



سرمقاله

یادگیری ماشینی فیزیک محور چیست و چرا اهمیت دارد؟

در دهه های اخیر، یادگیری ماشینی^۱ به یکی از ابزارهای قدرتمند برای تحلیل داده ها و ساخت مدل های پیش بینی در علوم مختلف تبدیل شده است. با این حال، زمانی که صحبت از مدل سازی سامانه های فیزیکی پیچیده مانند دینامیک سیالات، رفتار مواد، فیزیک ذرات، یا سامانه های مولکولی به میان می آید، یادگیری ماشینی سنتی با چالش هایی جدی مواجه می شود. در اینجا، مفهوم یادگیری ماشینی فیزیک محور^۲ وارد صحنه می شود.

یادگیری ماشینی فیزیک محور روشی است که در آن، دانش قبلی ما از قوانین فیزیکی - مانند معادلات دیفرانسیل، اصول پایستگی، تقارن ها و شرایط مرزی - در فرایند آموزش مدل های یادگیری ماشینی گنجانده می شود. این رویکرد به ما اجازه می دهد که مدل هایی دقیق تر، قابل اعتمادتر و کارآمدتر بسازیم؛ به ویژه در شرایطی که داده های موجود محدود، پراکنده یا تهیه آنها پرهزینه باشند.

در مدل سازی های کلاسیک، صرفاً به داده ها تکیه می کنیم (مدل های داده محور)، یا تنها از معادلات فیزیکی استفاده می کنیم (مدل های تحلیلی یا عددی). اما یادگیری ماشینی فیزیک محور تلاش می کند پلی میان این دو رویکرد ایجاد کند: ترکیب قدرت تعمیم یادگیری ماشین با قوانین فیزیک.

برای مثال، اگر سامانه ای مانند آونگ را در نظر بگیریم، یادگیری ماشین می تواند صرفاً از داده های حرکتی آونگ، الگوی حرکت

را یاد بگیرد. اما اگر معادله حرکت آونگ (مثلاً معادله لاگرانژ یا معادله دیفرانسیل مرتبه دوم) را نیز وارد مدل کنیم، می توانیم با داده های بسیار کمتر، مدل دقیق تری بسازیم. این مدل نه تنها بازسازی دقیقی از رفتار سامانه دارد، بلکه به اصول فیزیکی نیز پایبند است و نسبت به مدل یادگیری ماشینی سنتی که داده های ورودی را بازسازی می کند، توانایی پیش بینی بیشتری از رفتار سامانه دارد.

اجازه دهید دقیق تر به این پرسش جواب دهیم که منظور از یادگیری ماشینی فیزیک محور چیست؟ یک آونگ را که به راست و چپ حرکت می کند، در نظر می گیریم. می توان یک شتاب سنج کوچک و یک LED روی نوک آن قرار داد، بنابراین می توانیم از آن فیلم بگیریم. در یادگیری ماشینی سنتی، ممکن است ویدئوی این آونگ به کار برده شود و از یک شبکه عصبی خودکدگذار^۳ برای کاهش ابعاد این ویدئو به یک حالت نهفته^۴ کم بعد استفاده شود. این حالت کم بعد به شما امکان می دهد ویدئو را از همان متغیرهای محدود بازسازی کنید.

لازم به توضیح است که خودکدگذار یک مدل شبکه عصبی است که به صورت غیرنظارتی^۵ آموزش داده می شود و هدف اصلی آن، کاهش ابعاد داده ها و یا یادگیری نمایش فشرده و مفید از داده های ورودی است. ساختار خودکدگذار معمولاً از

۱. Machine Learning

۲. Physics-Informed Machine Learning

۳. Autoencoder

۴. Latent state

۵. Unsupervised

دو بخش اصلی تشکیل شده، کدگذار^۱ این بخش ورودی را می‌گیرد و آن را به یک فضای با بعد کمتر تبدیل می‌کند (یعنی یک نمایش فشرده‌تر از داده اصلی)، کدگشای^۲ این بخش تلاش می‌کند از نمایش فشرده تولید شده، داده اصلی را دوباره بازسازی کند.

