КАЗАХСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ АЛЬ-ФАРАБИ · КАФЕДРА КОМПЬЮТЕРНЫХ НАУК

Научное машинное обучение

Лекция 4. Физически-информированные нейронные сети (PINN): формулировка и функции потерь

Невязка уравнения как часть функции потерь: идея, формулировка и первый пример

Кенжебек Ержан Ғалымжанұлы

PhD, старший преподаватель кафедры компьютерных наук

Цель и план лекции

Цель

Изучить постановку метода PINN, структуру функции потерь и выбор коллокационных точек; разобрать решение простых ДУЧП нейросетью.

План

1. Общая форма ДУЧП
2. Идея PINN и схема метода
3. Функция потерь и её составляющие
4. Коллокационные точки
5. Примеры: уравнение Пуассона и Бюргерса
6. Достоинства и ограничения

Общая форма задачи

Рассматривается нестационарное ДУЧП с начальным и граничным условиями.

$$u_t + N[u; \lambda] = 0, \; x \in \Omega, \; t \in [0, T]$$

$$u(x, 0) = u_0(x), \; B[u](x, t) = g(x, t), \; x \in \partial\Omega$$

N — дифференциальный оператор, λ — параметры. Для прямой задачи λ известны; для обратной — ищутся.

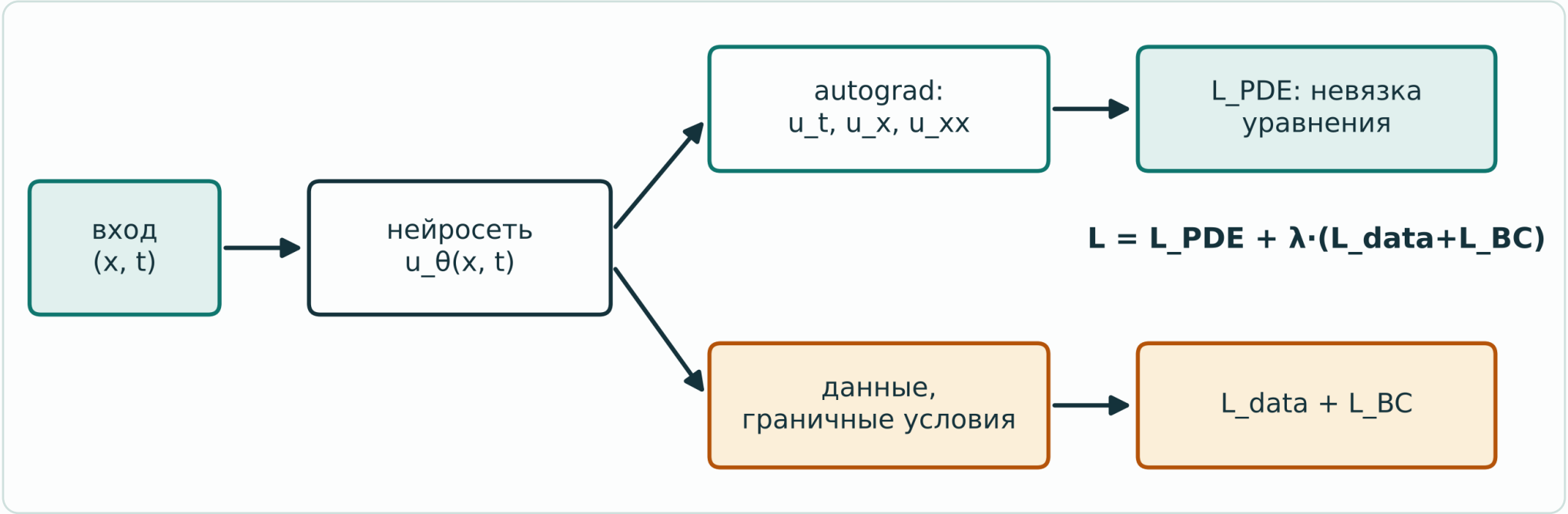
Идея PINN

Решение аппроксимируется нейросетью $u_\theta(x, t)$. Производные берутся автоматическим дифференцированием, а обучение заставляет сеть удовлетворять уравнению.

