



# **РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ НА СЕТЯХ РАДИАЛЬНЫХ БАЗИСНЫХ ФУНКЦИЙ**

**Аспирант Д.А. Стенькин  
(научный руководитель д.т.н., профессор В.И. Горбаченко)**

## ЦЕЛЬ, ЗАДАЧИ, МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ

**Цель работы** — разработка алгоритмов и программ решения прямых и обратных краевых задач математической физики, описывающих процессы в однородных и кусочно-однородных средах, на физически информированных сетях радиальных базисных функций с использованием метода градиентного спуска и метода Левенберга-Марквардта, разработка алгоритмов и программ решения системы дифференциальных уравнений Навье-Стокса на физически информированных сетях радиальных базисных функций с использованием метода Нестерова.

### **Задачи работы:**

Проведение анализа радиальных базисных функций. Проведение анализа сетей радиальных базисных функций при решении прямых и обратных краевых задач, которые моделируют процессы в однородных и кусочно-однородной средах.

Разработка алгоритмов для решения различных прямых краевых задач при помощи сетей радиальных базисных функций.

Разработка алгоритма для решения прямых краевых задач, описывающих кусочно-однородные среды, при помощи сетей радиальных базисных функций.

Разработка алгоритма для решения обратных краевых задач для кусочно-однородной среды при помощи сетей радиальных базисных функций.

Разработка и исследование комплексов программ, реализующих алгоритмы решения прямой краевой задачи.

Разработка и исследование комплекса программ, реализующего алгоритм решения прямой краевой задачи, которая моделирует процессы в кусочно-однородной среде. Проведение анализа экспериментов для данной модельной задачи.

Разработка и исследование комплекса программ, реализующего алгоритм решения обратной краевой задачи, которая моделирует процессы в кусочно-однородной среде. Проведение анализа экспериментов для данной модельной задачи.

Разработка алгоритма для решения системы дифференциальных уравнений Навье-Стокса при помощи сетей радиальных базисных функций.

Разработка и исследование комплекса программ, реализующего алгоритм решения системы дифференциальных уравнений Навье-Стокса.

Проведение анализа экспериментов для данной модельной задачи.

### **Методика исследования:**

Математической основой для разработки алгоритмов обучения сети, решающей прямые и обратные краевые задачи, являются методы оптимизации.

# РЕШЕНИЕ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ НА PHYSICS-INFORMED NEURAL NETWORKS

Решаемая краевая задача

$$A(\mathbf{u}(\mathbf{z}), \gamma) = \mathbf{f}(\mathbf{z}), \mathbf{z} \in \Omega, \quad B(\mathbf{u}(\mathbf{z})) = \mathbf{g}(\mathbf{z}), \mathbf{z} \in \partial\Omega, \quad D(\mathbf{u}(\mathbf{z})) = \mathbf{d}(\mathbf{z}), \mathbf{z} \in \Omega \cup \partial\Omega,$$

где  $A$  — дифференциальный оператор,  $\mathbf{f}(\mathbf{z})$  — функция,  $\mathbf{u}$  — искомое решение,  $\mathbf{z}$  — вектор пространственно-временных координат,  $\gamma$  — параметр задачи,  $B$  — оператор граничных условий,  $D$  — оператор дополнительных условий,  $\mathbf{g}(\mathbf{z})$  — граничная функция,  $\mathbf{d}(\mathbf{z})$  — функция дополнительных условий,  $\Omega$  — область решения,  $\partial\Omega$  — граница области решения.

