КАЗАХСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ АЛЬ-ФАРАБИ · КАФЕДРА КОМПЬЮТЕРНЫХ НАУК

Научное машинное обучение

Лекция 7.Обратные задачи с PINN: оценка параметров и оптимизация с ограничениями в виде ДУЧП

Восстановление коэффициентов уравнений по редким зашумлённым измерениям

Кенжебек Ержан Ғалымжанұлы

PhD, старший преподаватель кафедры компьютерных наук

Цель и план лекции

Цель

Освоить постановку обратных задач для ДУЧП и их решение с помощью PINN; сопоставить подход с классической оптимизацией при ограничениях в виде ДУЧП.

План

1. Прямые и обратные задачи
2. Постановка обратной задачи в PINN
3. Типы неизвестных
4. Пример: восстановление коэффициента диффузии
5. Идентифицируемость и шум
6. Оптимизация с ограничениями в виде ДУЧП

Прямая и обратная задачи

Прямая

Параметры и условия известны, ищем решение u. Задача, как правило, корректна.

Обратная

Известны измерения u в отдельных точках, ищем параметры, источники, условия или вид уравнения. Как правило, некорректна.

Некорректность: решение может быть неединственным или сильно зависеть от шума в данных.

Постановка в PINN

Параметры θ становятся обучаемыми вместе с весами сети. Функция потерь связывает данные и уравнение:

$$L(w, \theta) = L_data(w) + L_pde(w, \theta) + L_bc(w) + L_ic(w)$$

L_data — расхождение с измерениями, L_pde — невязка уравнения с параметрами θ. Минимизация идёт по w и θ совместно.

Что можно восстанавливать

Неизвестное	Пример	Особенности
Скалярный параметр	Коэффициент диффузии D, вязкость ν	Простейший случай
Поле коэффициента	Проницаемость $k(x)$	Вторая сеть для k
Источник	Функция $f(x, t)$	Часто сильно некорректно
Граничные условия	Поток на недоступной границе	Нужны данные внутри области
Вид уравнения	Недостающий член	Лекция 13: SINDy

Алгоритм

- Задать начальное приближение θ_0 (положительные параметры — через экспоненту: D = exp(p)).
- Обучать сеть u_w и параметры θ минимизацией суммарных потерь.
- Масштабировать вклад данных и невязки; следить за каждым членом отдельно.
- Контролировать сходимость θ по итерациям и устойчивость к инициализации.

