

О применении нейросетевых методов к генерации структурированных сеток в задачах численного решения уравнений в частных производных

Хайруллин Б.Р., Загидуллин Р.Р., Рыкованов С.Г.

Сколковский институт науки и технологий

Оглавление

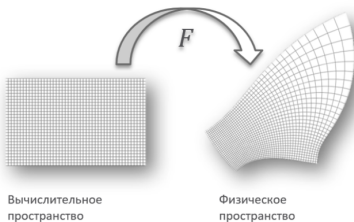
1. Постановка задачи
2. Мотивация
3. Краткая история
4. Нейросетевое построение структурированных сетей
5. Основные результаты
6. Применение к УРЧП

Постановка задачи

Цель: найти карту $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ из вычислительной области в физическую.

Требования:

- ▶ Биективность (без самопересечений)
- ▶ Гладкость



Структурированные решётки (СР) позволяют решать УРЧП в вычислительных доменах

- ▶ Возможность использовать конечные разности (FDM), метод частица-в-ячейке (PIC)
- ▶ В отличие от ступенчатой аппроксимации, вписанные решётки не теряют информацию о границе
- ▶ Универсальность: построение карты зависит от домена, но не от уравнения на нем

Краткая история

- ▶ **1950–60-е** — первые схемы конечных разностей (FDM) на прямоугольных регулярных сетках
- ▶ **1970-е** — введение криволинейных координат (body-fitted grids)
- ▶ **1980–90-е** — вариационные и эллиптические методы генерации сеток
- ▶ **2000-е** — рост интереса к несогласованным (unstructured) сеткам для FEM
- ▶ **2010-е** — развитие адаптивных и блочных структурированных сеток, но общий спад интереса
- ▶ **2022** — MGNet (генерация нейросетью)

Нейросетевое построение структурированных сеток

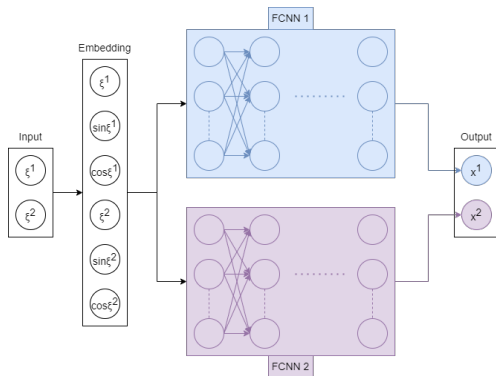
- ▶ Нейронная сеть (НС) принимает точку вычислительного пространства и возвращает точку физического пространства: $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathcal{NN}_\theta \rightarrow \mathbb{R}^n$
- ▶ Тренировка НС - поиск весов θ , при которых НС представляет из себя карту CP
- ▶ Функция потерь для границы:

$$L_{\text{boundary}} = \frac{1}{B} \sum_{i=1}^B \|x(\xi_i) - x_i\|^2 \quad (1)$$

- ▶ Функция потерь для распределения внутренних узлов:

$$L_{\text{int}} = \frac{1}{P} \sum_{p=1}^P \frac{g_{11} + g_{22}}{\sqrt{\det g}}(\xi_p) \quad (2)$$

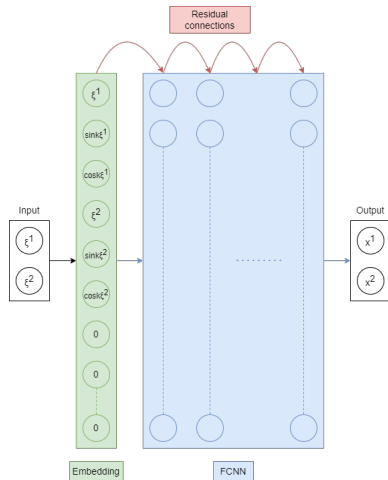
MGNet¹



¹ Chen, Xinhai et al. Mgnet: a novel differential mesh generation method based on unsupervised neural networks. Eng. Comput. 38(5), 4409–4421 (2022).

Предложенная архитектура

- ▶ Обучение малых изменений из слоя в слой. В таком виде нейронная сеть является аппроксимацией к диффеоморфизму между пространствами²
- ▶ Исходно все веса инициализируются нулями, что позволяет начать с тождественного отображения (заведомо биективно)



² Michael Hauser and Asok Ray. Principles of Riemannian geometry in neural networks. Adv. Neural Inf. Process. Syst., 30 (2017).

Возможность избавиться от физически-информированных функций потерь

- ▶ Функция потерь для распределения внутренних узлов требует двойного дифференцирования - один раз по входящим данным, второй раз по весам для оптимизации
- ▶ Вычислительный граф становится намного больше, что приводит к значительно более медленной тренировке (порядка 100 раз)
- ▶ Возможно ли построить биективную карту, используя только функцию потерь на границе?

Ограничение по весам

Для нейронной сети разностной архитектуры постоянной ширины 2 можно получить следующее:

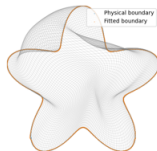
$$\det J_{n+1} \geq 1 - \underbrace{\left(\Delta l \sqrt{2 \sum_i (W_{n,ii})^2} + \Delta l^2 \text{ReLU}(-\det W_n) \right)}_{\mu(W_n)} \geq 0$$

Algorithm 1 Algorithm to constraint Jacobians

```
1:  $W \leftarrow W + \Delta W$  ▷ train step
2: for  $W_n$  in  $W$  do
3:   count  $\leftarrow 0$ 
4:   while  $\mu(W_n) > 1$  do
5:     if count  $< N_{\max}$  then
6:        $W_n \leftarrow W_n - \alpha \frac{\partial \mu}{\partial W_n}(W_n)$ 
7:       count  $\leftarrow$  count+1
8:     else
9:        $W_n \leftarrow \beta \cdot W_n$ 
10:    end if
11:  end while
12: end for
```

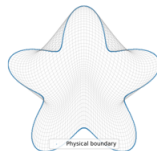
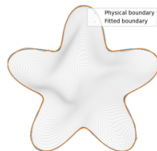
Основные результаты

Только функция
потерь на границе



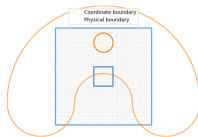
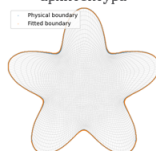
Линейная
интерполяция

Ограничения
на веса

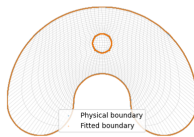


Трансфинитная
интерполяция

Предложенная
архитектура



Iteration 0



Iteration 11 000

Применение к УРЧП

$$\frac{\partial}{\partial x^i} = J_i^j \partial_j$$

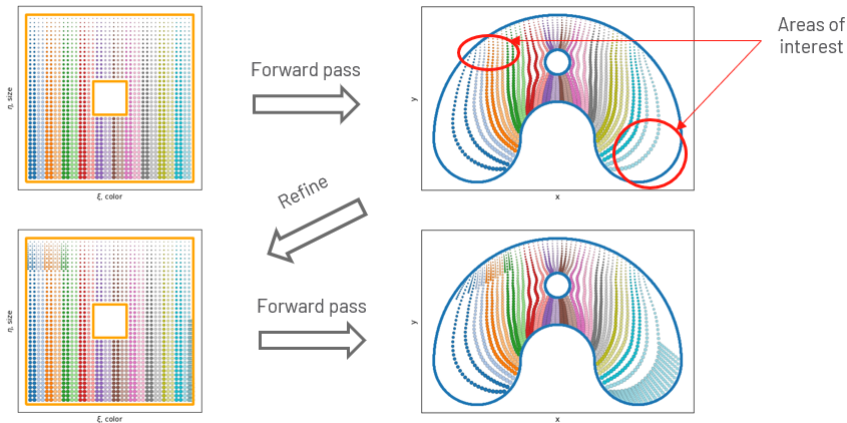
$$\Delta = g^{ij}(\partial_{ij}^2 - \Gamma_{ij}^k \partial_k)$$

$\frac{g^{01}}{2h^2}$	$\frac{g^{11}}{h^2} + \frac{W^1}{2h}$	$-\frac{g^{01}}{2h^2}$
$\frac{g^{00}}{h^2} + \frac{W^0}{2h}$	$-\frac{2}{h^2} \text{tr}(g)$	$\frac{g^{00}}{h^2} - \frac{W^0}{2h}$
$-\frac{g^{01}}{2h^2}$	$\frac{g^{11}}{h^2} - \frac{W^1}{2h}$	$\frac{g^{01}}{2h^2}$

Адаптивность решетки - главное преимущество НС

Сложность адаптации классических методов: $O(P^3)$

Сложность адаптации нейросетевых методов: $O(P * W^2 * L)$



Сравнение методов генерации сеток

Метод	Стабильность	Скорость (1 карта)	Адаптивность	Якобианы
Классика	***	**	*	**
MGNet	*	*	***	***
Предложенная PINN архитектура	**	*	***	***
Метод ограничения весов	**	***	***	***

Дальнейшее развитие

- ▶ Расширение на 3D
- ▶ Увеличение стабильности
- ▶ Вывод формулы для метода ограничения весов нейронных сетей ширины более 2
- ▶ Подход без функции потерь на границе (hard constraint)
- ▶ Генеративные модели (data-driven)