

УДК 517.9

Решение дифференциальных уравнений с помощью физически информированного машинного обучения

Абрашкин А.М.

Ульяновский государственный университет

Аннотация: В статье рассматривается физически информированное машинное обучение (ФИМО) как новый подход к решению дифференциальных уравнений в частных производных на стыке классических численных методов и машинного обучения. Включение информации о физических законах в функцию потерь нейронных сетей позволяет успешно решать задачи даже при ограниченном объёме и зашумленности данных. Применение универсальных аппроксиматоров функций на облаках случайно выбранных точек позволяет обойти сложности расчётных сеток и гибко интегрировать экспериментальные данные. Описаны ограничения ФИМО, связанные с адвекцией, жёсткими граничными условиями и оптимизационными локальными минимумами, а также перспективы дальнейшего развития ФИМО в инженерии, физике и квантовых вычислениях.

Ключевые слова: машинное обучение, дифференциальные уравнения, частные производные.

1. Введение

Несмотря на значительный прогресс в моделировании мультифизических задач с помощью численной дискретизации дифференциальных уравнений в частных производных (ДУЧП), по-прежнему тяжело интегрировать зашумленные данные в существующие алгоритмы. Построение расчётных сеток требует значительных усилий, а решение задач высокой размерности с параметризованными ДУЧП часто оказывается недостижимым. Дополнительно, решение обратных задач, в которых физические процессы не полностью известны, сопряжено с высокими вычислительными затратами и необходимостью в альтернативных математических формулировках и сложных программных реализациях.

Методы машинного обучения предлагают перспективные подходы, однако обучение глубоких нейронных сетей требует больших объёмов данных, которые в научных задачах часто недоступны. Вместо этого такие модели можно обучать на основе дополнительной информации, полученной в результате применения физических законов (например, в случайных точках в непрерывной пространственно-временной области). Такое обучение с учётом физических законов объединяет зашумленные данные и математические модели и реализует их с помощью нейронных сетей.

Физически информированные нейронные сети (ФИНН), представляют собой тип универсальных аппроксиматоров функций (УАФ), которые могут использовать знания о любых физических законах, управляющих заданным набором данных, в процессе обучения и могут быть описаны уравнениями в частных производных. Недостаток данных для решения некоторых биологических и инженерных задач ограничивает эффективность традиционных моделей машинного обучения, используемых в этих областях [1]. Предварительные знания об общих физических законах при обучении нейронных сетей действуют как регуляризатор, ограничивающий пространство допу-

стимых решений и повышающий обобщающую способность аппроксимации функции. Таким образом, встраивание этой предварительной информации в нейронную сеть приводит к повышению информативности имеющихся данных, что помогает алгоритму обучения находить правильное решение и хорошо обобщать данные даже при небольшом количестве обучающих примеров.

2. Объединение математических моделей и данных

Применение дифференциальных уравнений с использованием традиционных численных методов представляется обоснованным и эффективным в случаях, когда объём данных ограничен, но имеется глубокое понимание физической природы исследуемого явления. Напротив, при наличии большого объёма данных и отсутствии явного математического описания системы, более подходящими оказываются методы машинного обучения, способные выявлять закономерности непосредственно из эмпирических наблюдений. На практике большинство проблем находятся где-то посередине: есть некоторые данные и частичное понимание базовой физики (Рис. 1).

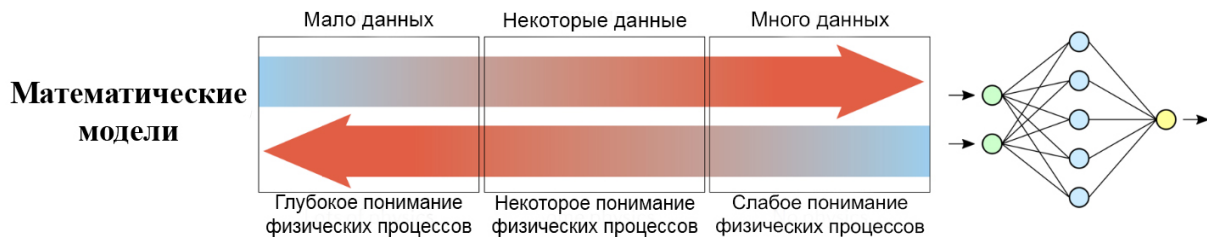


Рис. 1. Шкала перехода от физических моделей к моделям, основанным на данных.

Поэтому необходимо стремиться к разработке методов, подходящих для этой промежуточной ситуации. Проблема заключается в том, что данные наблюдений не могут быть включены в решатели численных методов или рабочие процессы простым способом. Это заставляет нас выбирать между подходами, основанными на первых принципах, и подходами, основанными на данных. Новая парадигма, известная как физически информированное машинное обучение (ФИМО), направлена на беспрепятственную интеграцию данных и математических моделей [2]. Этот новый подход может проложить путь к новым решателям, которые ставят уравнения и данные на одну ступень.