حال به مسئله آونگ ساده برگردیم. می‌دانیم که این یک سامانه کم‌بعد است و احتمالاً با متغیرهایی مانند زاویه θ و سرعت زاویه‌ای توصیف می‌شود. یادگیری ماشینی ساده ممکن است فقط سعی کند مختصاتی را پیدا کند که بتوان داده‌ها را به آن فشرده کرد و سپس دوباره به ویدئوی کامل بازگرداند. اما یادگیری ماشینی فیزیک‌محور کمی پیچیده‌تر عمل می‌کند: ما نه تنها می‌خواهیم مختصاتی برای فشرده‌سازی ویدئو یاد بگیریم، بلکه می‌خواهیم یک معادله دیفرانسیل برای تحول این مختصات در زمان نیز فرا بگیریم، چیزی شبیه به معادله آونگ میرا.

این معادله را می‌توان به دو روش در نظر گرفت: اگر از قبل معادله را می‌دانستیم، می‌توانستیم آن را در حالت نهفته^۳ بگنجانیم تا مختصات بهتری یاد بگیریم. یا می‌توانستیم سعی کنیم این معادله دیفرانسیل را فقط از داده‌های اندازه‌گیری شده استخراج کنیم.

در این مثال، دو جزء کلیدی وجود دارد: اولاً، باید یک سامانه مختصاتی خوب مانند θ پیدا کنیم که حرکت آونگ را به خوبی توصیف کند. توجه کنید θ بهتر از مختصات x و y نوک آونگ است. ثانیاً، باید معادلات حرکت را یاد بگیریم؛ یعنی یک معادله دیفرانسیل که تحول سامانه در زمان را توصیف کند. این همان چیزی است که معمولاً از یادگیری ماشینی فیزیک‌محور انتظار داریم: یادگیری مختصات مناسب و قوانین فیزیکی حاکم (که

اغلب معادلات دیفرانسیل هستند). این قوانین را می‌توان یا از داده‌ها یاد گرفت یا از قبل در مدل یادگیری ماشینی گنجاند. حالا می‌خواهیم کمی کلی‌تر بحث کنیم و مراحل پنج‌گانه ساخت یک مدل یادگیری ماشینی کلاسیک را بررسی کنیم. این پنج مرحله عبارتند از: ۱) تعریف مسئله: تصمیم می‌گیریم چه چیزی را مدل کنیم (ورودی‌ها و خروجی‌ها چه هستند؟). ۲) جمع‌آوری و تنظیم داده‌ها: داده‌های آموزشی را جمع‌آوری می‌کنیم. ۳) طراحی معماری: یک معماری مناسب (مثلاً یک شبکه عصبی خاص) انتخاب می‌کنیم. ۴) تعریف تابع هزینه: معیاری برای سنجش عملکرد مدل طراحی می‌کنیم. ۵) بهینه‌سازی: پارامترهای مدل را تنظیم می‌کنیم تا تابع هزینه کمینه شود.

در هر یک از این مراحل، می‌توانیم فیزیک را به فرایند یادگیری ماشینی اضافه کنیم. مثلاً: در مرحله ۱، اگر سامانه فیزیکی مانند آونگ را مدل می‌کنیم، خود مسئله فیزیک‌محور است. در مرحله ۲، اگر داده‌ها از یک سامانه فیزیکی گرفته شده باشند، فیزیک در داده‌ها نهفته است. در مرحله ۳، می‌توانیم معماری‌هایی مانند شبکه‌های عصبی لاگرانژی^۴ را انتخاب کنیم که قوانین پایستگی انرژی را رعایت می‌کنند. در مرحله ۴، می‌توانیم تابع هزینه را طوری طراحی کنیم که معادلات فیزیکی (مثلاً معادلات ناویر-استوکس) را به عنوان یک جمله تنظیم‌کننده^۵ شامل شود. برای این کار قوانین فیزیکی با مضارب لاگرانژی به تابع هزینه اضافه می‌شوند. در مرحله ۵، می‌توانیم از روش‌های بهینه‌سازی استفاده کنیم که محدودیت‌های فیزیکی را دقیقاً رعایت کنند.

یکی از مفاهیم کلیدی در اینجا تقارن‌ها^۶ است. بسیاری از سامانه‌های فیزیکی تقارن‌هایی مانند انتقالی^۷ یا چرخشی^۸ دارند.

