

ВИКОРИСТАННЯ ФІЗИЧНО-ІНФОРМОВАНИХ НЕЙРОННИХ МЕРЕЖ В ЗАДАЧАХ МАТЕМАТИЧНОЇ ФІЗИКИ

Книш О.С.

e-mail: oleksandr.knysh@nure.ua

Науковий керівник – канд. техн. наук, доц. Єсілевський В.С.

Харківський національний університет радіоелектроніки,

кафедра прикладної математики

м. Харків, Україна

This work will consider a physically informed neural network for solving partial differential equations. The model will be trained in the form of minimizing the linear convolution of the residual function in terms of the equation and the conditions of the problem. Such an approach to building physical models allows you to obtain solutions to such problems with high resolution with a large grid size on which training will take place. It also allows you to solve problems with a supersaturated condition, which conventional numerical methods cannot. The solution results are a relevant study of a new approach to the application of machine learning in physics.

Фізично-інформовані нейронні мережі (Physics-Informed Neural Networks, PINN) стали революційним інструментом у математичній фізиці, поєднуючи глибоке навчання з фундаментальними законами, описаними диференціальними рівняннями. Цей підхід дозволяє розв'язувати складні задачі, такі як нелінійні рівняння у частинних похідних (PDE), де традиційні чисельні методи стикаються з обмеженнями через високу обчислювальну складність. PINN інтегрують фізичні принципи безпосередньо у функцію витрат нейромережі, що забезпечує відповідність розв'язків основним законам збереження та граничним умовам [1, 2].

Основна ідея підходу полягає у визначенні функції витрат моделі, як нев'язки розв'язку рівняння у вузлах сітки, де похідні обчислюються за допомогою автоматичного диференціювання в математичному пакеті. Також у функцію витрат включають умови задачі, що дозволяє отримувати саме шукані розв'язки навіть для перенасичених задач.

Основні принципи PINN. PINN апроксимують розв'язок PDE через нелінійне відображення між просторово-часовими вхідними даними та розподілом поля. Нейронна мережа навчається мінімізувати сумарну похибку, яка включає:

- похибку граничних умов, що забезпечує періодичність або інші обмеження на межі області;
- похибку залишку PDE, яка відображає ступінь відхилення прогнозу від диференціального рівняння;
- похибку початкових умов, що гарантує відповідність розв'язку на початковому часовому шарі.

Автоматичне диференціювання, вбудоване в сучасні фреймворки (наприклад, TensorFlow, PyTorch), дозволяє точно обчислювати похідні високого порядку, необхідні для формування залишкового члена.

Обмеження класичних PINN. Незважаючи на універсальність, класичні PINN мають суттєві недоліки при роботі з:

- сильно нелінійними рівняннями (наприклад, Аллена-Кана), де нелінійні члени призводять до нестійкості навчання;
- рівняннями високих порядків (наприклад, Кана-Хілліарда), де обчислення похідних 4-го порядку вимагає значних ресурсів;
- довгочасними симуляціями, де похибка накопичується з часом через єдиний підхід до всієї часової області.

Розширення PINN для складних систем. Для подолання цих обмежень розроблено модифікації PINN. bc-PINN (backward compatible PINN) пропонує послідовне навчання на часових сегментах зі збереженням зворотної сумісності. Ключові особливості:

- розбиття часової області на сегменти, де кожен наступний сегмент використовує розв'язок попереднього як початкову умову;
- функція втрат із додатковим членом (MSE_S), який гарантує збіжність із результатами попередніх етапів;
- фазові простори для рівнянь високого порядку, що зменшують складність обчислень шляхом розкладу на систему рівнянь нижчого порядку [3].

Також, для подолання сильної нелінійності використовують підхід Extended PINN. Суть підходу полягає в тому, що область розбивається на частини за якісною ознакою, та додається додаткова похибка узгодженості областей, що дозволяє моделювати переходи між частинами області з різною поведінкою системи, як наприклад поширення хвиль, чи моделювання привибійних зон свердловин. Даний підхід активно набирає розвиток у напрямку фізично-інформованого машинного навчання.

Список використаних джерел:

1. Raissi M., Perdikaris P., Karniadakis G. E. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*. 2019. Vol. 378. P. 686–707. DOI: 10.1016/j.jcp.2018.10.045.
2. Yesilevskiy V., Tevyashev A., Koliadin A. A method of air object recognition based on the normalized contour descriptors and a complex-valued neural network. *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*. 2020. Vol. 6, no. 4 (108). P. 48–57. DOI: 10.15587/1729-4061.2020.220035.
3. Matthey R., Ghosh S. A novel sequential method to train physics informed neural networks for Allen Cahn and Cahn Hilliard equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2022. Vol. 390. Art. 114474. DOI: 10.1016/j.cma.2021.114474.