Основная задача машинного обучения — обучить интеллектуального агента делать точные предсказания. Первым шагом является введение функции потерь, измеряющей, насколько далеки прогнозы интеллектуального агента. Процесс обучения заключается в постепенной настройке параметров агента для улучшения его предсказаний. В стандартном машинном обучении функция потерь и обучение основаны на данных.

В ФИМО функция потерь и обучение помимо данных также учитывают физические законы, управляющие системой: сами дифференциальные уравнения, граничные и начальные условия. Функции потерь ФИМО оценивают предсказания агента не только по тому, насколько они близки к данным, но и по тому, согласуются ли они с управляющими уравнениями (рис. 2). Это открывает новые привлекательные стратегии, в которых данные и динамика могут быть использованы взаимодополняющим образом.

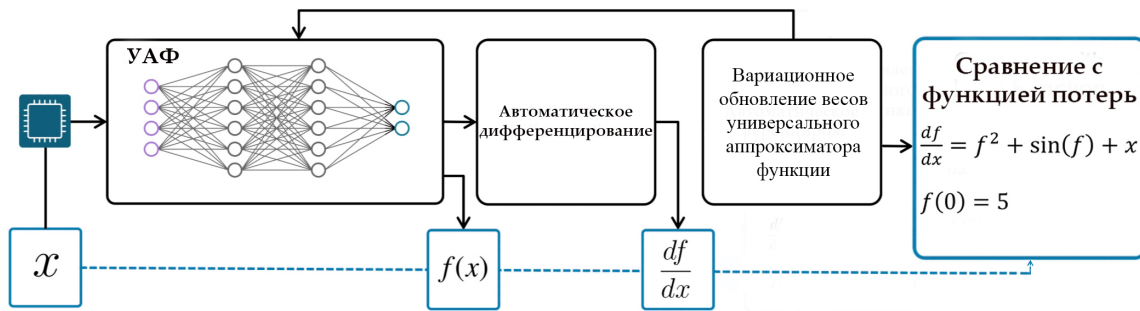


Рис. 2. Рабочий процесс ФИМО.

3. Универсальные аппроксиматоры функций

Основным компонентом метода ФИМО является универсальный аппроксиматор функции. Это параметризованная функция, которая может быть использована для аппроксимации или «подгонки» решения дифференциального уравнения: скорости жидкости, распределения температуры и т. д. По своей конструкции УАФ имеет обучаемые параметры, которые настраиваются в процессе обучения. УАФ должен удовлетворять двум требованиям. Во-первых, он должен обладать достаточной «выразительностью» или способностью аппроксимировать решение дифференциального уравнения. Во-вторых, необходимо иметь возможность эффективно вычислять скорости изменения УАФ в пространстве и времени, а также обучаемые параметры [3].

Существует множество вариантов УАФ, начиная от полиномов с настраиваемыми коэффициентами и заканчивая рядами Фурье. Сегодня наиболее популярными и известными УАФ являются глубокие искусственные нейронные сети, скорость изменения которых эффективно вычисляется с помощью автоматического дифференцирования.

Разработка ФИМО находится на начальном этапе, но оно уже открывает несколько интересных возможностей:

- Мультифизические задачи. Учитывая, что УАФ эффективно дифференцируются, ФИМО может легко включать в себя несколько дифференциальных уравнений, сложные граничные условия и условия сопряжения, что делает его пригодным для решения широкого спектра мультифизических задач.

- Не требуется сетка. УАФ не нужно оценивать на сложной сетке, как в методе конечных элементов (МКЭ); вместо этого достаточно облака точек, случайно взятых из выбранной области, а повторная выборка в течение процедуры оптимизации эффективно снижает риск переобучения УАФ.

- Экспериментальная обратная связь. В отличие от МКЭ, в ФИМО легко добавлять экспериментальные наблюдения за изучаемой физической системой. Эти наблюдения рассматриваются как известные точки данных и добавляются к функции потерь, тем самым напрямую повышая эффективность обучения.

- Цифровые двойники. После оптимизации УАФ на конкретной физической системе можно определить свойства аналогичной системы с другими геометрическими параметрами или граничными условиями без повторного выполнения всего моделирования. Это делает подход ФИМО подходящим для таких приложений, как проектирование изделий или цифровых двойников, где необходимо быстро оценить большое количество различных конфигураций одной и той же системы.

Наиболее привлекательной особенностью методов, основанных на ФИМО, является их потенциал для использования вычислительных преимуществ квантовых компьютеров. Недавно французский производитель квантовых процессоров PASQAL

продемонстрировал, как методы ФИМО могут быть легко перенесены в квантовую область, используя квантовую нейронную сеть в качестве УАФ [4].