۱. Encoder

۲. Decoder

۳. Latent state

۴. Lagrangian Neural Networks

۵. Regularizer

۶. Symmetries

۷. Translational

۸. Rotational

یاد می‌گیرد، تأثیر می‌گذارد. مثال دیگر: اگر داده‌های جریان سیال ژئوفیزیکی داشته باشیم (مثلاً تشکیل ابر در اطراف یک سد)، یکی از کارهایی که می‌توانیم در فرایند گردآوری داده انجام دهیم این است که اگر فکر می‌کنیم فیزیک سامانه به چرخش یا انتقال وابسته نیست (یعنی تحت تقارن‌هایی مانند انتقال یا چرخش ناوردا است)، می‌توانیم داده‌ها را با نمونه‌های چرخش‌یافته یا انتقال‌یافته تکمیل کنیم.

این یک روش بسیار رایج است. اگر سامانه مورد بررسی نوعی تقارن یا ناوردایی دارد (که خود شکلی از فیزیک است)، می‌توانید داده‌ها را به گونه‌ای تغییر دهید که این تقارن‌ها را شامل شود. مثلاً اگر یک طبقه‌بند می‌سازیم که باید بتواند تصویر یک سگ را از تصویر یک گربه تشخیص دهد، می‌توانیم تصاویر را بچرخانیم، جابه‌جا کنیم یا مقیاس‌دهی کنیم، چون این تغییرات نباید روی نتیجه طبقه‌بندی تأثیر بگذارند. بنابراین می‌توانیم داده‌ها را به گونه‌ای تکمیل کنیم که این ناوردایی‌ها را شامل شود.

نکته دیگری که زیاد با آن روبرو خواهیم شد این است که مختصات معمولاً در یادگیری ماشینی سامانه‌های فیزیکی اهمیت زیادی دارند. مثال‌های متفاوتی در فیزیک، به خصوص در مکانیک و الکترومغناطیس وجود دارد که برتری یک دستگاه مختصات را به دستگاه مختصات دیگر نشان می‌دهد. برای نمونه، دو سامانه مختصات مختلف برای سیارات و خورشید و زمین را در نظر بگیرید. یکی از سامانه‌ها دید زمین مرکزی است که از دیدگاه ما روی زمین به نظر می‌رسد. یادگیری فیزیک و مدل‌سازی در این سامانه مختصات بسیار سخت و پیچیده است، در حالی که اگر سامانه مختصات را طوری تنظیم کنیم که خورشید در مرکز باشد، داده‌ها مفهوم بیشتری پیدا می‌کنند و مدل‌سازی بسیار آسان‌تر می‌شود. بنابراین، بخشی از گردآوری داده‌ها به معنای یافتن سامانه مختصات درست و مناسب است. گاهی این سامانه مختصات را از داده‌ها یاد می‌گیریم و گاهی با

اگر این تقارن‌ها را در مدل خود بگنجانیم، عملکرد مدل بهبود می‌یابد.

یادگیری ماشینی فیزیک‌محور کاربردهایی وسیعی در علوم و مهندسی، مانند مدل‌سازی جریان سیالات، بهینه‌سازی شکل آیرودینامیکی، و طراحی مواد پیشرفته دارد. همچنین، سامانه‌های معیار^۱ و معماری‌های مختلف مانند شبکه‌های عصبی باقیمانده^۲، شبکه‌های عصبی فوری^۳، و مدل‌های پارسیمونی^۴ مانند ارائه شده‌اند.

هدف نهایی این است که از حالت آزمون و خطای بی‌نظم به سمت یک روش سیستماتیک و مبتنی بر اصول فیزیکی حرکت کنیم.

گردآوری داده‌های فیزیک‌محور

چه داده‌هایی را باید استفاده کنیم؟ اگر داده‌ها از یک سامانه فیزیکی گرفته شده باشند، ذاتاً فیزیک را در فرایند جمع‌آوری داده‌ها جاسازی کرده‌ایم. مرحله دوم، روش جامع برای گنجاندن فیزیک در مدل است. ایده این است که اگر داده‌های کافی از جهان طبیعی جمع‌آوری کنید، مدل ناچار است فیزیک را یاد بگیرد، مثلاً $F=ma$ یا حتی $E=mc^2$ ، تا بتواند همه آن داده‌های جمع‌آوری شده را با هم تطبیق دهد. اما دلیل این که روش فوق را شبیه به رویکرد جامع می‌نامند این است که بسیار پرهزینه است و به حجم تقریباً نامحدودی از داده نیاز دارد. دانشمندان و مهندسان، اغلب چنین امکانی ندارند و معمولاً با مجموعه داده محدود و هدفمند کار می‌کنند که باید از آنها برای یادگیری فیزیکی استفاده کنند و به صورت گسترده‌تری قابل تعمیم باشند.