$$f_\theta(x, t) := \partial u_\theta / \partial t + N[u_\theta; \lambda]$$

Если $f_\theta \equiv 0$, а условия выполнены, то u_θ — решение. Метод предложен Райсси, Пердикарисом и Карниадакисом (2019); раньше близкий подход применяли Лагарис и соавторы (1998).

Схема метода



Сеть принимает координаты, autograd строит производные для невязки, а условия и данные дают дополнительные члены потерь.

Функция потерь

$$L(\theta) = w_r \cdot L_r + w_b \cdot L_b + w_0 \cdot L_0 + w_d \cdot L_{data}$$

Член	Смысл	Формула (среднее по точкам)
L_r	Невязка уравнения	$\lvert f_\theta(x_j, t_j)\rvert^2$
L_b	Граничные условия	$\lvert B[u_\theta] - g\rvert^2$
L_0	Начальное условие	$\lvert u_\theta(x, 0) - u_0\rvert^2$
L_{data}	Измерения (если есть)	$\lvert u_\theta(x_i, t_i) - u_i\rvert^2$

Коллокационные точки

- Точки внутри области $\Omega \times [0, T]$, где вычисляется невязка.
- Равномерная сетка, случайная выборка, последовательности Соболя, латинский гиперкуб.
- Повторная случайная выборка на каждой итерации улучшает покрытие.
- Отдельные точки на границе и при $t = 0$.

Число и положение точек влияют на точность; для резких решений нужна адаптация (лекция 5).