Вектор параметров сети

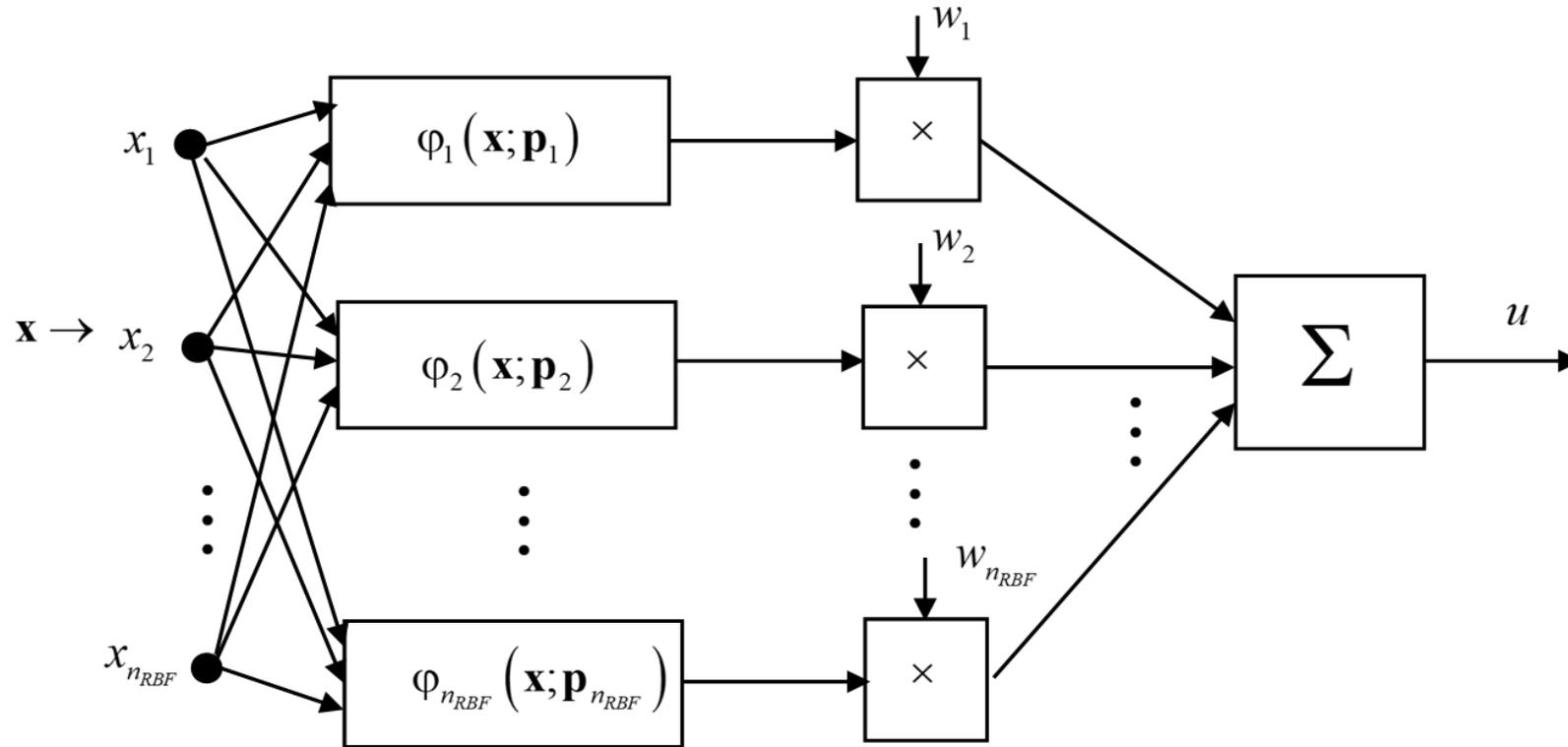
$$\Theta^* = \arg \min_{\Theta} (L),$$

Функция потерь

$$L = \lambda_A L_A + \lambda_B L_B + \lambda_D L_D, \quad L_A = \frac{1}{N_A} \sum_{i=1}^{N_A} (A(\mathbf{u}(\mathbf{z}_i)) - \mathbf{f}(\mathbf{z}_i))^2, \quad L_B = \frac{1}{N_B} \sum_{j=1}^{N_B} (B(\mathbf{u}(\mathbf{z}_j)) - \mathbf{g}(\mathbf{z}_j))^2, \quad L_D = \frac{1}{N_D} \sum_{k=1}^{N_D} (D(\mathbf{u}(\mathbf{z}_k)) - \mathbf{d}(\mathbf{z}_k))^2,$$

где  $N_A, N_B, N_D$  — количество пробных точек для уравнения, краевых условий и дополнительных условий,  $\lambda_A, \lambda_B, \lambda_D$  — задаваемые пользователем или настраиваемые в процессе обучения сети весовые коэффициенты

# СЕТЬ РАДИАЛЬНЫХ БАЗИСНЫХ ФУНКЦИЙ



$$u(\mathbf{x}) = \sum_{m=1}^{n_{RBF}} w_m \varphi_m(\mathbf{x}; \mathbf{p}_m)$$

Функция Гаусса

$$\varphi(\|\mathbf{x} - \mathbf{c}\|, a) = \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{c}\|^2}{2a^2}\right)$$