مثلاً، آیا می‌خواهیم از میدان‌های جریان سیال به عنوان داده آموزشی استفاده کنیم؟ آیا این داده‌ها را در سرعت‌های مختلف جریان جمع‌آوری کرده‌ایم؟ اگر مدل فقط یک سرعت جریان را داشته باشد، با مدلی که محدوده‌ای از سرعت‌ها را پوشش می‌دهد، بسیار متفاوت خواهد بود و این بر نوع فیزیکی که مدل

۱. Benchmark

۲. ResNets.

۳. Fourier Neural Operators

۴. Parsimonious

سفارشی هستند که می‌توانیم برای القای انواع خاصی از فیزیک در سامانه خود استفاده کنیم.

توابع هزینه فیزیک‌محور

حوزه تحقیقاتی بسیار غنی دیگر این است که چگونه توابع هزینه‌ای بسازیم که مدل‌هایی با ویژگی‌های فیزیکی خاص را توصیف کنند. همانطور که قبلاً در مورد مدل پارسیمون صحبت شد، این ویژگی‌ها معمولاً با عباراتی مانند نرم L_1 یا نرم L_0 در تابع هزینه کمی می‌شوند.

معروف‌ترین مثال این روش، شبکه‌های عصبی فیزیک‌محور است. در اینجا یک شبکه عصبی استاندارد داریم که ورودی‌هایی مانند فضا و زمان را به خروجی‌هایی مانند میدان جریان سیال نگاشت می‌کند. روش معمول این است که یک تابع هزینه داشته باشیم که میانگین دقت مدل را روی داده‌های آموزشی اندازه می‌گیرد. اما چیزی که شبکه‌های عصبی فیزیک‌محور انجام می‌دهند این است که از داده‌های خروجی می‌توانیم عباراتی در معادله دیفرانسیل جزئی خود محاسبه کنیم و فیزیک واقعی (معادله دیفرانسیل جزئی که سامانه باید از آن تبعیت کند) را به عنوان یک جمله تنظیم‌کننده دیگر به تابع هزینه اضافه کنیم. اگر فیزیک سامانه را می‌دانیم - مثلاً می‌دانیم که سامانه بدون واگرایی است یا از معادلات ناویر-استوکس پیروی می‌کند - می‌توانیم این معادلات را به عنوان جمله‌ای تنظیم‌کننده به فرایند یادگیری ماشین اضافه کنیم. این کار می‌تواند عملکرد یادگیری را به طور چشمگیری بهبود بخشد. اگر فیزیک را در تابع هزینه بگنجانیم، می‌توانیم با داده‌های بسیار کمتر، عملکرد مدل بسیار بهتری داشته باشیم.

الگوریتم‌های بهینه‌سازی فیزیک‌محور

آخرین مرحله، که اگرچه به اندازه مراحل سوم و چهارم رایج نیست اما بسیار مهم است، استفاده از بهینه‌سازی برای اعمال فیزیک است. اگر فیزیک را به عنوان یک جمله به تابع هزینه اضافه کنیم، در واقع این پیشنهاد را داده‌ایم که می‌خواهیم فیزیک رعایت شود، اما همیشه بین کمینه کردن مدل و رعایت فیزیک یک رقابت وجود دارد.

اضافه کردن فیزیک به تابع هزینه فقط آن را دقیق‌تر توصیف می‌کند، اما تضمین نمی‌کند که فیزیک واقعاً رعایت شود. با

استفاده از دانش قبلی از فیزیک، آن را اعمال می‌کنیم. این انتخاب تأثیر بسیار زیادی در فرایند یادگیری دارد.

طراحی معماری فیزیک‌محور

مرحله سوم: طراحی معماری است. در نگاه کلی، می‌توانیم به شبکه‌های عصبی لاگرانژی اشاره کنیم. اگر سامانه شما چارچوب معادلات اوایلر-لاگرانژ دارد (مثلاً در یک سامانه مکانیکی مانند آونگ دوگانه)، ممکن است از یک معماری خاص مانند شبکه عصبی لاگرانژ استفاده کنید تا سامانه شما انرژی را حفظ کند. نکته مهم این است که تقریباً تمام این معماری‌ها به مجموعه‌ای از توابع هزینه سفارشی نیز نیاز دارند که برای آموزش آنها ضروری است.

