён в статье [1]. В ней автор дал формальное определение PINN'ам и рассмотрел решение нескольких задач: уравнение Шрёдингера, Навье-Стокса, Ален-Чана.

В настоящее время PINN широко применяются моделировании, анализе широкого спектра физических явлений:

В статье [2] рассматривается задача симуляции циклической вольтометрии, исследователями было рассмотрено несколько случая: одномерная вольтометрия на дисковом электроде с полубесконечными или тонкослойными граничными условиями, двумерная вольтометрия на микрополосковом электроде и наконец вольтаметрия на края квадратного электрода, количественно определяя неравномерное распределение тока вблизи угла электрода. Для моделирования был использован перцептрон использующий от трёх до шести скрытых словёв, и гиперболический тангенс в качестве функции активации. Полученные исследователями данные хорошо согласуются с решениями этих же задач, полученными другими способами.

Так же PINN применяются для: анализа литий-ионных батарей[3, 4], для моделирование теплопереноса в системах со сложной геометрией [5, 6], решения уравнения Навье-Стокса для моделаирования турбулентности [7], химической кинематике [8, 9]. Для изучения биологических процессов существует разновидность PINN'ов – BINN (Biologically-informed neural network) [10]

2 Постановка задачи

2.1 Цель работы

Рассмотреть уже решённую физическую задачу, решить её с помощью PINN и сравнить полученные данные с изначальным решением, оценить целесообразность применения PINN к задаче.

2.2 Описание задачи

На вход нейросети подаются пространственно-временные координаты. На выходе хотим получить различные характеристики исследуемого физического процесса.

3 Теоретическое описание PINN

Пусть система описывается неким системой дифференциальных уравнений

$$F_j(\lambda, u) = 0, X \in \Omega, t > 0 \tag{1}$$

и набором граничных условий

$$u(t_0, x_0) = u_0 \tag{2}$$

где x – пространственные координаты, Ω – некоторая область в $\mathbb{R}^n$, t – время, $u(t,x)$ – искомая функция описывающая интересующие нас свойства системы (скорость, плотность, потенциал и т.п.), λ – вектор параметров. Для того что бы нейросеть могла обучаться на заданных уравнениях включим эти функции в функцию потерь в виде среднеквадратичной ошибки

$$MSE = MSE_F + MSE_0 \tag{3}$$

где

$$MSE_F = \sum_j \frac{1}{N_F} \sum_{i=1}^{N_F} (F_j(u(t_f^i, x_f^i)))^2 \tag{4}$$

требует соблюдения дифуров, описывающих процесс, здесь $\left\{t_f^i, x_f^i\right\}_{i=1}^{N_F}$ – точки коллокации для F_i и

$$MSE_0 = \frac{1}{N_0} \sum_{i=1}^{N_0} ((u(t_0^i, x_0^i)) - u_0^i)^2 \tag{5}$$

требует соблюдения граничных условий, $(t_0^i, x_0^i, u_0^i)_{i=1}^{N_0}$ – начальные и граничные условия $u(t,x)$.

4 Эксперементы

4.1 Физическое описание задач

Для примера возьмём систему из [11]. Она описывается следующими уравнениями

$$\begin{aligned}
\vec{j} &= -D\nabla c - \xi zec\nabla\Phi + c\vec{u} \\
\partial_t c &= -\nabla \cdot \vec{j} \\
\nabla^2\Phi &= -4\pi l_{\mathrm{B}} k_{\mathrm{B}} T zc \\
\rho\big(\partial_t \vec{u} + (\vec{u}\cdot\nabla)\vec{u}\big) &= -\nabla p_H + \eta\nabla^2\vec{u} - (k_{\mathrm{B}}T\nabla c + zec\nabla\Phi) \\
\nabla\cdot\vec{u} &= 0
\end{aligned}$$

Здесь

- c – концентрация ионных частиц,
- j – поток плотности,
- $\vec{v}$ – адвективная скорость жидкости,
- e – заряд электрона
- z – валентность частиц,
- Φ – электростатический потенциал,
- ξ – подвижность частиц,
- D – коэффициент диффузии частиц,
- l_B – длина Бьеррума, $l_B = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon k_B T}$
- k_B – постоянная Больцмана,
- T – температура,
- ρ – плотность жидкости
- p_H – гидродинамическое давление

Первое уравнение в системе описывает поток плотности, второе электростатику, третье гидродинамику с помощью уравнения Навье-Стокса, четвёртое уравнение несжимаемости жидкости.

Рассмотрим систему щелевых пор, состоящую из двух одноимённо заряженных бесконечных пластин. Выпишем для такой системы граничные условия

$$
\begin{aligned}
c(t, X_l) &= 0.01 \\
c(t, X_r) &= 0.01 \\
c(0, X) &= 0.002 \\
\vec{v}(t, X_l) &= 0 \\
\vec{v}(t, X_r) &= 0 \\
\vec{v}(0, X) &= 0 \\
\Phi(t, X_l) &= -0.05 \\
\Phi(t, X_r) &= -0.05 \\
\Phi(0, X) &= -0.009x^2 + 2
\end{aligned}
$$

здесь t – время, X_l – пространственные координаты, соответствующие левой стенке, X_r – правой, x в формул для $\Phi(0, x)$ соответствует оси, перпендикулярной пластинам.