4. Ограничения

С помощью ФИИН трудно аппроксимировать перемещение и разрывное поведение. Они не работают при решении дифференциальных уравнений с небольшим преобладанием адвекции, и, следовательно, асимптотическое поведение приводит к сбою метода. Такие ДУЧП можно решить с помощью масштабирования переменных [5]. Эту сложность в обучении ФИИН для ДУЧП с преобладанием адвекции можно объяснить колмогоровской n -шириной решения [6]. Они также не справляются с решением системы динамических систем и, следовательно, не подходят для решения хаотических уравнений [7]. Одна из причин, по которой обычные ФИИН не справляются с задачей, заключается в мягком ограничении граничных условий Дирихле и Неймана, что представляет собой многоцелевую задачу оптимизации, для решения которой необходимо вручную взвешивать слагаемые потерь [5]. В более общем смысле представление решения дифференциального уравнения в виде задачи оптимизации влечёт за собой все проблемы, с которыми сталкиваются в мире оптимизации, главная из которых – застревание в локальных оптимумах [5], [8].

Несмотря на существующие трудности, дальнейшее развитие ФИМО предвещает новые универсальные, гибкие и интерпретируемые инструменты для инженерии и науки.

Литература

1. Raissi M., Perdikaris P., Karniadakis G. E. Physics Informed Deep Learning (Part I): Data driven Solutions of Nonlinear Partial Differential Equations [Электронный ресурс]. URL: <https://arxiv.org/abs/1711.10561> (дата обращения: 11.07.2025).
2. 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 [Электронный ресурс]. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0021999118307125> (дата обращения: 11.07.2025).
3. Voigtlaender F. The universal approximation theorem for complex valued neural networks [Электронный ресурс]. URL: <https://arxiv.org/abs/2012.03351> (дата обращения: 11.07.2025).
4. Philip E., Dagrada M., Elfving V. The power of differentiable quantum circuits [Электронный ресурс]. URL: <https://www.pasqal.com/blog/the-power-of-differentiable-quantum-circuits/> (дата обращения: 11.07.2025).
5. Rout S. Numerical Approximation in CFD Problems Using Physics Informed Machine Learning [Электронный ресурс]. URL: <https://arxiv.org/abs/2111.02987> (дата обращения: 11.07.2025).
6. Mojgani R., Balajewicz M., Hassanzadeh P. Lagrangian PINNs: A causality conforming solution to failure modes of physics informed neural networks [Электронный ресурс]. URL: <https://arxiv.org/abs/2205.02902> (дата обращения: 11.07.2025).
7. Antonelo E. A., Camponogara E., Seman L. O., Jordanou J. P., Rehbein de Souza E., Hübner J. F. Physics informed neural nets

- for control of dynamical systems [Электронный ресурс]. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0925231224001905> (дата обращения: 11.07.2025).
8. Wang S., Teng Y., Perdikaris P. Understanding and mitigating gradient pathologies in physics informed neural networks [Электронный ресурс]. URL: <https://arxiv.org/abs/2001.04536> (дата обращения: 11.07.2025).

MSC 68T99, 35A99

Solving differential equations with physics-informed machine learning

A.M. Abrashkin

Ulyanovsk State University

Abstract: The article discusses physics-informed machine learning (PIML) – a new approach to solving partial differential equations at the intersection of classical numerical methods and machine learning. Including information about physical laws in the loss function of neural networks allows us to successfully solve problems even with a limited volume and noisy data. The use of universal function approximators on clouds of randomly selected points allows us to bypass the complexities of computational grids and flexibly integrate experimental data. The limitations of PIML associated with advection, rigid boundary conditions, and optimization local minima are described, as well as prospects for further development of PIML in engineering, physics, and quantum computing.

Keywords: machine learning, differential equations, partial derivatives.

References

1. Raissi M., Perdikaris P., Karniadakis G. E. Physics Informed Deep Learning (Part I): Data driven Solutions of Nonlinear Partial Differential Equations [Online]. Available: <https://arxiv.org/abs/1711.10561> (accessed: 11.07.2025).
2. 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 [Online]. Available: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0021999118307125> (accessed: 11.07.2025).
3. Voigtlaender F. The universal approximation theorem for complex valued neural networks [Online]. Available: <https://arxiv.org/abs/2012.03351> (accessed: 11.07.2025).
4. Philip E., Dagrada M., Elfving V. The power of differentiable quantum circuits [Online]. Available: <https://www.pasqal.com/blog/the-power-of-differentiable-quantum-circuits/> (accessed: 11.07.2025).
5. Rout S. Numerical Approximation in CFD Problems Using Physics Informed Machine Learning [Online]. Available: <https://arxiv.org/abs/2111.02987> (accessed: 11.07.2025).
6. Mojgani R., Balajewicz M., Hassanzadeh P. Lagrangian PINNs: A causality conforming solution to failure modes of physics informed neural networks [Online]. Available: <https://arxiv.org/abs/2205.02902> (accessed: 11.07.2025).
7. Antonelo E. A., Camponogara E., Seman L. O., Jordanou J. P., Rehbein de Souza E., Hübner J. F. Physics informed neural nets for control of dynamical systems [Online]. Available:

<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0925231224001905>
(accessed: 11.07.2025).

8. Wang S., Teng Y., Perdikaris P. Understanding and mitigating gradient pathologies in physics informed neural networks [Online]. Available: <https://arxiv.org/abs/2001.04536> (accessed: 11.07.2025).