## Алгоритм градиентного спуска

$$\boldsymbol{\theta}^{(k+1)} = \boldsymbol{\theta}^{(k)} + \Delta\boldsymbol{\theta}^{(k+1)}$$

где  $\Delta\boldsymbol{\theta}^{(k+1)} = -\eta \nabla I(\boldsymbol{\theta}^{(k)})$  — поправка вектора параметров,  $\eta$  — подбираемый гиперпараметр (скорость обучения),  $\nabla L(\boldsymbol{\theta}^{(k)})$  — вектор градиента функции потерь по компонентам вектора  $\boldsymbol{\theta}^{(k)}$  на итерации  $k$ .

## Алгоритм Левенберга-Марквардта

$$\left( \mathbf{J}_{k-1}^T \mathbf{J}_{k-1} + \mu_k \mathbf{E} \right) \Delta\boldsymbol{\theta}^{(k)} = -\mathbf{g}_{k-1}$$

где  $\mathbf{J}_{k-1}$  — матрица Якоби, вычисленная по значениям параметров сети в  $k-1$  итерации,  $\mathbf{E}$  — единичная матрица,  $\mu_k$  — параметр регуляризации,  $\mathbf{g} = \mathbf{J}^T \mathbf{r}$  — градиент функции потерь по вектору параметров  $\boldsymbol{\theta}$ ,  $\mathbf{r} = [r_1 \ r_2 \ \dots \ r_{N+K}]^T$  — вектор невязок в пробных точках в области решения и на границе области решения.

## Алгоритм Нестерова

$$\Delta\boldsymbol{\Theta}^{(k+1)} = \alpha \Delta\boldsymbol{\Theta}^{(k)} - \gamma \text{grad } I(\boldsymbol{\Theta}^{(k)} - \alpha \Delta\boldsymbol{\Theta}^{(k)})$$

где  $\boldsymbol{\theta}$  — вектор одного из параметров сети (можно рассматривать вектор всех параметров),  $\gamma$  — подбираемый числовой коэффициент (скорость обучения),  $\alpha$  — коэффициент момента, принимающий значения в интервале  $[-0.5; 1.5]$ .

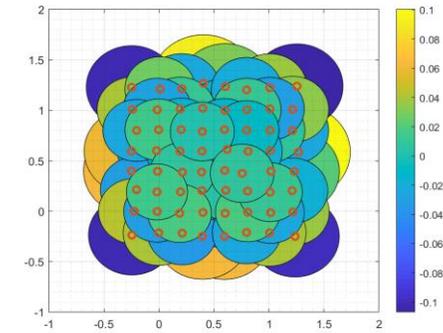
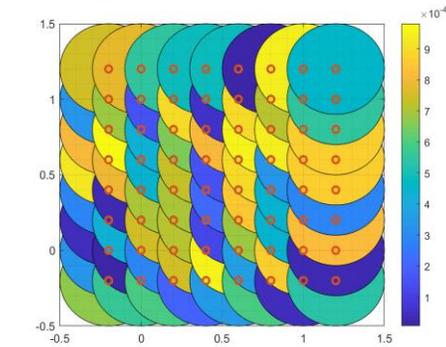
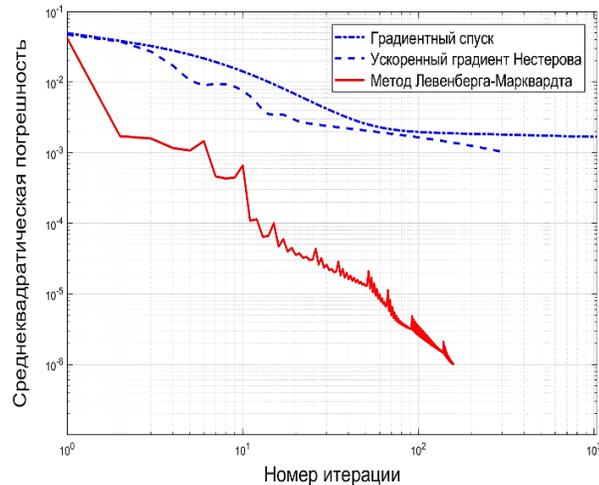
# ПРИМЕР РЕШЕНИЯ МОДЕЛЬНОЙ ЗАДАЧИ

Модельная задача

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} = f(x_1, x_2), \quad (x_1, x_2) \in \Omega,$$

$$u = p(x_1, x_2), \quad (x_1, x_2) \in \partial\Omega, \quad f(x_1, x_2) = \sin(\pi x_1) \sin(\pi x_2), \quad p(x_1, x_2) = 0$$

Количество пробных точек внутри и на границе области решения равно,  $N = 100$  и  $K = 40$  соответственно. Задача решалась на компьютере с процессором Intel Core i5 8500, частотой 3,0 GHz и объемом оперативной памятью 16,0 GB.



Зависимости средней квадратической невязки различных алгоритмов от номера итерации

РБФ при решении краевой задачи

Алгоритм	Достигнутая средняя квадратическая погрешность	Число итераций	Время решения, С
Алгоритм градиентного спуска	$3 \cdot 10^{-3}$	1000	1100
Алгоритм метода Нестерова	$7 \cdot 10^{-4}$	1000	1120
Алгоритм метода Левенберга-Марквардта	$10^{-6}$	30	8,5

# РЕШЕНИЕ ПРЯМЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ КУСОЧНО-ОДНОРОДНЫХ СРЕД

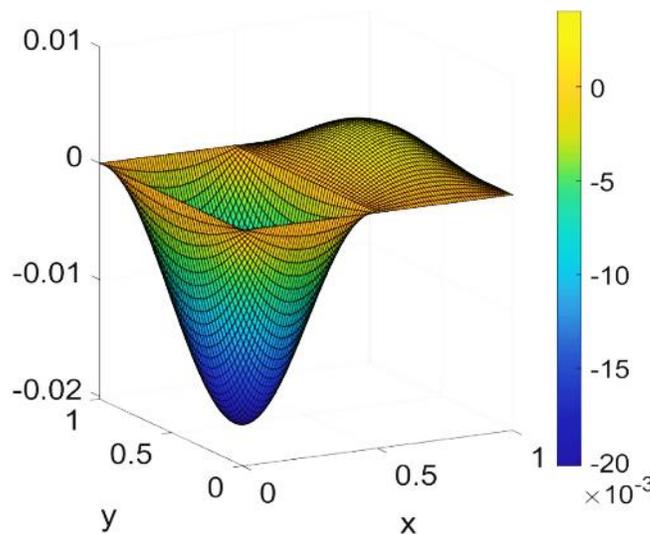
Решаемая задача

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \sigma_i(x, y) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \sigma_i(x, y) \frac{\partial u}{\partial y} \right) = f(x, y), \quad (x, y) \in \Omega, \quad i = 1, 2 \quad u(x, y) = p(x, y), \quad (x, y) \in \partial\Omega$$

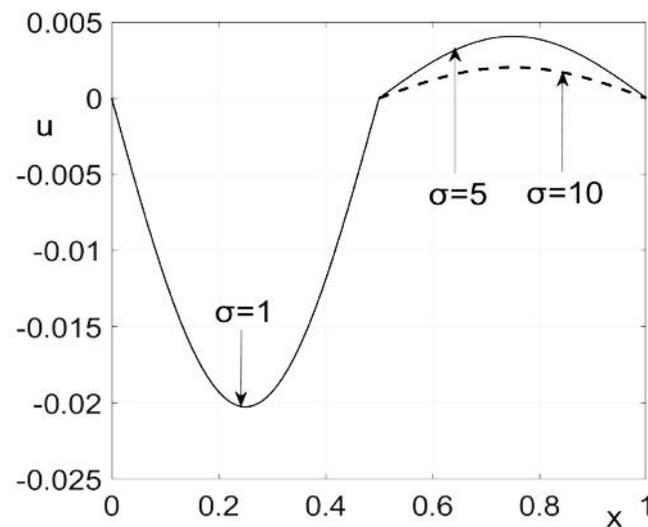
$$u_1|_S = u_2|_S, \quad \sigma_1 \frac{du_1}{dx} \Big|_S = \sigma_2 \frac{du_2}{dx} \Big|_S$$

Функция потерь

$$L_1 = \sum_{i=1}^{N_1} [A_1 u_1(\mathbf{x}_{1i}) - f_1(\mathbf{x}_{1i})]^2 + \lambda_1 \sum_{j=1}^{K_1} [B_1 u_1(\mathbf{x}_{1j}) - p_1(\mathbf{x}_{1j})]^2 + \lambda_2 \sum_{j=1}^T [u_1(\mathbf{x}_{2j}) - u_2(\mathbf{x}_{2j})]^2 + \lambda_4 \sum_{j=1}^T \left[ \sigma_1 \frac{\partial u_1(\mathbf{x}_{2j})}{\partial x} - \sigma_2 \frac{\partial u_2(\mathbf{x}_{2j})}{\partial x} \right]^2,$$



а)



б)

Графики решения: а) приближенное решение; б) график решения в среднем сечении

# РЕШЕНИЕ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ КУСОЧНО-ОДНОРОДНЫХ СРЕД

$$\frac{\partial}{\partial x_1} \left( k(\mathbf{x}) \frac{\partial u}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left( k(\mathbf{x}) \frac{\partial u}{\partial x_2} \right) = f(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad Bu(\mathbf{x}) = p(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega$$

Необходимо найти решение  $u$  и функцию  $k(\mathbf{x})$  по решению, известному в некотором множестве точек

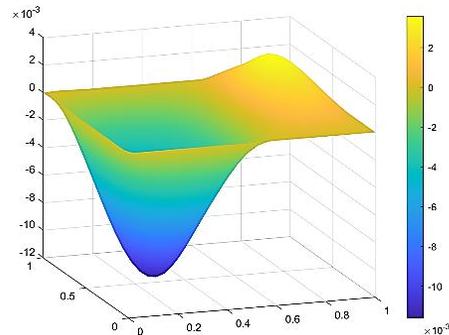
$$u(\mathbf{z}) = \psi(\mathbf{z}), \quad \mathbf{z} \in Z, \quad Z \subset \Omega \cup \partial\Omega$$

Используем параметрическую оптимизацию. Для этого неизвестную функцию  $k(\mathbf{x})$  аппроксимируем сетью радиальных базисных функций

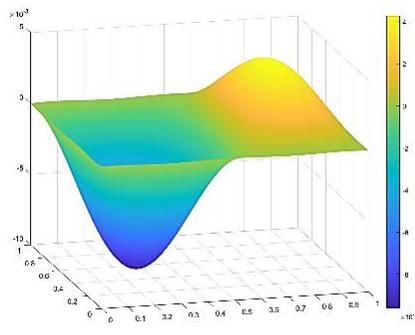
$$k_{RBF}(\mathbf{x}) = \sum_{m=1}^{M_k} w_m^k \phi_m^k(\mathbf{x}; \mathbf{p}_m^k)$$

Решение прямой задачи находим второй сетью радиальных базисных функций  $u_{RBF}(\mathbf{x}) = \sum_{m=1}^{M_u} w_m^u \phi_m^u(\mathbf{x}; \mathbf{p}_m^u)$

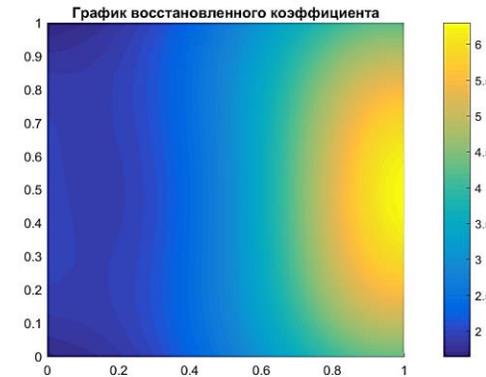
Функция потерь 
$$L = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N [Au(\mathbf{x}_i, k(\mathbf{x}_i)) - f(\mathbf{x}_i)]^2 + \frac{\lambda_B}{2} \sum_{j=1}^K [Bu(\mathbf{x}_j) - p(\mathbf{x}_j)]^2 + \frac{\lambda_D}{2} \sum_{m=1}^S [u(\mathbf{x}_m) - \psi(\mathbf{x}_m)]^2,$$



а)



б)



Вычисленные значения функции среды

Решение прямой задачи: а) решение исходной прямой задачи; б) восстановленное решение прямой задачи

## АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ-СТОКСА

Рассмотрим модельное течение Коважного.

Течение Коважного является двумерным стационарным течением. Аналитическое решение имеет вид

$$u(x, y) = -e^{(-\lambda x)} \cos(2\pi y), v(x, y) = -\frac{\lambda}{2\pi} e^{(-\lambda x)} \sin(2\pi y), p(x, y) = -\frac{1}{2} e^{(-2\lambda x)}, \lambda = \sqrt{\frac{\text{Re}^2}{4} + 4\pi^2} - \frac{\text{Re}}{2}.$$

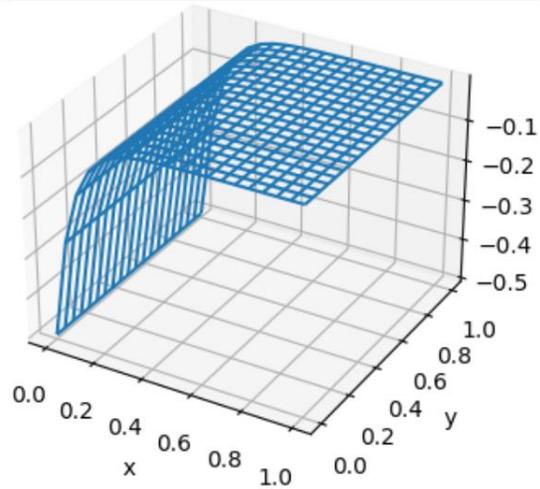
Двумерные стационарные уравнения Навье–Стокса для несжимаемой среды имеют вид

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{\text{Re}} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right), \quad u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{\text{Re}} \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right).$$

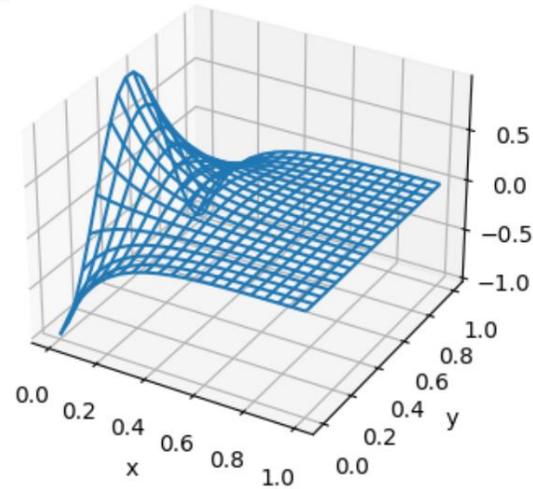
Функция потерь

$$I = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left( u \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + v \frac{\partial u_i}{\partial y_i} + \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{1}{\text{Re}} \left( \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2 u_i}{\partial y_i^2} \right) \right)^2 + \frac{\lambda}{2} \sum_{j=1}^K (u_j - du_j)^2 +$$
$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left( u \frac{\partial v_i}{\partial x_i} + v \frac{\partial v_i}{\partial y_i} + \frac{\partial p}{\partial y_i} - \frac{1}{\text{Re}} \left( \frac{\partial^2 v_i}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2 v_i}{\partial y_i^2} \right) \right)^2 + \frac{\lambda}{2} \sum_{j=1}^K (v_j - dv_j)^2 +$$
$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial u}{\partial x_i} + \frac{\partial v}{\partial y_i} \right)^2 + \frac{\lambda}{2} \sum_{j=1}^K (p_j - dp_j)^2.$$

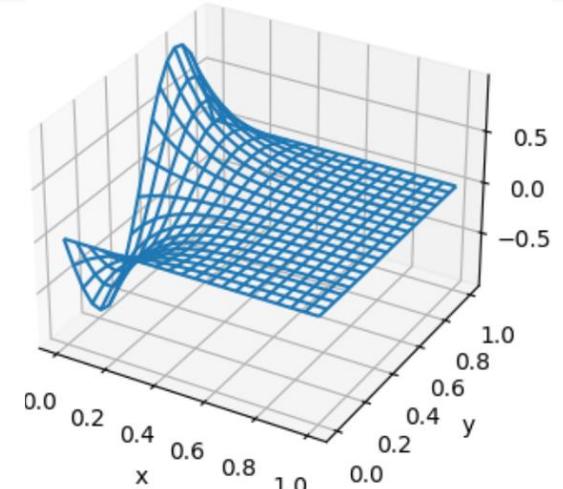
# РЕЗУЛЬТАТЫ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ НАВЬ-СТОКСА



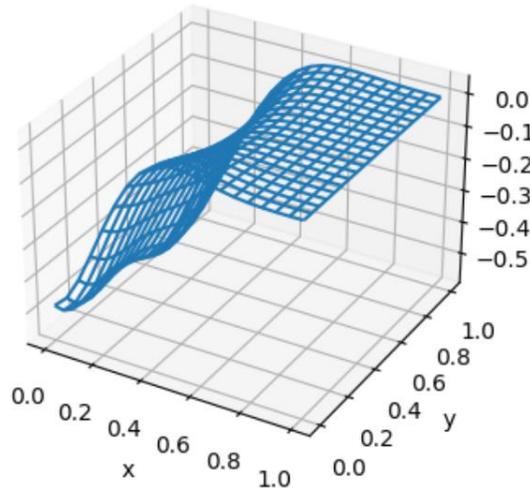
Аналитическое решение для давления.



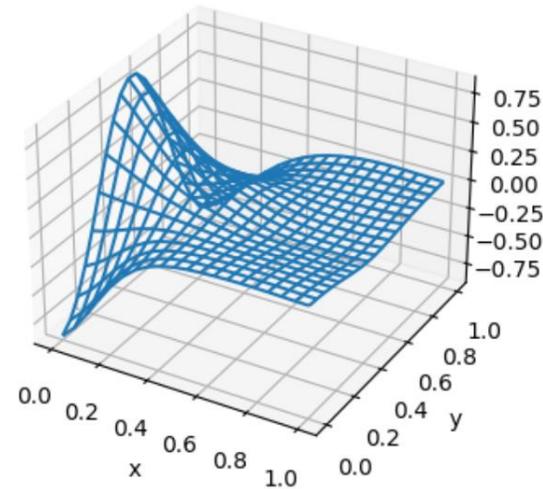
Аналитическое решение для первой компоненты скорости.



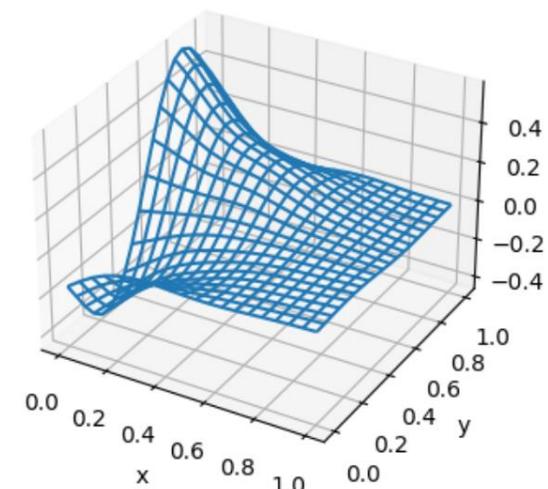
Аналитическое решение для второй компоненты скорости.



Давление, полученное в результате работы сети.



Первая компонента скорости, полученная в результате работы сети.



Вторая компонента скорости, полученная в результате работы сети.

Разработаны новые бессеточные алгоритмы решения краевых задач, которые моделируют процессы в кусочно-однородной среде. Алгоритмы реализованы при помощи физически информированных сетей радиальных базисных функций, которые обучались методом Левенберга-Марквардта. Алгоритм решения прямой задачи основан на решении отдельных задач для каждой области с разными свойствами среды. Это снимает ограничения на применяемые радиальные базисные функции. Алгоритм для решения обратной задачи был реализован с использованием параметрической оптимизации. Алгоритмы основаны на быстром методе Левенберга-Марквардта. Получены рабочие формулы для вычисления элементов матрицы Якоби. Разработаны программы решения на примере модельных задач. Разработан, реализован и экспериментально исследован бессеточный алгоритм решения системы дифференциальных уравнений Навье-Стокса на физически информированных сетях радиальных базисных функций. На примере модельной задачи разработаны программы решения двумерных стационарных уравнений Навье-Стокса при помощи физически информированных сетей радиальных базисных функций, обучаемых методом Нестерова.

Сети радиальных базисных функций являются перспективным классом основанных на физике нейронных сетей и могут эффективно использоваться для решения прямых и обратных краевых задач, описываемых дифференциальными уравнениями в частных производных.

Дальнейшими направлениями исследований являются совершенствование алгоритмов обучения сетей радиальных базисных функций, разработка расширений библиотек глубокого обучения для реализации сетей радиальных базисных функций и автоматического дифференцирования для таких сетей, а также решение более сложных модельных и реальных задач.

**СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!**