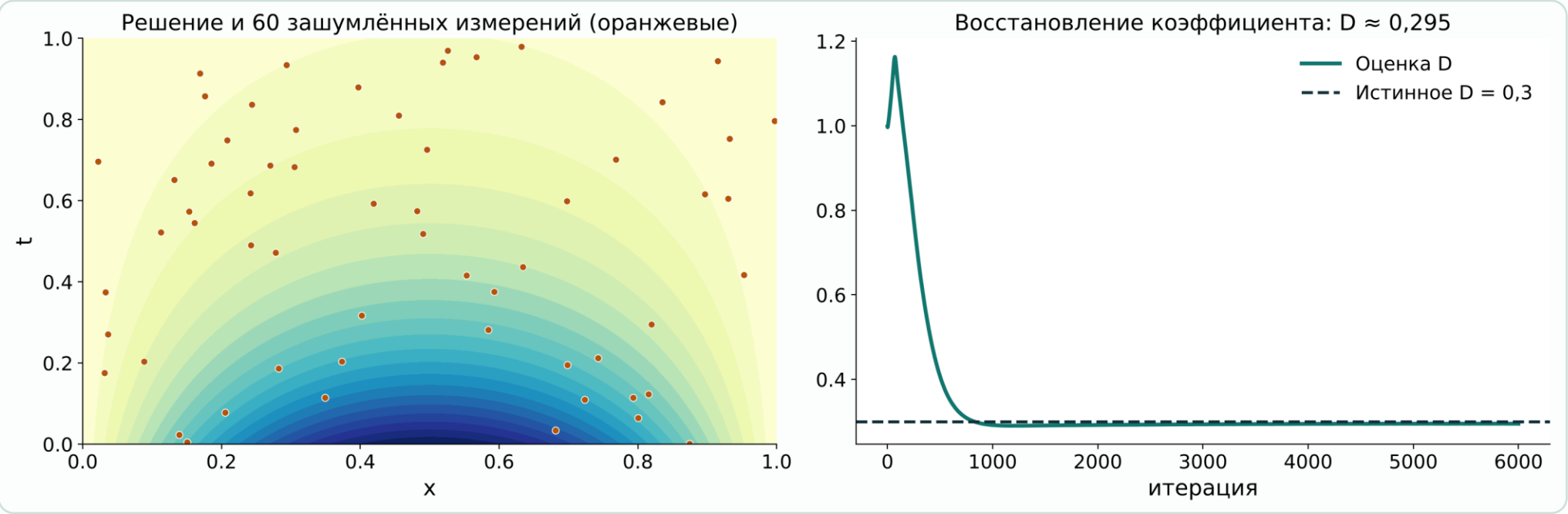
Пример: диффузия

$$u_t = D \cdot u_{xx},\ x \in [0, 1],\ u(0,t) = u(1,t) = 0,\ u(x,0) = \sin(\pi x)$$

Точное решение $u = \exp(-D\pi^2 t)\cdot\sin(\pi x)$, истинное $D = 0{,}3$. Данные: 60 случайных точек (x, t) с шумом 2 %. Сеть 3×32, tanh; 6000 итераций Adam; начальное $D = 1$.

Цель — найти D по зашумлённым измерениям и уравнению.

Результат восстановления



Оценка D сошлась к 0,295 при истинном 0,3 (ошибка около 2 %) всего по 60 зашумлённым измерениям.

Идентифицируемость и шум

Идентифицируемость

Параметр определяется только если данные чувствительны к нему.

Шум

Переобучение под шум искажает оценку; помогает регуляризация и ранняя остановка.

Данные

Расположение измерений важнее их количества.

Перед реальными данными обязательно проверять метод на синтетических данных с известным ответом.

Оптимизация с ограничениями в виде ДУЧП

Общая задача: подобрать управление или параметр m, минимизирующий критерий J, при условии, что состояние u удовлетворяет уравнению.

$$\min J(u, m) \text{ при } F(u, m) = 0$$

Обратные задачи, оптимальное управление и проектирование формы относятся к этому классу.

Способы решения

Подход	Идея	Особенность
Сопряжённый метод	Градиент J по m через решение сопряжённого уравнения	Точный градиент, но нужен решатель и его сопряжённая версия
PINN со штрафом	F(u, m) = 0 входит штрафом в потери	Без сетки и решателя; приближённое выполнение
Жёсткие ограничения	Ансатц удовлетворяет условиям точно	Меньше штрафов; нужна конструкция ансатца

Приложения

Механика жидкости

Восстановление поля давления и скорости по визуализации (Raissi, Yazdani, Karniadakis, 2020).

Геофизика и томография

Оценка свойств среды по измерениям на поверхности.

Биомедицина

Параметры моделей тканей и потоков по снимкам.

Практические советы

- Сначала решить прямую задачу и убедиться, что сеть справляется.
- Нормировать данные и параметры к единичному порядку.
- Запускать с несколькими инициализациями θ_0.
- Проверять чувствительность оценки к шуму.

Выводы

- Обратные задачи ищут параметры, источники или условия по измерениям и, как правило, некорректны.
- В PINN параметры обучаются совместно с весами сети; потери объединяют данные и невязку.
- Метод позволил по 60 зашумлённым точкам восстановить коэффициент диффузии с ошибкой около 2 %.
- Результат зависит от идентифицируемости, шума и расположения данных.
- Оптимизация с ограничениями в виде ДУЧП решается и сопряжённым методом, и PINN со штрафом.

Контрольные вопросы

1. Чем обратная задача отличается от прямой и почему она некорректна?
2. Как параметр уравнения включается в обучение PINN?
3. Зачем положительный параметр записывают через экспоненту?
4. Что такое идентифицируемость?
5. В чём отличие сопряжённого метода от PINN со штрафом?
6. Как проверить метод до работы с реальными данными?

Литература

1. Raissi M., Perdikaris P., Karniadakis G.E. Physics-informed neural networks // J. Comput. Phys. 2019. Vol. 378. P. 686–707.
2. Raissi M., Yazdani A., Karniadakis G.E. Hidden fluid mechanics: learning velocity and pressure fields from flow visualizations // Science. 2020. Vol. 367. P. 1026–1030.
3. Tarantola A. Inverse Problem Theory and Methods for Model Parameter Estimation. SIAM, 2005.
4. Vogel C.R. Computational Methods for Inverse Problems. SIAM, 2002.
5. Hinze M., Pinnau R., Ulbrich M., Ulbrich S. Optimization with PDE Constraints. Springer, 2009.
6. Lu L. et al. Physics-informed neural networks with hard constraints for inverse design // SIAM J. Sci. Comput. 2021. Vol. 43.