Глубокое обучение для одномерного волнового уравнения с неклассическим вариационным принципом

Рассмотрим построение вариационной формулировки для уравнений колебаний конечной струны

$$u_{tt} - u_{xx} = 0 \tag{1}$$

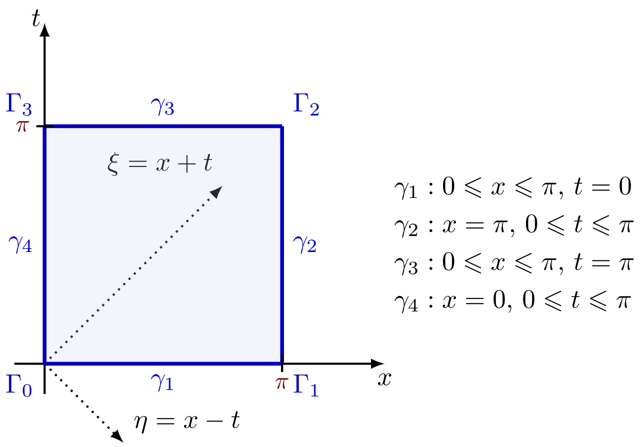
в квадратной области $\Omega = [0,\, \pi] \times [0,\, \pi]$. Здесь и далее буквенные нижние индексы будут означать дифференцирование по соответствующей переменной.

Граница $\partial\Omega$ области Ω является объединением четырех отрезков $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4$:

$$\partial\Omega = \gamma_1 \cup \gamma_2 \cup \gamma_3 \cup \gamma_4,$$

где отрезки $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4$ задаются следующими соотношениями

$$\begin{aligned}
\gamma_1 &= \left\{(x,t) \mid 0 \leqslant x \leqslant \pi,\, t = 0\right\},\\
\gamma_2 &= \left\{(x,t) \mid x = \pi,\, 0 \leqslant t \leqslant \pi\right\},\\
\gamma_3 &= \left\{(x,t) \mid 0 \leqslant x \leqslant \pi,\, t = \pi\right\},\\
\gamma_4 &= \left\{(x,t) \mid x = 0,\, 0 \leqslant t \leqslant \pi\right\}.
\end{aligned}$$



Зададим следующие граничные условия на $\partial\Omega$:

$$\begin{cases}
u\,|_{\gamma_1} = 0,\ 0 \leqslant x \leqslant \pi,\ t = 0,\\
u_x\,|_{\gamma_2} = -\sin t,\ x = \pi,\ 0 \leqslant t \leqslant \pi,\\
u_t\,|_{\gamma_2} = 0,\ x = \pi,\ 0 \leqslant t \leqslant \pi,\\
u_x\,|_{\gamma_3} = 0,\ 0 \leqslant x \leqslant \pi,\ t = \pi,\\
u_t\,|_{\gamma_3} = -\sin x,\ 0 \leqslant x \leqslant \pi,\ t = \pi,\\
u_x\,|_{\gamma_4} = \sin t,\ x = 0,\ 0 \leqslant t \leqslant \pi\\
u_t\,|_{\gamma_4} = 0,\ x = 0,\ 0 \leqslant t \leqslant \pi.
\end{cases} \tag{2}$$

Непосредственной подстановкой можно убедиться, что уравнению (1) с граничными условиями (2) удовлетворяет функция

$$u\,(x,t) = \sin x\, \sin t = \frac{1}{2}\left(\cos\left(x - t\right) - \cos\left(x + t\right)\right). \tag{3}$$

Построим для краевой задачи (1)–(2) неклассический вариационный принцип, следуя подходу В.М.Шалова (В. М. Шалов, “Принцип минимума квадратичного функционала для гиперболического уравнения”, Дифференц. уравнения, 1:10 (1965), 1338–1365).

Метод построения вариационной формулировки для волнового уравнения, предложенный В.М.Шаловым, состоит в построении двух векторных операторов $\mathbf{A}$ и $\mathbf{B}$, таких, что оператор $\mathbf{A}$ является $\mathbf{B}$-симметричным:

$$\langle \mathbf{A}u,\, \mathbf{B}v \rangle = \langle \mathbf{B}u,\, \mathbf{A}v \rangle\ \forall u, v$$

и $\mathbf{B}$-положительным:

$$\langle \mathbf{A}u,\, \mathbf{B}u \rangle > 0\, \forall u \neq 0,$$

$$\langle \mathbf{A}u_n,\, \mathbf{B}u_n \rangle \to 0,\ n \to \infty \Rightarrow \|u_n\| \to 0,\ n \to \infty,$$

причем краевая задача для уравнения колебаний струны должна записываться в виде

$$\mathbf{A}\, u = \mathbf{f},$$

тогда функционал для вариационной задачи имеет вид

$$D\left[u\right] = \left\langle \mathbf{A}\, u,\, \mathbf{B}\, u \right\rangle - 2\left\langle \mathbf{f},\, \mathbf{B}\, u \right\rangle .$$

Следуя подходу В.М. Шалова, перейдем от независимых переменных $(x,\, t)$ к независимым переменным $(\xi,\, \eta)$, где

$$\xi = x + t,\; \eta = x - t,$$

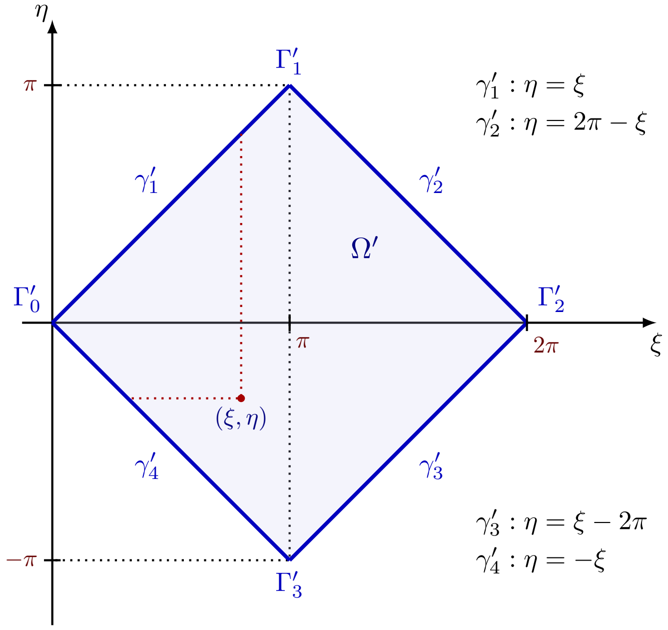
в которых уравнение колебаний струны (волновое уравнение) (1) примет вид

$$u_{\xi\eta} = 0, \tag{4}$$

точное частное решение (3) примет вид:

$$u\left(\xi, \eta\right) = \frac{1}{2}\left(\cos\eta - \cos\xi\right), \tag{5}$$

область Ω примет вид ромба Ω' с вершинами в точках $\Gamma'_0\,(0,\, 0)$, $\Gamma'_1\,(\pi,\, \pi)$, $\Gamma'_2\,(2\pi,\, 0)$, $\Gamma'_3\,(\pi,\, -\pi)$.