4.2 Вычисление с помощью PINN

Реализовывать нейросеть будем с помощью библиотеки `tensorflow`. Для вычисления функции будем использовать обычный трёхслойный перцептрон, на вход ему мы будем подавать пространственно временные координаты, на выходе будем получать концентрацию c, скорость v и потенциал Φ. Для обучения мы оберём эту нейросеть в PINN, на вход он получает внутреннюю точку, а так же точку с левой границы, правой границы и точку в начальный момент времени, все 4 точки поочерёдно передаются в нейросеть, для результатов внутренней точки дополнительно вычислим производные с помощью `tf.GradientTape`. Из всех полученных данных составляем уравнения вида $F(t, X) = 0$ и передаём в качестве выхода. В качестве оптимизатора воспользуемся adam'ом, в качестве функции потерь MSE. Далее мы обучаем PINN выдавать 0 по всем выходам, подавая для каждого входа случайные точки, это будет означать, что все уравнения выполняются и внутренняя нейросеть выдаёт правильные значения.

Рассмотрим в начале двумерный случай. Скрытые слои будут иметь размеры 80 и 40, входной слой 4, один для концентрации, два для скорости и один для потенциала, функция активации tanh (гиперболический тангенс). Результат работы после 5000000 итераций показан на графике 1

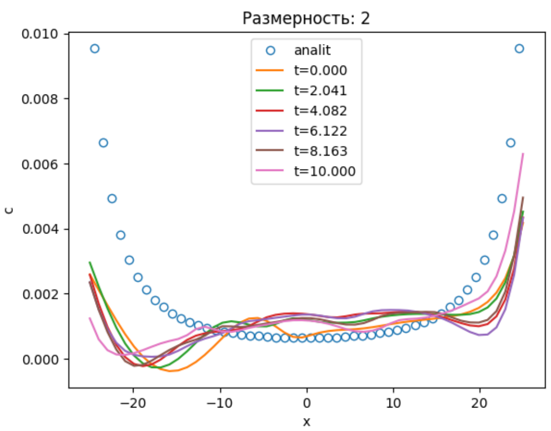

Рис. 1

Рассмотрим теперь трёхмерный случай. Скрытые слои так же будут иметь размеры 80 и 40, входной слой 5, один для концентрации, три для скорости и один для потенциала, функция активации $relu$. Результат работы после 30000000 итераций показан на графике 2

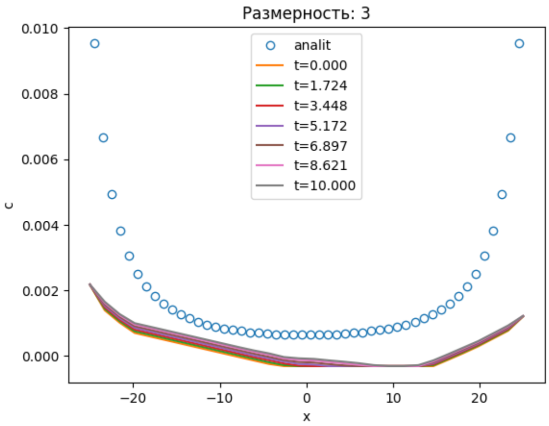

Рис. 2

5 Заключение

Мы написали и протестировали PINN, который решает задачу электрокинетики о системе щелевых пор, состоящих из двух одноимённо заряженных бесконечных пластин. На данном этапе не удалось достичь достаточно точных результатов. Связанно это может быть как со сложностью самих исходных уравнений, так и с недостаточным временем обучения модели. Так же возможно что при задании уравнений была допущена ошибка

6 Список литературы

[1] Maziar Raissi, Paris Perdikaris, and George Em Karniadakis. Physics informed deep learning (part i): Data-driven solutions of nonlinear partial differential equations, 2017.

[2] Haotian Chen, Enno Kätelhön, and Richard G. Compton. Predicting voltammetry using physics-informed neural networks. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 13(2):536–543, 2022. PMID: 35007069.

[3] Muratahan Aykol, Chirranjeevi Balaji Gopal, Abraham Anapolsky, Patrick K. Herring, Bruis van Vlijmen, Marc D. Berliner, Martin Z. Bazant, Richard D. Braatz, William C. Chueh, and Brian D. Storey. Perspective-combining physics and machine learning to predict battery lifetime. *Journal of the Electrochemical Society*, 168(3), 2021.

[4] Renato G. Nascimento, Matteo Corbetta, Chetan S. Kulkarni, and Felipe A. C. Viana. Hybrid physics-informed neural networks for lithium-ion battery modeling and prognosis. *Journal of Power Sources*, 1(513), 2021.

[5] Navid Zobeiry and Keith D. Humfeld. A physics-informed machine learning approach for solving heat transfer equation in advanced manufacturing and engineering applications. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 101:104232, 2021.

[6] Shengze Cai, Zhicheng Wang, Sifan Wang, Paris Perdikaris, and George Em Karniadakis. Physics-Informed Neural Networks for Heat Transfer Problems. *Journal of Heat Transfer*, 143(6), 04 2021. 060801.

[7] Fabian Pioch, Jan Hauke Harmening, Andreas Maximilian Müller, Franz-Josef Peitzmann, Dieter Schramm, and Ould el Moctar. Turbulence modeling for physics-informed neural networks: Comparison of different rans models for the backward-facing step flow. *Fluids*, 8(2), 2023.

[8] Weiqi Ji, Weilun Qiu, Zhiyu Shi, Shaowu Pan, and Sili Deng. Stiff-pinn: Physics-informed neural network for stiff chemical kinetics. *The Journal of Physical Chemistry A*, 125(36):8098–8106, 2021. PMID: 34463510.

[9] Gabriel S. Gusmão, Adhika P. Retnanto, Shashwati C. da Cunha, and Andrew J. Medford. Kinetics-informed neural networks. *Catalysis Today*, 2022.

[10] John H. Lagergren, John T. Nardini, Ruth E. Baker, Matthew J. Simpson, and Kevin B. Flores. Biologically-informed neural networks guide mechanistic modeling from sparse experimental data, 2020.

[11] Jean-Noël Grad. Electrokinetics.