

РАЗРАБОТКА БЭНЧМАРКА ДЛЯ ЗАДАЧИ ПОИСКА МОДЕЛЕЙ В ВИДЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ПО ДАННЫМ

Борисенко В. И.¹

Научный руководитель – канд. ф.-м. наук, доцент Хватов А. А.¹

¹Университет ИТМО

borisenko_vi@niuitmo.ru

Введение

Выявление дифференциальных уравнений в частных производных на основе наблюдаемых физических данных является одной из ключевых задач научного машинного обучения [6]. В отличие от классической регрессии [5], здесь требуется восстановить неявную модель в виде дифференциального уравнения. Существует множество различных подходов: символьная регрессия, генетические алгоритмы, нейронные сети, обучение с подкреплением, и множество инструментов, использующих эти подходы, такие как: PySINDY [2], DeepMoD [1], DISCOVER [3], EPDE [4]. Однако при всём разнообразии методов до сих пор отсутствует системный и унифицированный подход к их сравнению.

Основная часть

В связи с этим целью нашей работы является разработка бенчмарка для алгоритмов поиска моделей в виде дифференциальных уравнений по данным и проведение сравнительного анализа современных инструментов: EPDE, PySINDY, DeepMoD, DISCOVER, каждый из которых представляет уникальный метод для решения поставленной задачи.

Для реализации нашей цели был сформирован набор синтетических датасетов, построенных на основе известных дифференциальных уравнений. В бенчмарк включены наборы данных различной природы и сложности, построенные на основе обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений с частными производными, с разными степенями производных и количеством слагаемых.

В настоящий момент мы разрабатываем универсальный комплекс метрик для сравнения разных алгоритмов, который будет включать в себя: проверку структуры уравнения, нормализованную ошибку коэффициентов, устойчивость к шуму.

Выводы

Предложенный бенчмарк станет инструментом систематической оценки алгоритмов поиска дифференциальных уравнений и будет способствовать развитию более устойчивых и интерпретируемых методов восстановления физических законов по данным.

Литература

1. Both, G.-J., Choudhury, S., Sens, P., Kusters, R., DeepMoD: Deep learning for model discovery in noisy data. *Journal of Computational Physics*. - Volume 428. – 2021. – 109985. - <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2020.109985> (Дата обращения 16.02.2025).
2. de Silva, B., Champion, K., Quade, M., Loiseau, J.-C., Kutz, J., Brunton, S. PySINDy: A Python package for the sparse identification of nonlinear dynamical systems from data. *Journal of Open Source Software*. – 2020. - 5 5(49). - 2104. – <https://doi.org/10.21105/joss.02104> (Дата обращения 16.02.2025).
3. Du, M., Chen, Y., Zhang, D. Discover: Deep identification of symbolically concise open-form partial differential equations via enhanced reinforcement learning, *Physical Review Research*. – 2024. – 6(1). – 013182. - <https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.6.013182> (Дата обращения 16.02.2025).

4. Ivanchik, E., Hvatov, A. Knowledge-aware differential equation discovery with automated background knowledge extraction. Information Sciences. – 2025. -712. - 122131. - <https://doi.org/10.1016/j.ins.2025.122131> (Дата обращения 15.02.2025).
5. Jaber, A.M., Mami, A., Rashedi, K., Mohammed, H. A Comparative Simulation Study of Classical and Bayesian Regression Models for Complex Non-Linear Data Generation Processes. - 2025. - Volume 3. - Issue 4. - 85-93. - <https://aajsr.com/index.php/aajsr/article/view/646> (Дата обращения 16.02.2025).
6. Rudy, S. H., S. L. Brunton, J. L. Proctor, et al. Data-driven discovery of partial differential equations. Science advances. - 2017. - 3(4). - e1602614. <https://doi.org/10.1126/sciadv.1602614> (Дата обращения 15.02.2025).

Автор _____ Борисенко В. И.

Научный руководитель _____ Хватов А. А.