Обратный переход от переменных (ξ, η) к переменным $(x,\, t)$ задается формулами

$$x = \frac{1}{2}\left(\xi + \eta\right),\; t = \frac{1}{2}\left(\xi - \eta\right).$$

Граница $\partial\Omega'$ области Ω' состоит из четырех отрезков $\gamma'_1, \gamma'_2, \gamma'_3, \gamma'_4$:

$$\partial\Omega' = \gamma'_1 \cup \gamma'_2 \cup \gamma'_3 \cup \gamma'_4,$$

где отрезок γ'_1 соединяет точки $\Gamma'_0\,(0,\, 0)$ и $\Gamma'_1\,(\pi,\, \pi)$, отрезок γ'_2 соединяет точки $\Gamma'_1\,(\pi,\, \pi)$ и $\Gamma'_2\,(2\pi,\, 0)$, отрезок γ'_3 соединяет точки $\Gamma'_2\,(2\pi,\, 0)$ и $\Gamma'_3\,(\pi,\, -\pi)$, отрезок γ'_4 соединяет точки $\Gamma'_3\,(\pi,\, -\pi)$ и $\Gamma'_0\,(0,\, 0)$.

Для рассматриваемой нами области Ω' компоненты внешней нормали $\vec{n} = (n_1, n_2)$ к границе $\partial\Omega'$ на различных участках границы $\gamma'_1, \gamma'_2, \gamma'_3, \gamma'_4$ вычисляются по формулам:

$$\vec{n}\left(\gamma'_1\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-1,\, 1\right),\; \vec{n}\left(\gamma'_2\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1,\, 1\right),\; \vec{n}\left(\gamma'_3\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1,\, -1\right),\; \vec{n}\left(\gamma'_4\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-1,\, -1\right).$$

Построим векторные операторы $\mathbf{A}$ и $\mathbf{B}$ следующим образом. Первую компоненту векторного оператора $\mathbf{A}$, действующую на Ω', определим формулой

$$\left(\mathbf{A}\, u\right)_1 = u_{\xi\eta}.$$

Соответствующую первую компоненту вспомогательного (симметризующего) векторного оператора $\mathbf{B}$ на Ω' определим равенством

$$(\mathbf{B}\,v)_1 = \int\limits_{\xi}^{\gamma_1'\cup\gamma_4'} v_\eta\,(\zeta,\eta)\,d\zeta + \int\limits_{\eta}^{\gamma_1'\cup\gamma_2'} v_\xi\,(\xi,\tau)\,d\tau.$$

Здесь точка $(\xi,\,\eta)\in\Omega'$, интегрирование по переменной ζ ведется при фиксированном значении η от значения ξ до соответствующего значения на одной из кривых γ_1' или γ_4' (в зависимости от значения η), а интегрирование по переменной τ ведется при фиксированном значении ξ от значения η до соответствующего значения на одной из кривых γ_1' или γ_2'.

Вторые компоненты векторных операторов $\mathbf{A}$ и $\mathbf{B}$, действующие на отрезке границы γ_1', определим как тождественные отображения:

$$(\mathbf{A}\,u)_2 = u,\ (\mathbf{B}\,v)_2 = v.$$

Третьи компоненты векторных операторов $\mathbf{A}$ и $\mathbf{B}$, действующие на отрезке границы γ_2', определим формулами:

$$(\mathbf{A}\,u)_3 = u_\eta,\ (\mathbf{B}\,v)_3 = -n_1\,(\gamma_2')\int\limits_{\xi}^{\gamma_1'} v_\eta\,(\zeta,\eta)\,d\zeta.$$

Четвертые компоненты векторных операторов $\mathbf{A}$ и $\mathbf{B}$, действующие на отрезке границы γ_3', определим формулами:

$$(\mathbf{A}\,u)_4 = u_\eta,\ (\mathbf{B}\,v)_4 = -n_1\,(\gamma_3')\int\limits_{\xi}^{\gamma_4'} v_\eta\,(\zeta,\eta)\,d\zeta.$$

Пятые компоненты векторных операторов $\mathbf{A}$ и $\mathbf{B}$, также действующие на отрезке границы γ_3', определим формулами:

$$(\mathbf{A}\,u)_5 = u_\xi,\ (\mathbf{B}\,v)_5 = -n_2\,(\gamma_3')\int\limits_{\eta}^{\gamma_2'} v_\xi\,(\xi,\tau)\,d\tau.$$

Последние, шестые компоненты векторных операторов $\mathbf{A}$ и $\mathbf{B}$, действующие на отрезке границы γ_4', определим формулами:

$$(\mathbf{A}\,u)_6 = u_\xi,\ (\mathbf{B}\,v)_6 = -n_2\,(\gamma_4')\int\limits_{\eta}^{\gamma_1'} v_\xi\,(\xi,\tau)\,d\tau.$$

Итак, векторные операторы $\mathbf{A}$ и $\mathbf{B}$ равны

$$\mathbf{A}\,u = \begin{bmatrix} u_{\xi\eta} \\ u \\ u_\eta \\ u_\eta \\ u_\xi \\ u_\xi \end{bmatrix},\ \mathbf{B}\,v = \begin{bmatrix} \int_\xi^{\gamma_1'\cup\gamma_4'} v_\eta\,(\zeta,\eta)\,d\zeta + \int_\eta^{\gamma_1'\cup\gamma_2'} v_\xi\,(\xi,\tau)\,d\tau \\ v \\ -n_1\,(\gamma_2')\int_\xi^{\gamma_1'} v_\eta\,(\zeta,\eta)\,d\zeta \\ -n_1\,(\gamma_3')\int_\xi^{\gamma_4'} v_\eta\,(\zeta,\eta)\,d\zeta \\ -n_2\,(\gamma_3')\int_\eta^{\gamma_2'} v_\xi\,(\xi,\tau)\,d\tau \\ -n_2\,(\gamma_4')\int_\eta^{\gamma_1'} v_\xi\,(\xi,\tau)\,d\tau \end{bmatrix}.$$

Векторный оператор $\mathbf{A}$ является дифференциальным и определен на декартовом произведении $\Omega'\times\gamma_1'\times\gamma_2'\times\gamma_3'\times\gamma_3'\times\gamma_4'$, векторный оператор $\mathbf{B}$ является интегродифференциальным и также определен на $\Omega'\times\gamma_1'\times\gamma_2'\times\gamma_3'\times\gamma_3'\times\gamma_4'$.

