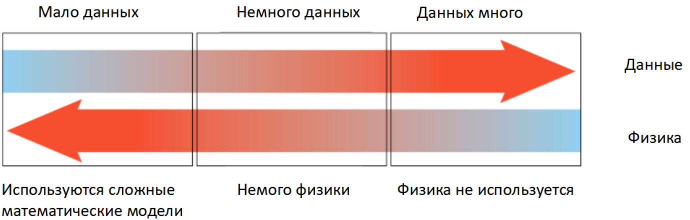
Возможность использования искусственных нейронных сетей для решения задач математической физики

Кузнецов Игорь Александрович МЕН-490102

Physics-informed neural networks (PINN, физически информированные нейронные сети) – разновидность нейронных сетей, способные решать задачи математической физики. В отличии от классических нейронных сетей, использующих большую выборку данных для обучения, PINN используют уравнения, описывающие физическую систему, что позволяет им обучаться на сравнительно небольших объёмах обучающих данных.



https://www.nature.com/articles/s42254-021-00314-5

Глубокие нейронные сети

Нейрон

$$f(z,\theta) = h(wz + b),$$

Глубокая нейронная сеть

$$\begin{aligned} q^{(0,n)} &= h(w^{(0,n)}z + b^{(0,n)}), n = 1, ..., N \\ q^{(l,n)} &= h(w^{(l,n)q^{(l-1,i)}+b^{(l,n)}}), n = 1, ..., N,\ l = 1, ..., L-1 \\ q^{(L)} &= w^{(L)}q^{(L-1)} + b^{(L)}. \end{aligned}$$

Обозначим сеть как $\bar{u}(z,\theta) = q^{(L)}$.
Обучение сети $\bar{u}$ на выборке $T = \{z_i, u_i\}_{i=1}^{N_f}$

$$\theta = \min_{\theta} \|\bar{u}(z_i,\theta) - u_i\|, i = 1, ..., N_f.$$

Устройство PINN

Система уравнений

$$F_j(z, u, \lambda_j) = F_j(z, u, u'_{z^1}, u''_{z^1}, ..., \lambda_j) = 0, z \in \Omega, j = \overline{1, N},$$

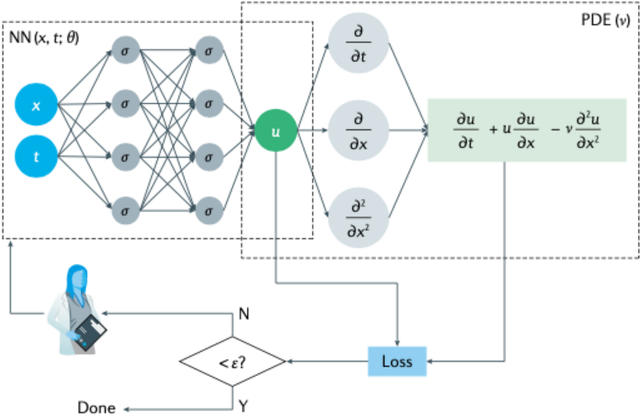
Граничные условия

$$B_k(z_0, u) = 0, z_0 \in \partial\Omega, k = \overline{1, K},$$

$\bar{u}$ – нейронная сеть, аппроксимирующая решение u.
Функция потерь

$$\begin{aligned} MSE &= MSE_f + MSE_b \\ &= \sum_{j=1}^{N} \frac{1}{N_f} \sum_{i=1}^{N_f} F_j^2(z_i, \bar{u}(z_i), \lambda_j) + \sum_{k=1}^{K} \frac{1}{N_b} \sum_{b=1}^{N_b} (\bar{u}(z_b) - u_b)^2. \end{aligned}$$

