КАЗАХСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ АЛЬ-ФАРАБИ · КАФЕДРА КОМПЬЮТЕРНЫХ НАУК

Научное машинное обучение

Лекция 2. Математические основы: ОДУ, ДУЧП и классические численные методы

Дифференциальные уравнения и конечные разности как базовое решение для сравнения с методами машинного обучения

Кенжебек Ержан Ғалымжанұлы

PhD, старший преподаватель кафедры компьютерных наук

Цель и план лекции

Цель

Повторить математические основы обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений в частных производных; освоить классические численные методы, которые служат эталоном для ML-решателей.

План

1. Обыкновенные дифференциальные уравнения
2. Уравнения в частных производных и их типы
3. Начальные и граничные условия, корректность
4. Метод конечных разностей
5. Устойчивость, согласованность, сходимость
6. Роль классических методов в SciML

Обыкновенные дифференциальные уравнения

Задача Коши: найти функцию u(t), удовлетворяющую уравнению и начальному условию.

$$du/dt = f(t, u),\ u(t_0) = u_0$$

Распад

$u' = -k \cdot u$. Решение $u_0 \cdot e^{(-kt)}$ убывает экспоненциально.

Осциллятор

$u'' + \omega^2 u = 0$. Колебания с частотой ω; сводится к системе первого порядка.

Хищник–жертва

Система Лотки–Вольтерры; нелинейная, замкнутые орбиты.

Уравнения в частных производных

Тип	Пример	Характер решения
Параболическое	Теплопроводность: $u_t = D \cdot u_{xx}$	Сглаживание, затухание во времени
Гиперболическое	Волновое: $u_{tt} = c^2 \cdot u_{xx}$	Волны с конечной скоростью
Эллиптическое	Пуассон: $-\Delta u = f$	Стационарное состояние, нет времени

Нелинейный пример — уравнение Бюргерса $u_t + u \cdot u_x = \nu \cdot u_{xx}$: при малой вязкости ν возникает ударная волна.

Начальные и граничные условия

Дирихле

Задано значение решения на границе: $u = g$.

Нейман

Задана производная по нормали: $\partial u/\partial n = h$ (поток).

Робин

Линейная комбинация значения и потока: $\alpha u + \beta \partial u/\partial n = r$.

Задача корректна по Адамару, если решение существует, единственно и непрерывно зависит от данных. Обратные задачи, как правило, некорректны.

Метод конечных разностей

Область покрывается сеткой с шагом h; производные заменяются разностными отношениями.

$$u'(x) \approx (u_{i+1} - u_{i-1}) / (2h), \text{ ошибка } O(h^2)$$

$$u''(x) \approx (u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}) / h^2, \text{ ошибка } O(h^2)$$

Ошибка аппроксимации выводится из разложения Тейлора.

Численные методы для ОДУ

Метод	Формула шага	Порядок
Явный Эйлер	$u_{n+1} = u_n + h \cdot f(t_n, u_n)$	1
Неявный Эйлер	$u_{n+1} = u_n + h \cdot f(t_{n+1}, u_{n+1})$	1
Рунге–Кутта 4	$u_{n+1} = u_n + h/6 \cdot (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$	4

Порядок p означает, что ошибка уменьшается как h^p при измельчении шага.

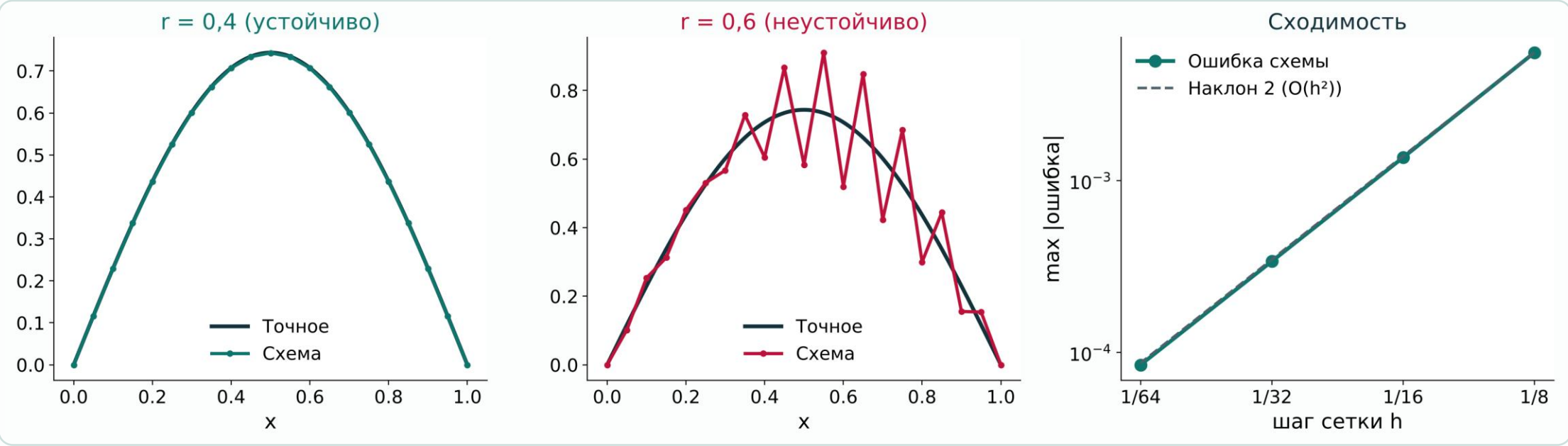
Явная схема для уравнения теплопроводности