Также для построения вариационной формулировки требуется вектор-функция $\mathbf{f}$, также определенная на $\Omega'\times\gamma_1'\times\gamma_2'\times\gamma_3'\times\gamma_3'\times\gamma_4'$, и равная

$$\mathbf{f} = \frac{1}{2}\sin\xi\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Скалярное произведение векторов $\mathbf{A}u$ и $\mathbf{B}v$ вычисляется путем перемножения соответствующих компонент, вычисления интегралов по соответствующим множествам и суммирования полчившихся значений согласно формуле

$$\langle \mathbf{A}u,\, \mathbf{B}v\rangle = \int\limits_{\Omega'} (\mathbf{A}\,u)_1\,(\mathbf{B}\,v)_1\; d\xi d\eta + \int\limits_{\gamma_1'} (\mathbf{A}\,u)_2\,(\mathbf{B}\,v)_2\; ds + \int\limits_{\gamma_2'} (\mathbf{A}\,u)_3\,(\mathbf{B}\,v)_3\; ds +$$

$$+ \int\limits_{\gamma_3'} (\mathbf{A}\,u)_4\,(\mathbf{B}\,v)_4\; ds + \int\limits_{\gamma_3'} (\mathbf{A}\,u)_5\,(\mathbf{B}\,v)_5\; ds + \int\limits_{\gamma_4'} (\mathbf{A}\,u)_6\,(\mathbf{B}\,v)_6\; ds$$

Вычислим первый интеграл $\int_{\Omega'} (\mathbf{A}\,u)_1\,(\mathbf{B}\,v)_1\; d\xi d\eta$, используя формулу интегрирования по частям для многомерного случая:

$$\int\limits_{\Omega'} (\mathbf{A}\,u)_1\,(\mathbf{B}\,v)_1\; d\xi d\eta = \int\limits_{\Omega'} u_{\xi\eta} \left[\int\limits_{\xi}^{\gamma_1'\cup\gamma_4'} v_\eta\,(\zeta,\eta)\, d\zeta + \int\limits_{\eta}^{\gamma_1'\cup\gamma_2'} v_\xi\,(\xi,\tau)\, d\tau \right] d\xi d\eta,$$

$$\int\limits_{\Omega'} u_{\xi\eta} \int\limits_{\xi}^{\gamma_1'\cup\gamma_4'} v_\eta\,(\zeta,\eta)\, d\zeta\, d\xi d\eta = \int\limits_{\Omega'} (u_\eta)_\xi \int\limits_{\xi}^{\gamma_1'\cup\gamma_4'} v_\eta\,(\zeta,\eta)\, d\zeta\, d\xi d\eta = \int\limits_{\partial\Omega'} u_\eta \int\limits_{\xi}^{\gamma_1'\cup\gamma_4'} v_\eta\,(\zeta,\eta)\, d\zeta\, n_1\, ds -$$

$$- \int\limits_{\Omega'} u_\eta \left(\int\limits_{\xi}^{\gamma_1'\cup\gamma_4'} v_\eta\,(\zeta,\eta)\, d\zeta \right)_\xi d\xi d\eta = \int\limits_{\partial\Omega'} u_\eta \int\limits_{\xi}^{\gamma_1'\cup\gamma_4'} v_\eta\,(\zeta,\eta)\, d\zeta\, n_1\, ds + \int\limits_{\Omega'} u_\eta v_\eta\, d\xi d\eta,$$

$$\int\limits_{\Omega'} u_{\xi\eta} \int\limits_{\eta}^{\gamma_1'\cup\gamma_2'} v_\xi\,(\xi,\tau)\, d\tau\, d\xi d\eta = \int\limits_{\Omega'} (u_\xi)_\eta \int\limits_{\eta}^{\gamma_1'\cup\gamma_2'} v_\xi\,(\xi,\tau)\, d\tau\, d\xi d\eta = \int\limits_{\partial\Omega'} u_\xi \int\limits_{\eta}^{\gamma_1'\cup\gamma_2'} v_\xi\,(\xi,\tau)\, d\tau\, n_2\, ds -$$

$$- \int\limits_{\Omega'} u_\xi \left(\int\limits_{\eta}^{\gamma_1'\cup\gamma_2'} v_\xi\,(\xi,\tau)\, d\tau \right)_\eta d\xi d\eta = \int\limits_{\partial\Omega'} u_\xi \int\limits_{\eta}^{\gamma_1'\cup\gamma_2'} v_\xi\,(\xi,\tau)\, d\tau\, n_2\, ds + \int\limits_{\Omega'} u_\xi v_\xi\, d\xi d\eta.$$

Здесь n_1, n_2 – компоненты внешней нормали $\vec{n} = (n_1, n_2)$ к границе $\partial\Omega'$ области Ω'. При вычислении криволинейных интегралов по контуру $\partial\Omega'$ внутренний интеграл $\int_\xi^{\gamma_1'\cup\gamma_4'} v_\eta\,(\zeta,\eta)\, d\zeta$ обращается в нуль на $\gamma_1' \cup \gamma_4'$, а внутренний интеграл $\int_\eta^{\gamma_1'\cup\gamma_2'} v_\xi\,(\xi,\tau)\, d\tau$ – на $\gamma_1' \cup \gamma_2'$, поэтому получаем

$$\int\limits_{\Omega'} (\mathbf{A}\,u)_1\,(\mathbf{B}\,v)_1\; d\xi d\eta = \int\limits_{\Omega'} (u_\xi v_\xi + u_\eta v_\eta)\; d\xi d\eta + \int\limits_{\gamma_2'\cup\gamma_3'} u_\eta \int\limits_{\xi}^{\gamma_1'\cup\gamma_4'} v_\eta\,(\zeta,\eta)\, d\zeta\, n_1\, ds +$$

$$+ \int\limits_{\gamma_3'\cup\gamma_4'} u_\xi \int\limits_{\eta}^{\gamma_1'\cup\gamma_2'} v_\xi\,(\xi,\tau)\, d\tau\, n_2\, ds$$

Преобразуем приведенные выше криволинейные интегралы по кривым $\gamma_2' \cup \gamma_3'$ и $\gamma_3' \cup \gamma_4'$:

$$\int\limits_{\gamma_2'\cup\gamma_3'} u_\eta \int\limits_{\xi}^{\gamma_1'\cup\gamma_4'} v_\eta\,(\zeta,\eta)\, d\zeta\, n_1\, ds + \int\limits_{\gamma_3'\cup\gamma_4'} u_\xi \int\limits_{\eta}^{\gamma_1'\cup\gamma_2'} v_\xi\,(\xi,\tau)\, d\tau\, n_2\, ds =$$

$$= \int\limits_{\gamma_2'} u_\eta \int\limits_{\xi}^{\gamma_1'} v_\eta\,(\zeta,\eta)\, d\zeta\, n_1\, ds + \int\limits_{\gamma_3'} u_\eta \int\limits_{\xi}^{\gamma_4'} v_\eta\,(\zeta,\eta)\, d\zeta\, n_1\, ds + \int\limits_{\gamma_3'} u_\xi \int\limits_{\eta}^{\gamma_2'} v_\xi\,(\xi,\tau)\, d\tau\, n_2\, ds + \int\limits_{\gamma_4'} u_\xi \int\limits_{\eta}^{\gamma_1'} v_\xi\,(\xi,\tau)\, d\tau\, n_2\, ds =$$

$$= \int\limits_{\gamma_2'} u_\eta \int\limits_{\xi}^{\gamma_1'} v_\eta\,(\zeta,\eta)\, d\zeta\, n_1\, ds + \int\limits_{\gamma_3'} \left[u_\eta \int\limits_{\xi}^{\gamma_4'} v_\eta\,(\zeta,\eta)\, d\zeta\, n_1 + u_\xi \int\limits_{\eta}^{\gamma_2'} v_\xi\,(\xi,\tau)\, d\tau\, n_2 \right] ds + \int\limits_{\gamma_4'} u_\xi \int\limits_{\eta}^{\gamma_1'} v_\xi\,(\xi,\tau)\, d\tau\, n_2\, ds$$

Итак, окончательно получаем

$$\langle \mathbf{A}u,\, \mathbf{B}v\rangle = \int\limits_{\Omega'} \left(u_\xi v_\xi + u_\eta v_\eta\right)\, d\xi d\eta + \int\limits_{\gamma_2'} u_\eta \int\limits_{\xi}^{\gamma_1'} v_\eta\left(\zeta,\eta\right) d\zeta\, n_1\, ds +$$

$$+ \int\limits_{\gamma_3'} \left[u_\eta \int\limits_{\xi}^{\gamma_4'} v_\eta\left(\zeta,\eta\right) d\zeta\, n_1 + u_\xi \int\limits_{\eta}^{\gamma_2'} v_\xi\left(\xi,\tau\right) d\tau\, n_2 \right] ds + \int\limits_{\gamma_4'} u_\xi \int\limits_{\eta}^{\gamma_1'} v_\xi\left(\xi,\tau\right) d\tau\, n_2\, ds +$$

$$+ \int\limits_{\gamma_1'} u\, v\, ds - \int\limits_{\gamma_2'} u_\eta\, n_1 \int\limits_{\xi}^{\gamma_1'} v_\eta\left(\zeta,\eta\right) d\zeta\, ds - \int\limits_{\gamma_3'} u_\eta\, n_1 \int\limits_{\xi}^{\gamma_4'} v_\eta\left(\zeta,\eta\right) d\zeta\, ds - \int\limits_{\gamma_3'} u_\xi\, n_2 \int\limits_{\eta}^{\gamma_2'} v_\xi\left(\xi,\tau\right) d\tau\, ds -$$

$$- \int\limits_{\gamma_4'} u_\xi\, n_2 \int\limits_{\eta}^{\gamma_1'} v_\xi\left(\xi,\tau\right) d\tau\, ds$$

В этом выражении все криволинейные интегралы, кроме интеграла по γ_1', сокращаются и формула для скалярного произведения приобретает следующий простой вид:

$$\langle \mathbf{A}u,\, \mathbf{B}v\rangle = \int\limits_{\Omega'} \left(u_\xi v_\xi + u_\eta v_\eta\right)\, d\xi d\eta + \int\limits_{\gamma_1'} u\, v\, ds,$$

из которого вытекает **B**-симметричность оператора **A**. Далее имеем

$$\langle \mathbf{A}u,\, \mathbf{B}u\rangle = \int\limits_{\Omega'} \left(u_\xi^2 + u_\eta^2\right)\, d\xi d\eta + \int\limits_{\gamma_1'} u^2\, ds,$$

откуда, очевидно, вытекает вытекает **B**-положительность оператора **A**.

Функционал для вариационной задачи принимает вид

$$D\left[u\right] = \langle \mathbf{A}\, u,\, \mathbf{B}\, u\rangle - 2\left\langle \mathbf{f},\, \mathbf{B}\, u\right\rangle = \int\limits_{\Omega'} \left(u_\xi^2 + u_\eta^2\right)\, d\xi d\eta + \int\limits_{\gamma_1'} u^2\, ds +$$

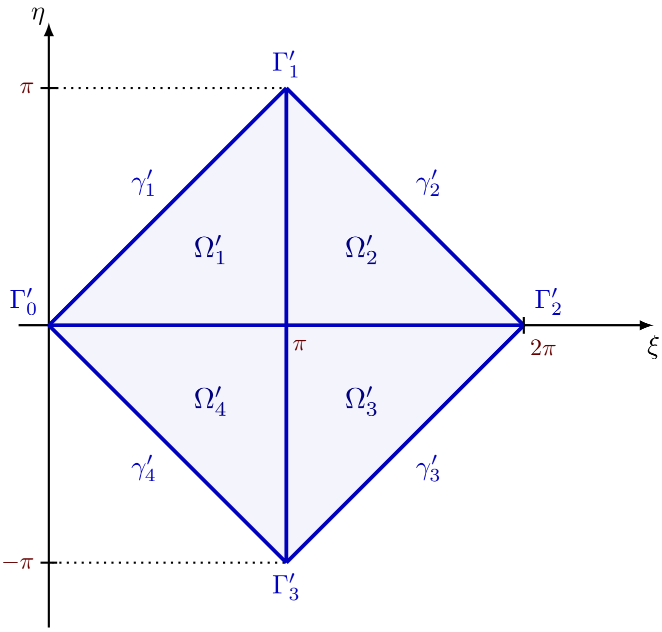
$$+ \int\limits_{\gamma_2'} n_1 \sin\xi \int\limits_{\xi}^{\gamma_1'} u_\eta\left(\zeta,\eta\right) d\zeta\, ds - \int\limits_{\gamma_3'} n_1 \sin\xi \int\limits_{\xi}^{\gamma_4'} u_\eta\left(\zeta,\eta\right) d\zeta\, ds +$$

$$+ \int\limits_{\gamma_3'} n_2 \sin\xi \int\limits_{\eta}^{\gamma_2'} u_\xi\left(\xi,\tau\right) d\tau\, ds + \int\limits_{\gamma_4'} n_2 \sin\xi \int\limits_{\eta}^{\gamma_1'} u_\xi\left(\xi,\tau\right) d\tau\, ds.$$

Такой вид функционала неудобен для использования в машинном обучении, поэтому преобразуем повторные интегралы в двойные.

