Modulbeschrieb

Physics Based Machine Learning (PBML)

Allgemeine Angaben

Modulbezeichnung

Physics Based Machine Learning

Modulkategorie

Fachliche Vertiefung

Anzahl der Credits

3

Modulverantwortliche/r

Prof. Christoph Würsch, christoph.wuersch@ost.ch

Durchführungssetting

Campus	x Buchs	☐ Rapperswil-Jona	☐ St. Gallen
Online Teilnahme	☐ keine Onlineteilnahme möglich	☐ hybrid	x ausschliesslich online
Durchführung	☐ wöchentlich	☐ als Blockwoche	x nach Absprache (alle 2 Wo)

Ziele, Inhalt und Methoden

Lernziele, zu erwerbende Kompetenzen

Bei der Lösung komplexer multiphysikalischer Probleme sind traditionelle Ansätze, die die numerische Diskretisierung partieller Differentialgleichungen (PDEs) beinhalten, von grundlegender Bedeutung. Herausforderungen wie die Integration verrauschter Daten, die komplexe Netzgenerierung und die Einschränkungen bei der Lösung hochdimensionaler Probleme, die durch parametrisierte PDEs geregelt werden, haben jedoch innovative Lösungen erforderlich gemacht. Darüber hinaus haben der Rechenaufwand und die komplizierte Kodierung, die zur Lösung inverser Probleme mit verborgener Physik erforderlich sind, diese oft unpraktisch gemacht.

Das Modul Physics-Based Machine Learning (PBML) erforscht das Herzstück von PBML und zeigt, wie maschinelles Lernen, insbesondere tiefe neuronale Netze, über traditionelle datenintensive Trainingsparadigmen hinausgehen können. Indem zusätzliche, aus physikalischen Gesetzen abgeleitete Informationen direkt in den Lernprozess einfliessen, ermöglicht PBML die Integration sowohl präziser Daten als auch mathematischer Modelle und bietet so einen robusten Rahmen für die Bewältigung sowohl vorwärtsgerichteter als auch inverser Probleme, die Aufdeckung verborgener physikalischer Zusammenhänge und die Bewältigung hochdimensionaler Probleme. Physics Informed Neural Networks (PINNs integrieren physikalische Prinzipien, oft in Form von partiellen Differentialgleichungen (PDEs), direkt in die Architektur von neuronalen Netzwerken. Die resultierende Netzwerkstruktur nutzt sowohl die zur Verfügung stehenden Daten als auch die eingebetteten physikalischen Gesetze, um Vorhersagen zu treffen und Simulationen durchzuführen. Sie benötigen deutlich weniger Trainingsdaten im Vergleich zu traditionellen datengetriebenen Ansätzen (Dateneffizienz). Die Integration physikalischer Prinzipien ermöglicht es den PINNs auch ausserhalb des unmittelbaren Bereichs der Trainingsdaten zu generalisieren und verlässliche Vorhersagen zu treffen (Generalisierbarkeit, Robustheit), da die physikalischen Gesetze als regulierende Faktoren im Modell dienen. Die Einbeziehung von Differentialgleichungen in den Lernprozess kann sehr rechenintensiv sein, insbesondere bei komplexen oder hochdimensionalen Problemen, was zu erheblichen Herausforderungen bei der Skalierung und Effizienz führen kann

Lernziele: Die Studierenden …

- haben ein Verständnis von *Physical Losses* und *l*ernen, wie physikalisch motivierte Verlustfunktionen in neuronalen Netzwerken implementiert werden können, um die Einhaltung physikalischer Gesetze zu gewährleisten.
- verstehen die Techniken zur Differenzierung durch physikalischer Simulationen, die es ermöglichen, Gradienten von Outputs bezüglich Inputs effizient zu berechnen und können diese auch implementieren (*Diskretisierung* von PDEs/ODEs)
- erfahren, wie differentielle Physik in tiefen neuronalen Netzwerken integriert wird, um komplexe physikalische Systeme zu

modellieren und zu simulieren (Integration von PDEs/ODEs (Differentiable Physics) mit neuronalen Netzwerken).
- verstehen und entwickeln fortgeschrittene Techniken zur Verbesserung der Gradientenberechnung in DNN, um die Konvergenzgeschwindigkeit und Modellgenauigkeit zu erhöhen (Verbesserung von *Gradientenmethoden)*
- erlernen Methoden zur Quantifizierung und Behandlung von Unsicherheiten in physikbasierten maschinellen Lernmodellen, insbesondere bei der Integration von verrauschten Daten (Umgang mit *Unsicherheiten in Physics Based ML)*
- erwerben Kenntnissen im Entwerfen schneller Surrogatmodelle, die komplexe Simulationen ersetzen und beschleunigen, um schnelle Vorhersagen und Analysen zu ermöglichen (Entwicklung *schneller Vorwärtsmodell-Surrogate)*