$$u_i^{n+1} = u_i^n + r\cdot(u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n),\ r = D\cdot\Delta t / h^2$$

Схема проста и порядка $O(\Delta t + h^2)$, но условно устойчива: при $r \le 1/2$ возмущения затухают, при r больше $1/2$ растут экспоненциально.

Это ограничение на шаг по времени $\Delta t \le h^2/(2D)$ делает мелкие сетки дорогими.

Эксперимент: устойчивость и порядок



Тест: u(x,0) = sin(πx), D = 1. Слева r = 0,4 даёт гладкое решение; в центре r = 0,6 с малым возмущением даёт растущие осцилляции; справа ошибка падает как h².

Согласованность, устойчивость, сходимость

Согласованность

При $h \to 0$ разностная схема переходит в исходное уравнение.

Устойчивость

Ошибки округления и возмущения не растут неограниченно.

Сходимость

Численное решение стремится к точному при измельчении сетки.

Теорема Лакса–Рихтмайера: для корректной линейной задачи согласованная схема сходится тогда и только тогда, когда она устойчива.

Жёсткие задачи и неявные схемы

Задача жёсткая, если в ней есть процессы с сильно различающимися временными масштабами. Явные методы вынуждены брать очень малый шаг.

Явные методы

Дёшевый шаг, но жёсткое ограничение на Δt.

Неявные методы

Безусловная устойчивость (например, неявный Эйлер), но на каждом шаге решается система уравнений.

Другие классические подходы

Метод	Идея	Сильная сторона
Конечные элементы	Слабая форма, базисные функции на элементах	Сложная геометрия
Конечные объёмы	Баланс потоков через грани ячеек	Законы сохранения
Спектральные методы	Разложение по глобальным базисам	Высокая точность для гладких решений

Роль классических методов в SciML

Эталон

Решение, с которым сравнивают ML-решатель по точности и времени.

Данные

Расчёты порождают обучающие выборки для суррогатных моделей.

Проверка

Верификация PINN на задачах с известным решением.

Недостаток сеток — рост числа узлов с размерностью: N^d. Для высоких размерностей это мотивирует безсеточные методы на основе нейросетей.

Выводы

- ОДУ и ДУЧП описывают эволюцию и равновесие физических систем; тип уравнения определяет свойства решения.
- Корректная постановка требует условий и устойчивости решения к данным.
- Конечные разности заменяют производные разностными отношениями; порядок точности проверяется экспериментом.
- Явные схемы условно устойчивы, неявные устойчивы безусловно, но дороже на шаге.
- Классические методы — эталон, источник данных и средство проверки в SciML.

Контрольные вопросы

1. Чем отличаются параболические, гиперболические и эллиптические уравнения?
2. Что такое корректность по Адамару?
3. Как получается центральная разность для второй производной и каков её порядок?
4. При каком условии устойчива явная схема для уравнения теплопроводности?
5. Что утверждает теорема Лакса–Рихтмайера?
6. Почему классические методы нужны при обучении ML-решателей?

Литература

1. LeVeque R.J. Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations. SIAM, 2007.
2. Strikwerda J.C. Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations. 2nd ed. SIAM, 2004.
3. Hairer E., Nørsett S.P., Wanner G. Solving Ordinary Differential Equations I. Springer, 1993.
4. Evans L.C. Partial Differential Equations. 2nd ed. AMS, 2010.
5. Karniadakis G.E. et al. Physics-informed machine learning // Nature Reviews Physics. 2021. Vol. 3. P. 422–440.