Область Ω' можно рассматривать как объединение четырех подобластей $\Omega_1', \Omega_2', \Omega_3', \Omega_4'$:

$$\Omega' = \Omega_1' \cup \Omega_2' \cup \Omega_3' \cup \Omega_4'.$$



Перейдем в криволинейных интегралах к переменным ξ, η и интегрированию по подобластям $\Omega'_1, \Omega'_2, \Omega'_3, \Omega'_4$ с учетом того, что дифференциал длины дуги равен $ds = \sqrt{1 + (\eta_\xi)^2} d\xi = \sqrt{2} d\xi$ или $ds = \sqrt{1 + (\xi_\eta)^2} d\eta = \sqrt{2} d\eta$ и компоненты внешней нормали $\vec{n} = (n_1, n_2)$ на участках границы $\partial\Omega'$ вычисляются следующим образом:

$$\vec{n}(\gamma'_1) = \frac{1}{\sqrt{2}}(-1,\, 1)\,,\ \vec{n}(\gamma'_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,\, 1)\,,\ \vec{n}(\gamma'_3) = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,\, -1)\,,\ \vec{n}(\gamma'_4) = \frac{1}{\sqrt{2}}(-1,\, -1)\,.$$

При вычислении криволинейного интеграла вдоль γ'_2 используем параметризацию по переменной η, а именно, $\xi = 2\pi - \eta$, $0 \leqslant \eta \leqslant \pi$, $ds = \sqrt{2} d\eta$, тогда

$$\int\limits_{\gamma'_2} \sin\xi\, n_1(\gamma'_2) \int\limits_{\xi}^{\gamma'_1} u_\eta(\zeta, \eta)\, d\zeta\, ds = \int\limits_{0}^{\pi} \sqrt{2} \sin(2\pi - \eta)\ \frac{1}{\sqrt{2}} \int\limits_{2\pi-\eta}^{\gamma'_1} u_\eta(\zeta, \eta)\, d\zeta\, d\eta =$$

$$= -\int\limits_{0}^{\pi} \sin\eta \int\limits_{2\pi-\eta}^{\eta} u_\eta(\xi, \eta)\, d\xi\, d\eta = \int\limits_{0}^{\pi} \int\limits_{\eta}^{2\pi-\eta} \sin\eta\, u_\eta(\xi, \eta)\ d\xi\, d\eta = \int\limits_{\Omega'_1 \cup \Omega'_2} \sin\eta\, u_\eta(\xi, \eta)\ d\xi d\eta.$$

При вычислении первого криволинейного интеграла вдоль γ'_3 также используем параметризацию по переменной η, а именно, $\xi = \eta + 2\pi$, $-\pi \leqslant \eta \leqslant 0$, $ds = \sqrt{2} d\eta$, тогда

$$-\int\limits_{\gamma'_3} \sin\xi\, n_1(\gamma'_3) \int\limits_{\xi}^{\gamma'_4} u_\eta(\zeta, \eta)\, d\zeta\, ds = -\int\limits_{-\pi}^{0} \sqrt{2} \sin(\eta + 2\pi)\ \frac{1}{\sqrt{2}} \int\limits_{\eta+2\pi}^{\gamma'_4} u_\eta(\zeta, \eta)\, d\zeta\, d\eta =$$

$$= -\int\limits_{-\pi}^{0} \sin\eta \int\limits_{\eta+2\pi}^{-\eta} u_\eta(\xi, \eta)\, d\xi\, d\eta = \int\limits_{-\pi}^{0} \int\limits_{-\eta}^{\eta+2\pi} \sin\eta\, u_\eta(\xi, \eta)\ d\xi\, d\eta = \int\limits_{\Omega'_3 \cup \Omega'_4} \sin\eta\, u_\eta(\xi, \eta)\ d\xi d\eta.$$

При вычислении второго криволинейного интеграла вдоль γ'_3 используем параметризацию по переменной ξ, а именно, $\eta = \xi - 2\pi$, $\pi \leqslant \xi \leqslant 2\pi$, $ds = \sqrt{2} d\xi$, тогда

$$\int\limits_{\gamma'_3} \sin\xi\, n_2(\gamma'_3) \int\limits_{\eta}^{\gamma'_2} u_\xi(\xi, \tau)\, d\tau\, ds = \int\limits_{\pi}^{2\pi} \sqrt{2} \sin\xi\ \frac{-1}{\sqrt{2}} \int\limits_{\xi-2\pi}^{\gamma'_2} u_\xi(\xi, \tau)\, d\tau\, d\xi =$$

$$= -\int\limits_{\pi}^{2\pi} \sin\xi \int\limits_{\xi-2\pi}^{2\pi-\xi} u_\xi(\xi, \eta)\, d\eta\, d\xi = -\int\limits_{\pi}^{2\pi} \int\limits_{\xi-2\pi}^{2\pi-\xi} \sin\xi\, u_\xi(\xi, \eta)\ d\eta\, d\xi = \int\limits_{\Omega'_2 \cup \Omega'_3} \sin\xi\, u_\xi(\xi, \eta)\ d\xi d\eta.$$

При вычислении криволинейного интеграла вдоль γ_4' также используем параметризацию по переменной ξ, а именно, $\eta = -\xi$, $0 \leqslant \xi \leqslant \pi$, $ds = \sqrt{2}d\xi$, тогда

$$\int\limits_{\gamma_4'} \sin\xi \, n_2\left(\gamma_4'\right) \int\limits_{\eta}^{\gamma_1'} u_\xi\left(\xi,\tau\right) d\tau \, ds = \int\limits_0^\pi \sqrt{2}\sin\xi \frac{-1}{\sqrt{2}} \int\limits_{-\xi}^{\gamma_1'} u_\xi\left(\xi,\tau\right) d\tau \, d\xi =$$

$$= -\int\limits_0^\pi \sin\xi \int\limits_{-\xi}^{\xi} u_\xi\left(\xi,\eta\right) d\eta \, d\xi = -\int\limits_0^\pi \int\limits_{-\xi}^{\xi} \sin\xi \, u_\xi\left(\xi,\eta\right) \, d\eta \, d\xi = -\int\limits_{\Omega_1'\cup\Omega_4'} \sin\xi \, u_\xi\left(\xi,\eta\right) \, d\xi d\eta.$$

Итак, получаем в переменных ξ, η функционал для вариационной задачи

$$D\left[u\right] = \int\limits_{\Omega'} \left(u_\xi^2 + u_\eta^2\right) \, d\xi d\eta + \int\limits_{\gamma_1'} u^2 ds + \int\limits_{\Omega_1'\cup\Omega_2'} \sin\eta \, u_\eta\left(\xi,\eta\right) \, d\xi d\eta +$$

$$+ \int\limits_{\Omega_3'\cup\Omega_4'} \sin\eta \, u_\eta\left(\xi,\eta\right) \, d\xi d\eta - \int\limits_{\Omega_2'\cup\Omega_3'} \sin\xi \, u_\xi\left(\xi,\eta\right) \, d\xi d\eta - \int\limits_{\Omega_1'\cup\Omega_4'} \sin\xi \, u_\xi\left(\xi,\eta\right) \, d\xi d\eta =$$

$$= \int\limits_{\Omega'} \left(u_\xi^2 + u_\eta^2\right) \, d\xi d\eta + \int\limits_{\gamma_1'} u^2 ds + \int\limits_{\Omega'} \sin\eta \, u_\eta\left(\xi,\eta\right) \, d\xi d\eta - \int\limits_{\Omega'} \sin\xi \, u_\xi\left(\xi,\eta\right) \, d\xi d\eta =$$

$$= \int\limits_{\Omega'} \left(u_\xi^2 + u_\eta^2 + \sin\eta \, u_\eta - \sin\xi \, u_\xi\right) \, d\xi d\eta + \int\limits_{\gamma_1'} u^2 ds$$

Вернемся в первоначальные переменные (x,t). Согласно формуле замены переменных в двойном интеграле

$$\int\limits_{\Omega'} f\left(\xi,\eta\right) \, d\xi d\eta = \int\limits_{\Omega} f\left(\xi\left(x,t\right), \eta\left(x,t\right)\right) \left|\frac{\partial\left(\xi,\eta\right)}{\partial\left(x,t\right)}\right| \, dxdt =$$

$$= \int\limits_{\Omega} f\left(x+t, x-t\right) \left|\det\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\right| \, dxdt = 2\int\limits_{\Omega} f\left(x+t, x-t\right) \, dxdt,$$

$$u_\xi = \frac{\partial}{\partial\xi} u\left(x\left(\xi,\eta\right), t\left(\xi,\eta\right)\right) = u_x\frac{\partial x}{\partial\xi} + u_t\frac{\partial t}{\partial\xi} = \frac{1}{2}\left(u_x + u_t\right),$$

$$u_\eta = \frac{\partial}{\partial\eta} u\left(x\left(\xi,\eta\right), t\left(\xi,\eta\right)\right) = u_x\frac{\partial x}{\partial\eta} + u_t\frac{\partial t}{\partial\eta} = \frac{1}{2}\left(u_x - u_t\right).$$

Поэтому получаем в исходных переменных (x,t) следующий функционал

$$D\left[u\right] = \int\limits_{\Omega} 2\left(\frac{1}{4}\left(u_x+u_t\right)^2 + \frac{1}{4}\left(u_x-u_t\right)^2 + \frac{1}{2}\sin\left(x-t\right)\left(u_x-u_t\right) - \frac{1}{2}\sin\left(x+t\right)\left(u_x+u_t\right)\right) \, dxdt +$$

$$+ \int\limits_{\gamma_1} u^2 ds = \int\limits_{\Omega} \left(u_x^2 + u_t^2 + u_x\left(\sin\left(x-t\right) - \sin\left(x+t\right)\right) - u_t\left(\sin\left(x-t\right) + \sin\left(x+t\right)\right)\right) \, dxdt + \int\limits_{\gamma_1} u^2 ds =$$

$$= \int\limits_{\Omega} \left(u_x^2 + u_t^2 - 2u_x\cos x\sin t - 2u_t\sin x\cos t\right) \, dxdt + \int\limits_{\gamma_1} u^2 ds$$

Нейросетевая аппроксимация решения краевой задачи для уравнения колебаний струны

Рассмотрим краевую задачу (1)–(2) для уравнения колебаний струны, допускающую неклассический (неэйлеров) вариационный принцип с функционалом

$$D\left[u\right] = \int\limits_{\Omega} \left(u_x^2 + u_t^2 - 2u_x\cos x\sin t - 2u_t\sin x\cos t\right) \, dxdt + \int\limits_{\gamma_1} u^2 ds$$

$$
\begin{cases}
u\left.\right|_{\gamma_1} & = 0,\ 0 \leqslant x \leqslant \pi,\ t = 0, \\
u_x\left.\right|_{\gamma_2} & = -\sin t,\ x = \pi,\ 0 \leqslant t \leqslant \pi, \\
u_t\left.\right|_{\gamma_2} & = 0,\ x = \pi,\ 0 \leqslant t \leqslant \pi, \\
u_x\left.\right|_{\gamma_3} & = 0,\ 0 \leqslant x \leqslant \pi,\ t = \pi, \\
u_t\left.\right|_{\gamma_3} & = -\sin x,\ 0 \leqslant x \leqslant \pi,\ t = \pi, \\
u_x\left.\right|_{\gamma_4} & = \sin t,\ x = 0,\ 0 \leqslant t \leqslant \pi \\
u_t\left.\right|_{\gamma_4} & = 0,\ x = 0,\ 0 \leqslant t \leqslant \pi.
\end{cases} \tag{6}
$$

Решение $u\left(x,t\right)$ этой краевой задачи может быть аппроксимировано глубокой искусственной нейронной сетью с выходом $f\left(x,\,t;\,\boldsymbol{\theta}\right)$, где $x,\,t$ – входные значения, а $\boldsymbol{\theta}$ – вектор параметров (весов и смещений) нейронной сети:

$$u\left(x,t\right) \approx f\left(x,\,t;\,\boldsymbol{\theta}\right).$$

При обучении нейронной сети в качестве функционала потерь (ошибки) может быть использован функционал невязки (residuals functional)

$$\mathcal{L}_R\left(f\right) = \left\|f_{tt} - f_{xx}\right\|_{\Omega}^2 + \left\|f\right\|_{\gamma_1}^2 + \left\|f_x + \sin t\right\|_{\gamma_2}^2 + \left\|f_t\right\|_{\gamma_2}^2 +$$

$$+ \left\|f_x\right\|_{\gamma_3}^2 + \left\|f_t + \sin x\right\|_{\gamma_3}^2 + \left\|f_x - \sin t\right\|_{\gamma_4}^2 + \left\|f_t\right\|_{\gamma_4}^2,$$

где$\left\|f\right\|_X^2 = \int_X \left|f\left(x\right)\right|^2 \rho\left(x\right) dx$, $\rho\left(x\right)$ – плотность некоторого распределения вероятности на X (например, равномерного распределения).

При использовании такого функционала в качестве функционала потерь (ошибки) при обучении нейронной сети, аппроксимирующей решение рассматриваемой краевой задачи, интегралы, входящие в функционал, как правило, подсчитываются методом интегрирования Монте-Карло, а производные f_x, f_t и т.д. неизвестной функции $f\left(x,t\right)$ вычисляются при помощи алгоритма автоматического дифференцирования.

Метод интегрирования Монте-Карло позволяет приближенно вычислять интегралы

$$I = \int\limits_{\Omega} f\left(\mathbf{x}\right)\,\rho\left(\mathbf{x}\right) d\mathbf{x},$$

где $\rho\left(\mathbf{x}\right)$ – некоторое вероятностное распределение в области Ω, в виде конечных сумм

$$\hat{I} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f\left(\mathbf{x}_i\right),$$

где $\left\{\mathbf{x}_i\right\}_{i=1}^n$ – случайная выборка с распределением $\rho\left(\mathbf{x}\right)$. Такая аппроксимация является корректной и дает полезные результаты, так как

- по сильному закону больших чисел $\hat{I} \underset{n\to\infty}{\longrightarrow} I$ с вероятностью единица
- ошибку аппроксимации можно измерить и контролировать:

$$Var\left(\hat{I}\right) = \frac{1}{n\left(n-1\right)}\sum_{i=1}^{n}\left(f\left(\mathbf{x}_i\right) - \hat{I}\right)^2$$

При использовании функционала невязки $\mathcal{L}_R\left(f\right)$ нужно вычислять восемь интегралов, для чего необходимо строить случайные выборки из различных областей (многообразий), и вычислять частные производные до второго порядка включительно.

Общая схема алгоритма обучения нейронной сети с функционалом невязки

1. Выбрать начальное множество параметров нейронной сети $\boldsymbol{\theta}_0$ и начальную скорость обучения α_0
2. Сгенерировать случайные выборки для области Ω и временной/пространственной границы $\partial\Omega$, а именно
   - сгенерировать случайную выборку $\left\{\left(x_{i_0},\,t_{i_0}\right)\right\}_{i_0=1}^{n_0}$ из n_0 точек из области Ω с распределением ν_0
   - сгенерировать случайную выборку $\left\{\left(x_{i_1},\,t_{i_1}\right)\right\}_{i_1=1}^{n_1}$ из n_1 точек из фрагмента границы $\gamma_1 \subset \partial\Omega$ с распределением ν_1

- сгенерировать случайную выборку $\{(x_{i_2},\, t_{i_2})\}_{i_2=1}^{n_2}$ из n_2 точек из фрагмента границы $\gamma_2 \subset \partial\Omega$ с распределением ν_2
- сгенерировать случайную выборку $\{(x_{i_3},\, t_{i_3})\}_{i_3=1}^{n_3}$ из n_3 точек из фрагмента границы $\gamma_3 \subset \partial\Omega$ с распределением ν_3
- сгенерировать случайную выборку $\{(x_{i_4},\, t_{i_4})\}_{i_4=1}^{n_4}$ из n_4 точек из фрагмента границы $\gamma_4 \subset \partial\Omega$ с распределением ν_4

3. Вычислить функционал невязки $\mathcal{L}_R\,(f)$ для сгенерированных случайных выборок, объединенных в мини-батч s_k:

$$\mathbf{s}_k = \left\{\{(x_{i_0},\, t_{i_0})\}_{i_0=1}^{n_0}, \{(x_{i_1},\, t_{i_1})\}_{i_1=1}^{n_1}, \{(x_{i_2},\, t_{i_2})\}_{i_2=1}^{n_2}, \{(x_{i_3},\, t_{i_3})\}_{i_3=1}^{n_3}, \{(x_{i_4},\, t_{i_4})\}_{i_4=1}^{n_4}\right\},$$

$$L_0\,(f, \mathbf{s}_k; \boldsymbol{\theta}_k) = \frac{1}{n_0}\sum_{i_0=1}^{n_0}\left(f_{tt}\,(x_{i_0},\, t_{i_0}; \boldsymbol{\theta}_n) - f_{xx}\,(x_{i_0},\, t_{i_0}; \boldsymbol{\theta}_n)\right)^2,$$

$$L_1\,(f, \mathbf{s}_k; \boldsymbol{\theta}_k) = \frac{1}{n_1}\sum_{i_1=1}^{n_1}\left(f\,(x_{i_1},\, t_{i_1}; \boldsymbol{\theta}_n)\right)^2,$$

$$L_2\,(f, \mathbf{s}_k; \boldsymbol{\theta}_k) = \frac{1}{n_2}\sum_{i_2=1}^{n_2}\Big(\left(f_x\,(x_{i_2},\, t_{i_2}; \boldsymbol{\theta}_n) + \sin t_{i_2}\right)^2 + \left(f_t\,(x_{i_2},\, t_{i_2}; \boldsymbol{\theta}_n)\right)^2\Big),$$

$$L_3\,(f, \mathbf{s}_k; \boldsymbol{\theta}_k) = \frac{1}{n_3}\sum_{i_3=1}^{n_3}\Big(\left(f_x\,(x_{i_3},\, t_{i_3}; \boldsymbol{\theta}_n)\right)^2 + \left(f_t\,(x_{i_3},\, t_{i_3}; \boldsymbol{\theta}_n) + \sin x_{i_3}\right)^2\Big),$$

$$L_4\,(f, \mathbf{s}_k; \boldsymbol{\theta}_k) = \frac{1}{n_4}\sum_{i_4=1}^{n_4}\Big(\left(f_x\,(x_{i_4},\, t_{i_4}; \boldsymbol{\theta}_n) - \sin t_{i_4}\right)^2 + \left(f_t\,(x_{i_4},\, t_{i_4}; \boldsymbol{\theta}_n)\right)^2\Big),$$

$$\mathcal{L}_R\,(f, \mathbf{s}_k; \boldsymbol{\theta}_k) = \sum_{j=0}^{4} L_j\,(f, \mathbf{s}_k; \boldsymbol{\theta}_k)$$

4. Выполнить один или несколько шагов градиентного спуска с мини-батчем (случайными точками) $\mathbf{s}_k$ при помощи адаптивного алгоритма Adam (или иного алгоритма обучения нейронной сети) со скоростью обучения α_k (скорость обучения α_k обновляется автоматически на каждом шаге):

$$\boldsymbol{\theta}_{k+1} = \boldsymbol{\theta}_k - \alpha_k \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \mathcal{L}_R\,(f,\, \mathbf{s}_k;\, \boldsymbol{\theta}_k)$$

5. Повторять шаги 2-4 до тех пор, пока изменение параметров нейронной сети $\|\boldsymbol{\theta}_{k+1} - \boldsymbol{\theta}_k\|$ не станет достаточно малой величиной

Как альтернатива в качестве функционала потерь (ошибки) может быть использован построенный неэйлеров функционал

$$\mathcal{L}_N\,(f) = \int\limits_{\Omega}\left(f_x^2 + f_t^2 - 2 f_x \cos x \sin t - 2 f_t \sin x \cos t\right)\, dx dt + \int\limits_{\gamma_1} f^2 ds.$$

При использовании неэйлерова функционала $\mathcal{L}_N\,(f)$ нужно вычислять два интеграла и, соответственно, строить одну случайную выборку из Ω и еще одну случайную выборку из γ_1, и вычислять частные производные первого порядка.

Общая схема алгоритма обучения нейронной сети с неэйлеровым функционалом

1. Выбрать начальное множество параметров нейронной сети $\boldsymbol{\theta}_0$ и начальную скорость обучения α_0

2. Сгенерировать две случайные выборки для области Ω и временной/пространственной границы $\partial\Omega$, а именно

   - сгенерировать случайную выборку $\{(x_{i_0},\, t_{i_0})\}_{i_0=1}^{n_0}$ из n_0 точек из области Ω с распределением ν_0
   - сгенерировать случайную выборку $\{(x_{i_1},\, t_{i_1})\}_{i_1=1}^{n_1}$ из n_1 точек из фрагмента границы $\gamma_1 \subset \partial\Omega$ с распределением ν_1

3. Вычислить неэйлеров функционал $\mathcal{L}_N(f)$ для сгенерированных случайных выборок, объединенных в мини-батч s_k:
$$\mathbf{s}_k = \left\{ \{(x_{i_0},\, t_{i_0})\}_{i_0=1}^{n_0},\, \{(x_{i_1},\, t_{i_1})\}_{i_1=1}^{n_1} \right\},$$
$$L_0\left(f, \mathbf{s}_k; \boldsymbol{\theta}_k\right) = \frac{1}{n_0} \sum_{i_0=1}^{n_0} \left(f_x^2\left(x_{i_0},\, t_{i_0}; \boldsymbol{\theta}_k\right) + f_t^2\left(x_{i_0},\, t_{i_0}; \boldsymbol{\theta}_k\right) - \right.,$$
$$\left. -2 f_x\left(x_{i_0},\, t_{i_0}; \boldsymbol{\theta}_k\right) \cos x_{i_0} \sin t_{i_0} - 2 f_t\left(x_{i_0},\, t_{i_0}; \boldsymbol{\theta}_k\right) \sin x_{i_0} \cos t_{i_0} \right)^2,$$
$$L_1\left(f, \mathbf{s}_k; \boldsymbol{\theta}_k\right) = \frac{1}{n_1} \sum_{i_1=1}^{n_1} \left(f\left(x_{i_1},\, t_{i_1}; \boldsymbol{\theta}_k\right) \right)^2,$$
$$\mathcal{L}_N\left(f, \mathbf{s}_k; \boldsymbol{\theta}_k\right) = L_0\left(f, \mathbf{s}_k; \boldsymbol{\theta}_k\right) + L_1\left(f, \mathbf{s}_k; \boldsymbol{\theta}_k\right)$$

4. Выполнить один или несколько шагов градиентного спуска с мини-батчем (случайными точками) $\mathbf{s}_k$ при помощи адаптивного алгоритма Adam (или иного алгоритма обучения нейронной сети) со скоростью обучения α_k (скорость обучения α_k обновляется автоматически на каждом шаге):
$$\boldsymbol{\theta}_{k+1} = \boldsymbol{\theta}_k - \alpha_k \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \mathcal{L}_N\left(f,\, \mathbf{s}_k;\, \boldsymbol{\theta}_k\right)$$

5. Повторять шаги 2-4 до тех пор, пока изменение параметров нейронной сети $\|\boldsymbol{\theta}_{k+1} - \boldsymbol{\theta}_k\|$ не станет достаточно малой величиной

План действий по работе над ВКР

1. Работать над текстом ВКР, в котором нужно расписать основные математические понятия и методы, которые применяются в работе.

2. Выбираем простую архитектуру нейронной сети прямого распространения для аппроксимации решения ДУЧП. Входные значения – пары $x,\, t$, выходное значение – решение ДУЧП u.

3. Реализуем функцию потерь на основе неэйлерова функционала $\mathcal{L}_N\left(f, \mathbf{s}_k; \boldsymbol{\theta}_k\right)$ (также можно использовать функцию потерь на основе функционала невязки $\mathcal{L}_R\left(f, \mathbf{s}_k; \boldsymbol{\theta}_k\right)$).

4. Обучаем нейронную сеть при помощи функционала $\mathcal{L}_N\left(f, \mathbf{s}_k; \boldsymbol{\theta}_k\right)$ на некотором количестве эпох, фиксируя время обучения и достигнутое качество модели, и сравниваем полученное приближенное решение $f(x,\, t)$ с известным точным решением
$$u(x, t) = \sin t\, \sin x$$
(показатели MSE, MAE и т.п.).

5. Убеждаемся, что нейросетевые аппроксимации $f(x,\, t;\, \boldsymbol{\theta}_k)$ сходятся (в том или ином смысле) к точному решению $u(x, t)$.

6. Если сходимость $f(x,\, t;\, \boldsymbol{\theta}_k)$ к точному решению $u(x, t)$ подтверждается, то:

   (a) решаем задачу определения оптимальных гиперпараметров нейронной сети (количество слоев, количество нейронов в слое, функция активации, оптимизатор, начальная скорость обучения и т.п.)

   (b) также можно изменить архитектуру нейронной сети (вместо сети прямого распространения рассмотреть сеть со слоями LSTM или сверточными слоями)

   (c) выполняем различные визуализации для построенных решений