یکی دیگر از مفاهیم فیزیکی که در مدل‌های ما وجود دارد، اصل پارسیمونی (ساده‌گرایی) است. علاقمندیم مدل‌هایمان تا حد امکان ساده باشند، اما نه ساده‌تر از آنچه باید باشند. به طور مثال، وقتی از یک خودرمزگذار برای یادگیری یک سامانه مختصات خوب استفاده می‌کنیم و سپس ساده‌ترین و راحت‌ترین مدل را در کلاس مدل‌هایی که داده را توصیف می‌کنند، به دست می‌آوریم. این اصل پارسیمونی که از زمان ارسطو تا اینشتین با ما بوده، یکی از معیارهای ما برای تشخیص فیزیکی بودن یک سامانه است - یعنی در سادگی آن و توانایی‌اش در توصیف داده‌های اندازه‌گیری شده. این نوع دیگری از معماری است.

یکی دیگر از معماری‌های مورد علاقه که از اولین معماری‌ها در دوران مدرن یادگیری ماشین فیزیک‌محور است، استفاده از شبکه‌های عصبی برای پیش‌بینی و ساخت مدل‌های بستار برای جریان‌های آشفته سیال است. این معماری با یک شبکه عصبی عمیق استاندارد متفاوت است. یک لایه ورودی تانسوری کمکی به شبکه اضافه می‌کنیم تا امکان ناوردایی نسبت به تبدیلات گالیله را بدهد. از آنجا که می‌دانیم این جریان‌های سیال باید تحت چرخش‌ها و انتقالات خاصی یکسان باقی بمانند، با انتخاب این معماری، شبکه عصبی اخیر مجبور به رعایت این ناوردایی است و عملکرد مدل به طور چشمگیری بهبود می‌یابد. اینها فقط نمونه‌هایی از صدها نوع معماری

بهینه‌سازی می‌توانیم محدودیت‌هایی اعمال کنیم که فیزیک با دقت بسیار بالاتری رعایت شود. مثلاً در مدل‌سازی جریان سیال با یادگیری ماشین، می‌دانیم که در جریان‌های تراکم‌ناپذیر، انرژی پایسته می‌ماند. بنابراین می‌توانیم یک تابع هزینه بسازیم که هم خطای مدل و هم محدودیت‌های لازم برای پایستگی انرژی را شامل شود. یا به جای قرار دادن این محدودیت‌ها در تابع هزینه، می‌توانیم از روش‌هایی مانند مربعات کمینه محدود شده یا مضارب لاگرانژ استفاده کنیم تا این محدودیت‌ها همواره با دقت عددی دقیقاً برآورده شوند. این روش‌ها قدرتمند هستند اما پیاده‌سازی آنها نیازمند دقت و کار برنامه نویسی بیشتری است. روش‌هایی مانند DMD فیزیک‌محور وجود دارند که در آنها جواب را به گونه‌ای محدود می‌کنیم که روی یک خمینه خاص از جواب‌هایی که آن تقارن را ارضا می‌کنند قرار گیرد. اینها پنج مرحله‌ای بودند که فرصت‌های واضحی برای گنجاندن فیزیک در فرایند یادگیری ماشین ارائه می‌کنند.

کاربردهای یادگیری ماشینی فیزیک‌محور بسیار گسترده است: از تحلیل میدان‌های جریان در هوافضا، تا طراحی مواد نو با خواص مکانیکی و شیمیایی خاص، از پیش‌بینی آب‌وهوا تا

مدل‌سازی رفتار سلول‌های زنده حتی در فیزیک نظری، مانند یادگیری ساختار لاگرانژی یا معادلات حرکت از داده‌های تجربی.

در نهایت، شاید بتوان گفت که یادگیری ماشینی فیزیک‌محور تلاشی است برای بازگشت به رویکرد علمی یکپارچه: جایی که داده، نظریه، و محاسبه در کنار یکدیگر قرار می‌گیرند. آینده علم، بدون شک به ابزارهایی نیاز دارد که هم از قدرت داده بهره ببرند و هم به ساختارهای بنیادی طبیعت وفادار بمانند. یادگیری ماشینی فیزیک‌محور دقیقاً در همین راستا حرکت می‌کند و در حال باز کردن مسیرهای تازه‌ای است.

برای اطلاعات بیشتر در این زمینه می‌توانید به کتاب

Data-Driven Science and Engineering by Steven L. Brunton and J. Nathan Kutz
مراجعه کنید.

رضا عسگری

سردبیر

۲ خرداد ۱۴۰۳