УДК 519.63

Применение метода PINNs на плоских многообразиях

М.С. Кувакин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Технология PINNs, предложенная в 2017 году в статье [1], сводит задачу решения дифференциальных уравнений к задаче оптимизации и имеет ряд преимуществ по сравнению с классическими численными методами, поскольку не дискретизирует область решения. Кроме того, существенным преимуществом является гибкость такого подхода, поскольку задачу оптимизации можно как угодно усложнять и переформулировать, добавляя и изменяя слагаемые минимизируемой функции. Это позволяет подстраивать метод под особенности задачи, улучшая получаемые результаты, что и продемонстрировано в работах [2, 3]. В данной работе предложена и испытана адаптация метода PINNs для решения дифференциальных уравнений на плоских многообразиях.

Рассматриваемый метод подразумевает нахождение решения в виде нейросети, которая бы удовлетворяла уравнению, начальным и граничным условиям. В классическом подходе минимизируемая оптимизатором функция формулируется следующим образом:

$$Loss = \frac{1}{N_{eq}}\sum_{i=1}^{N_{eq}} |D \circ NN(\boldsymbol{x_i^{eq}})|^2 + \frac{1}{N_c}\sum_{i=1}^{N_c} |NN(\boldsymbol{x_i^c}) - U_c(\boldsymbol{x_i^c})|^2$$

Здесь $D \circ NN(\boldsymbol{x_i})$ – результат подстановки нейросети в уравнение в точке $\boldsymbol{x_i}$, $NN(\boldsymbol{x_i})$ – значение нейросети в точке $\boldsymbol{x_i}$, $U_c(\boldsymbol{x_i})$ – начальное или граничное условие в данной точке. Для решения уравнения на плоском многообразии предлагается рассмотреть его на склейке, то есть плоской области с отождествлёнными определённым образом сторонами. Для отождествления сторон необходимо добавить новое слагаемое, регулирующее поведение функции на краях рассматриваемой области. С учётом этого слагаемого минимизируемая функция примет вид:

$$Loss = \frac{1}{N_{eq}}\sum_{i=1}^{N_{eq}} |D \circ NN(\boldsymbol{x_i^{eq}})|^2 + \frac{1}{N_c}\sum_{i=1}^{N_c} |NN(\boldsymbol{x_i^c}) - U_c(\boldsymbol{x_i^c})|^2 + \frac{1}{N_e}\sum_{i=1}^{N_e} |NN(\boldsymbol{x_i^e}) - NN(\boldsymbol{x_{k(i)}^e})|^2$$

Где $\boldsymbol{x_{k(i)}}$ –точка на крае области, сопоставляемая точке $\boldsymbol{x_i}$ с другого края.
В качестве примера рассматривается уравнение теплопроводности на плоском листе Мёбиуса:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = a^2\left(\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right) + f(x,y,t) \\ \qquad u(x,y,0) = u_0(x,y) \end{cases}, \qquad x \in [0,2\pi]\ \ y \in [-1,+1]\ \ t \in [0,1]$$

В данном случае нужно склеить два края рассматриваемой прямоугольной области: $(0,y,t)$ и $(2\pi,y,t)$. Для решения это означает, что оно должно удовлетворять условию: $u(0,y,t) = u(2\pi,-y,t)$. Реализация данной идеи с использованием библиотеки PyTorch, предоставляющей возможности автоматического дифференцирования, дала достаточно точные решения, см. табл. 1

Таблица 1. Точности решений частных случаев уравнения теплопроводности

$u_0(x,y)$	$f(x,y,t)$	MSE_c	MSE_{eq}	MSE_e
$5 \cdot \exp(-\frac{8}{10}\left(x - \frac{3\pi}{2}\right)^2 - -8(y+1)^2)$	0	$3{,}68\cdot10^{-4}$	$2{,}01\cdot10^{-4}$	$4{,}83\cdot10^{-5}$
0	$5 \cdot \exp(-\frac{3}{10}\left(x - \frac{3\pi}{2}\right)^2 - (y+1)^2) \cdot \sin(2\pi t)$	$1{,}40\cdot10^{-6}$	$1{,}32\cdot10^{-5}$	$4{,}19\cdot10^{-6}$

0	$5 \cdot \exp(-3(x-1-2(\pi-1)t)^2 - 5(y+1-2t)^2)$	$6{,}92\cdot10^{-6}$	$1{,}06\cdot10^{-5}$	$1{,}62\cdot10^{-6}$
0	$5 \cdot \sin(\frac{3x}{2} + 2\pi t) \cdot \sin(\pi y)$	$9{,}16\cdot10^{-5}$	$2{,}85\cdot10^{-4}$	$1{,}39\cdot10^{-5}$

При этом используемые для измерения точности метрики имеют тот же вид, что и слагаемые в минимизируемой функции, но используют большее количество точек:

$$MSE_{c} = \frac{1}{\widetilde{N_c}} \sum_{i=1}^{\widetilde{N_c}} (u_{pred}(x_i, y_i, 0) - u_0(x_i, y_i, 0))^2$$

$$MSE_{eq} = \frac{1}{\widetilde{N_{eq}}} \sum_{i=1}^{\widetilde{N_{eq}}} \left(\frac{\partial u_{pred}}{\partial t}(x_i, y_i, t_i) - a^2 \left(\frac{\partial^2 u_{pred}}{\partial x^2}(x_i, y_i, t_i) + \frac{\partial^2 u_{pred}}{\partial y^2}(x_i, y_i, t_i) \right) - f(x_i, y_i, t_i) \right)^2$$

$$MSE_e = \frac{1}{\widetilde{N_e}} \sum_{i=1}^{\widetilde{N_e}} (u_{pred}(0, y_i, t_i) - u_{pred}(2\pi, -y_i, t_i))^2$$

Основным результатом данной работы является не численное решение уравнения теплопроводности на плоском листе Мёбиуса, а подтверждение возможности использования технологии PINNs для решения дифференциальных уравнений на плоских многообразиях, способных иметь различную структуру.

Вычислительные эксперименты проведены с использованием оборудования центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт» (http://ckp.nrcki.ru/).

Литература

1. *Raissi M., Perdikaris P., Karniadakis G.* Physics Informed Deep Learning (Part I): Data-driven Solutions of Nonlinear Partial Differential Equations //arXiv preprint. [2017]. arXiv:1711.10561v1
2. *Jagtap A. D.* [et al.]. Conservative physics-informed neural networks on discrete domains for conservation laws: Applications to forward and inverse problems // Comput. Methods Appl. Mech. Eng. 2020. V.365: 113028. DOI:10.1016/j.cma.2020.113028.
3. *Kharazmi E.* [et al.]. hp-VPINNs: Variational Physics-Informed Neural Networks With Domain Decomposition // Comput. Methods Appl. Mech. Eng. 2021. V. 374: 113547. DOI:10.1016/j.cma.2020.113547.