Modulinhalt

- Introduction
- Physical Losses
- Differentiable Physics
- Differentiable Physics with NN
- Reinforcement Learning
- Improved Gradients
- Physics Based ML and Uncertainty
- Fast Forward Surrogate Models
- Outlook and Summary

Lehr- und Lernmethoden

- Online Vorlesung
- Übungsaufgaben
- Problem Based Learning
- Projektarbeit

Voraussetzungen, Vorkenntnisse, Eingangskompetenzen

- MSE Studierende aus dem Bereich Data Science, Computer Engineering
- Vorlesung in Machine Learning (z.B. MSE FTP_MachLe) und Deep Learning (MSE TSM_DeLe)
- Programmierkenntnisse in Python, Pytorch, keras
- Mehrdimensionale Analysis (Gradient, Divergenz, Rotation)

Bibliografie

Ressourcen:

1. Deep Learning for Physics Research: https://github.com/DeepLearningForPhysicsResearchBook/deep-learning-physics
2. Physics Based Deep Learning: https://physicsbaseddeeplearning.org/intro.html
3. ADCMe: https://kailaix.github.io/ADCME.jl/latest
4. DeepXDe: https://deepxde.readthedocs.io/
5. GPyTorch: https://gpytorch.ai/
6. NeuroDiffeq: https://github.com/NeuroDiffGym/neurodiffeq
7. NeuralPDe: https://neuralpde.sciml.ai/dev/
8. Neural Tangents: https://github.com/google/neural- tangents
9. PyDens: https://github.com/analysiscenter/pydens
10. PyTorch: https://pytorch.org
11. sciANN: https://www.sciann.com/
12. simNet: https://developer.nvidia.com/simnet
13. TensorFlow: www.tensorflow.org

Bibliographie:

[1.] Raissi, M., Perdikaris, P. & Karniadakis, G. E. Physics- informed neural networks: a deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. J. Comput. Phys. 378, 686–707 (2019).

[2.] Wang, S., Yu, X. & Perdikaris, P. When and why PINNs fail to train: a neural tangent kernel perspective. Preprint at arXiv https://arxiv.org/abs/2007.14527 (2020).

[3.] Wang, S., Wang, H. & Perdikaris, P. On the eigenvector bias of Fourier feature networks: from regression to solving multi- scale PDEs with physics- informed neural networks. Preprint at arXiv https://arxiv.org/abs/2012.10047 (2020).

[4.] Yang, L., Meng, X. & Karniadakis, G. E. B- PINNs: Bayesian physics- informed neural networks for forward and inverse PDE problems with noisy data. J. Comput. Phys. 415, 109913 (2021).

[5.] Lanthaler, S., Mishra, S. & Karniadakis, G. E. Error estimates for DeepONets: a deep learning framework in infinite dimensions. Preprint at arXiv https://arxiv.org/abs/2102.09618 (2021).

[6.] Deng, B., Shin, Y., Lu, L., Zhang, Z. & Karniadakis, G. E. Convergence rate of DeepONets for learning operators arising from advection–diffusion equations. Preprint at arXiv https://arxiv.org/abs/2102.10621 (2021).

[7.] Kharazmi, E., Zhang, Z. & Karniadakis, G. Variational physics- informed neural networks for solving partial differential equations. Preprint at arXiv https://arxiv.org/abs/1912.00873 (2019).

[8.] Brunton, S. L., Proctor, J. L. & Kutz, J. N. Discovering governing equations from data by sparse identification of nonlinear dynamical systems. Proc. Natl Acad. Sci. USA 113, 3932–3937 (2016).

[9.] Lusch, B., Kutz, J. N. & Brunton, S. L. Deep learning for universal linear embeddings of nonlinear dynamics. Nat. Commun. 9, 4950 (2018).

[10.] Li, Z. et al. Fourier neural operator for parametric partial differential equations. in Int. Conf. Learn. Represent. (2021).

[11.] Zhu, Y., Zabaras, N., Koutsourelakis, P. S. & Perdikaris, P. Physics- constrained deep learning for high- dimensional surrogate modeling and uncertainty quantification without labeled data. J. Comput. Phys. 394, 56–81 (2019).

[12.] Geneva, N. & Zabaras, N. Modeling the dynamics of PDE systems with physics- constrained deep auto- regressive networks. J. Comput. Phys. 403, 109056 (2020).

[13.] Long, Z., Lu, Y., Ma, X. & Dong, B. PDE- Net: learning PDEs from data. Proc. Int. Conf. Mach. Learn. 80, 3208–3216 (2018).

[14.] He, J. & Xu, J. MgNet: a unified framework of multigrid and convolutional neural network. Sci. China Math. 62, 1331–1354 (2019).

Leistungsbewertung

Prüfungsart

Prüfungsgespräch: 30%

Projektarbeit: 70%

Zulassungsbedingungen

MSE Studierende aus dem Bereich Data Science, Computer Engineering, Maschinenbau

Prüfungsdauer

20 min.

Hilfsmittel

- PC für Demonstration des Projektes
- Keine Hilfsmittel während des Prüfungsgesprächs