Схема работы PINN



https://doi.org/10.1038/s42254-021-00314-5

Распределение тепла в кольце

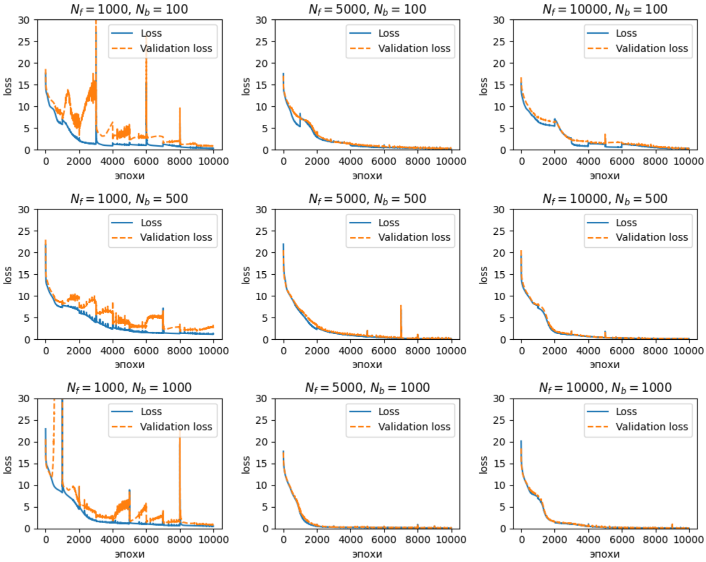
Уравнение

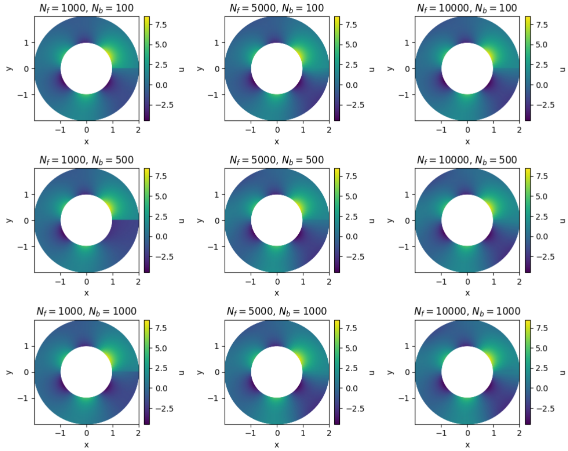
$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 u}{\partial \phi^2} = 0.$$

Граничные условия

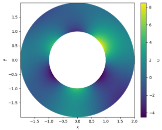
$$u(1,\phi) = \cos\phi + \sin\phi + \sin(2\phi) + 5\sin(3\phi) + 1,$$
$$u(2,\phi) = \sin(2\phi) + \sin(3\phi) + \cos(4\phi).$$

Обучение PINN





(a) Решение с PINN



(b) Аналитическое решение

Задача электрокинетики

Система

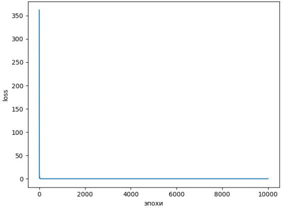
$$\vec{j} = -D\nabla c - \xi zec\nabla\Phi + cv,$$
$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{j},$$
$$\nabla^2\Phi = -4\pi l_{\mathrm{B}} k_{\mathrm{B}} T z c,$$
$$\rho\left(\frac{\partial v}{\partial t} + (v \cdot \nabla)v\right) = -\nabla p_H + \eta\nabla^2 v - (k_{\mathrm{B}} T\nabla c + zec\nabla\Phi),$$
$$\nabla \cdot v = 0.$$

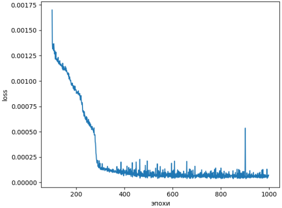
Граничные условия

$$c(t, X_l) = 0.01, c(t, X_r) = 0.01, c(0, X) = 0.002$$
$$v(t, X_l) = 0, v(t, X_r) = 0, v(0, X) = 0$$
$$\Phi(t, X_l) = -0.05, \Phi(t, X_r) = -0.05, \Phi(0, X) = -0.009x^2 + 2.$$

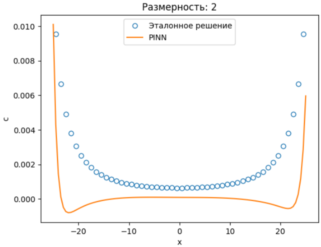
Двухмерный случай

Обучение



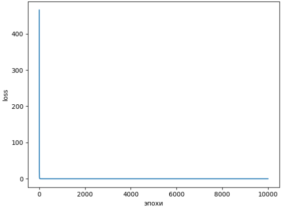


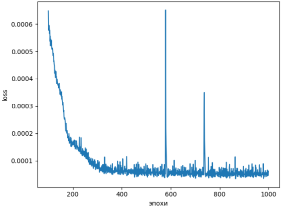
Результат



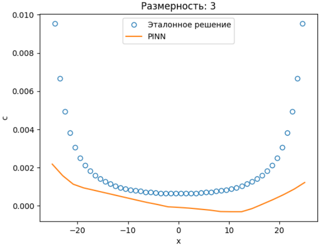
Трёхмерный случай

Обучение





Результат



Результаты работы

- Для тестовой системы применен метод решения с помощью PINN и получено хорошее согласование с аналитическим решением.
- Для системы описывающей задачу электрокинетики в системе щелевой поры применён метод решения с помощью PINN и получено неудовлетворительное согласование и поиск причин - предмет дальнейших исследований.

Спасибо за внимание