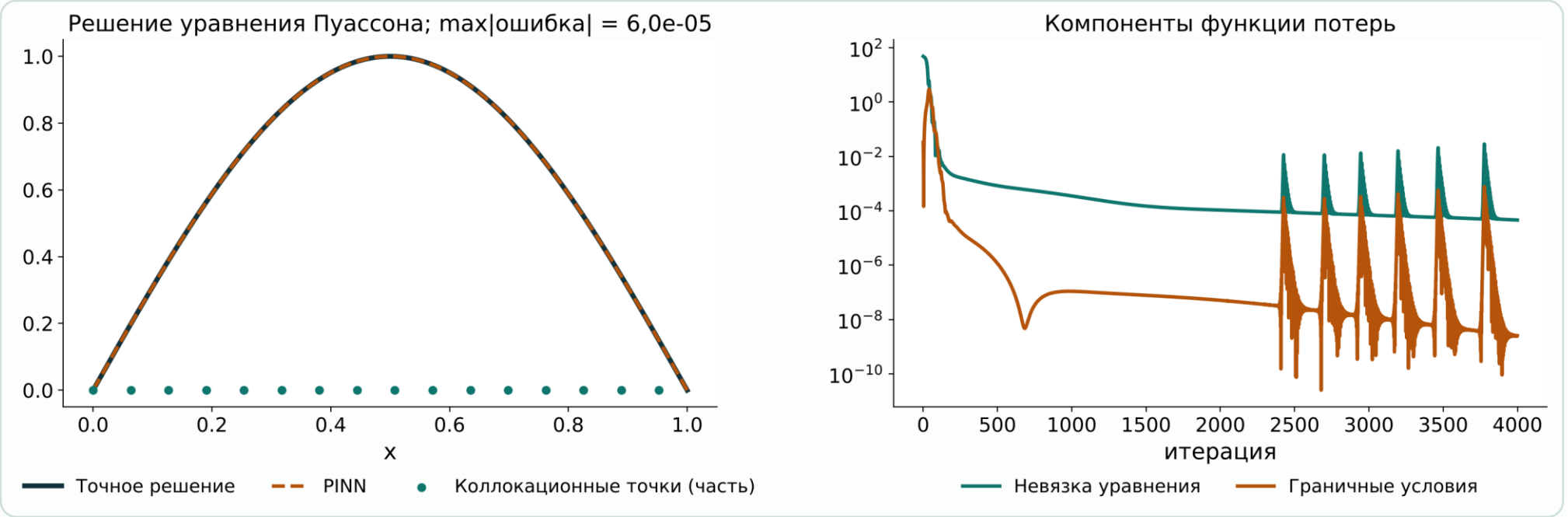
Пример 1: уравнение Пуассона

$$-u''(x) = \pi^2 \cdot \sin(\pi x),\ x \in (0, 1),\ u(0) = u(1) = 0$$

Точное решение $u(x) = \sin(\pi x)$. Сеть: 3 скрытых слоя по 32 нейрона, tanh; 64 коллокационные точки; 4000 итераций Adam.

Потери: $L = L_r + L_b$.

Результат: Пуассон



Максимальная ошибка составила около $6 \cdot 10^{-5}$. Всплески на кривой потерь — типичная нестабильность Adam; невязка и граничные условия уменьшаются на порядки.

Пример 2: уравнение Бюргерса

$$u_t + u \cdot u_x = \nu \cdot u_{xx},\ u(x, 0) = -\sin(\pi x),\ u(\pm 1, t) = 0$$

Стандартный тест с $\nu = 0{,}01/\pi$. Решение формирует почти разрыв при $x = 0$; точное решение получают преобразованием Хопфа–Коула.

Невязка: $f_\theta = u_t + u \cdot u_x - \nu \cdot u_{xx}$, вычисляется тремя вызовами autograd.

Архитектура и обучение

- Полносвязная сеть: 4–8 слоёв по 20–100 нейронов.
- Активация tanh, инициализация Ксавье, нормировка входов.
- Первая стадия — Adam, затем L-BFGS для высокой точности.
- Контроль: ошибка относительно эталонного решения и отдельные компоненты потерь.

Достоинства и ограничения

Достоинства

Не требует сетки; одинаково работает с данными и без них; естественно решает обратные задачи; не зависит явно от размерности области.

Ограничения

Прямые задачи часто медленнее классических решателей; сходимость не гарантирована; чувствительность к весам потерь и гиперпараметрам.

Выводы

- PINN аппроксимирует решение нейросетью и обучается минимизировать невязку уравнения и нарушение условий.
- Производные по координатам вычисляются автоматическим дифференцированием.
- Функция потерь — сумма взвешенных членов: уравнение, граница, начало, данные.
- Метод безсеточный: невязка считается в коллокационных точках.
- На простых задачах метод даёт высокую точность, но обучение требует аккуратной настройки.

Контрольные вопросы

1. Как строится невязка f_θ для заданного ДУЧП?
2. Из каких членов состоит функция потерь PINN?
3. Что такое коллокационные точки и как их выбирают?
4. Почему для PINN важна гладкая активация?
5. Какие достоинства и ограничения у PINN по сравнению с классическими методами?
6. Как записать невязку для уравнения Бюргерса?

Литература

1. Raissi M., Perdikaris P., Karniadakis G.E. Physics-informed neural networks // Journal of Computational Physics. 2019. Vol. 378. P. 686–707.
2. Lagaris I.E., Likas A., Fotiadis D.I. Artificial neural networks for solving ordinary and partial differential equations // IEEE Trans. Neural Networks. 1998. Vol. 9. P. 987–1000.
3. Lu L. et al. DeepXDE: a deep learning library for solving differential equations // SIAM Review. 2021. Vol. 63. P. 208–228.
4. Karniadakis G.E. et al. Physics-informed machine learning // Nature Reviews Physics. 2021. Vol. 3. P. 422–440.
5. Baydin A.G. et al. Automatic differentiation in machine learning: a survey // JMLR. 2018. Vol. 18.