

ỨNG DỤNG MẠNG NƠ-RON TÍCH HỢP VẬT LÝ TRONG GIẢI VÀ MÔ PHỎNG CÁC BÀI TOÁN VẬT LÝ MỘT CHIỀU VÀ HAI CHIỀU

Trần Hỷ Phúc, Nguyễn Vũ Thụ Nhân, Nguyễn Minh Hải*

Khoa Vật Lý, Trường Đại học Sư Phạm Thành phố Hồ Chí Minh
 tranhyphuc@gmail.com, nhannvt@hcmue.edu.vn, hainm@hcmue.edu.vn

TÓM TẮT— Mạng nơ-ron tích hợp vật lý là một phương pháp kết hợp giữa dữ liệu quan sát với các quy luật vật lý dưới dạng phương trình vi phân nhằm mô hình hóa và mô phỏng các hệ vật lý một cách hiệu quả. Khác với các phương pháp học sâu thuần dữ liệu, phương pháp này tích hợp trực tiếp các ràng buộc vật lý vào hàm mất mát, qua đó giảm sự phụ thuộc vào lượng dữ liệu huấn luyện lớn và cải thiện khả năng tổng quát hóa của mô hình. Trong nghiên cứu này, chúng tôi khảo sát khả năng áp dụng mạng nơ-ron tích hợp vật lý và mô hình phương trình vi phân lai để giải hai bài toán vật lý điển hình là chuyển động của vật có yếu tố lực cản và dao động của hệ lò xo với thành phần giảm chấn chưa xác định. Kết quả thực nghiệm cho thấy mô hình đề xuất có khả năng tái tạo quỹ đạo chuyển động với độ chính xác cao ngay cả khi dữ liệu huấn luyện hạn chế và có độ nhiễu. Nghiên cứu này cung cấp thêm bằng chứng thực nghiệm về khả năng áp dụng mạng nơ-ron tích hợp vật lý trong việc mô hình hóa các hệ vật lý, đồng thời gợi mở tiềm năng mở rộng phương pháp cho nhiều lớp bài toán khác.

Từ khóa— mạng nơ-ron tích hợp vật lý, phương pháp học sâu, học máy, mô phỏng vật lý.

I. GIỚI THIỆU

Trong thập kỷ vừa qua, sự phát triển của các phương pháp học sâu đã tạo nên cuộc cách mạng trong nhiều lