



Rysunek 1: **Panel 1:** Poprawne rozwiązanie PINN problemu adwekcji zdominowanej przez dyfuzję dla $\epsilon = 0.1$. **Panel 2:** Niepoprawne rozwiązanie PINN problemu adwekcji zdominowanej przez dyfuzję dla $\epsilon = 0.01$. **Panel 3:** Poprawne rozwiązanie HPG-PINN problemu adwekcji zdominowanej przez dyfuzję dla $\epsilon = 0.01$. **Panel 4:** Zbieżność procesu uczenia HPG-PINN.

Symulacje komputerowe bazujące na równaniach różniczkowych cząstkowych mają szereg ważnych zastosowań społecznych, ekonomicznych i technicznych. W projekcie koncentrujemy się na klasie równań różniczkowych cząstkowych takich jak równania adwekcji zdominowanej przez dyfuzję, równania Naviera-Stokesa oraz równania Naviera-Stokesa Bussinesqa mających zastosowania w symulacjach zjawisk atmosferycznych. Od kilku lat bardzo szeroko rozwijane są na świecie zastosowania sieci neuronowych do symulacji komputerowych. Sieć neuronową traktować można jako funkcję nieliniową $\mathcal{R}^d \ni x \rightarrow DNN(x) \in \mathcal{R}^l$ będącą złożeniem operatorów liniowych oraz nieliniowych funkcji aktywacji

$$DNN(x) = A_n \sigma(A_{n-1} \sigma(\dots \sigma(A_2 \sigma(A_1 x + B_1) + B_2) \dots B_{n-1}) + B_n = y \quad (1)$$

gdzie A_i to macierze warstw (zazwyczaj rzadkie) B_i to wektory, σ to nieliniowa funkcja np. sigmoid. Taką sieć neuronową można różniczkować względem argumentów wejściowych x z wykorzystaniem narzędzi automatycznego różniczkowania. Sieć neuronowa rozumiana w ten sposób może nauczyć się rozwiązania równań różniczkowych cząstkowych, np. równania adwekcji-zdominowanej przez dyfuzję

$$u'(x) - \epsilon u''(x) = 0 \text{ dla } x \in (0, 1); \quad \epsilon u'(0) - u(0) = 1; \quad u(1) = 0. \quad (2)$$

Możliwe jest to poprzez zdefiniowanie funkcji straty i zastosowaniu bibliotek numerycznych np. pytorch

$$LOSS(x) = (DNN'(x) - \epsilon DNN''(x))^2 + (\epsilon DNN'(0) - DNN(0) - 1)^2 \quad (3)$$

Powstały w ten sposób algorytm, zwany algorytmem Sieci Neuronowej Poinformowanej przez Fizykę (Physics Informed Neural Networks PINN) zaproponowany został w roku 2019 przez prof. George'a Karniadakisa z Brown University. Metody PINN mają szereg zalet, takich jak przystępny koszt obliczeniowy, łatwość przyspieszania z pomocą kart graficznych, są też uniwersalnym aproksymatorem, i pozwalają rozwiązać parametryczne równania różniczkowe "na raz". W przypadku wspomnianej klasy równań różniczkowych metoda PINN posiada jednak szereg wad i ograniczeń, takich jak kosztowny proces uczenia, wynikający z nieuwzględnienia przez rzadkości macierzy warstw sieci neuronowej; oraz problem ze zbieżnością procesu uczenia do poprawnego rozwiązania (patrz rysunek 1).

Celem naszego projektu badawczego będzie opracowanie nowatorskiej metody **HPG-PINN** (hierarchical matrices, Petrov-Galerkin-based neural network) Sieci Neuronowej Poinformowanej przez Fizykę wykorzystującej słabe sformułowania wariacyjne Petrova-Galerkina, oraz przyspieszanie procesu uczenia za pomocą macierzy hierarchicznych. Metoda HPG-PINN może zrewolucjonizować sposób w jaki wykonywane są obliczenia za pomocą sieci neuronowych ponieważ a) dzięki wykorzystaniu macierzy hierarchicznych **umożliwi ona najszybszą możliwą ewaluację sieci neuronowych** w czasie liniowym (wykorzystując fakt iż mnożenie macierzy hierarchicznych przez wektor ma złożoność liniową) co **umożliwi bardzo szybki proces uczenia sieci**; b) dzięki wykorzystaniu funkcji straty bazującej na sformułowaniach słabych metody Petrova-Galerkina, i obliczaniu optymalnych funkcji testujących za pomocą metod spektralnych, **zapewni ona zbieżność procesu uczenia do poprawnego rozwiązania dla trudnych problemów** takich jak problem adwekcji zdominowana przez dyfuzję (patrz rysunek 1). Opracowaną w ramach projektu metodę HPG-PINN wykorzystamy do przeprowadzenia symulacji procesu zmniejszania zanieczyszczenia powietrza przez PM2.5 i PM10 poprzez wykorzystanie generatora fal uderzeniowych. W naszym projekcie planujemy współpracować z prof. Georgem Karniadakisem, twórcą metod PINN, który wyraził zainteresowanie zastosowaniem zbadaniem i zastosowaniem naszego symulatora HPG-PINN do zagadnień kontroli procesów zanieczyszczeń powietrza. Projekt nasz będzie stanowił transfer wiedzy teoretycznej z dziedzin stabilizacji symulacji komputerowych za pomocą metod elementów skończonych w świat sieci neuronowych.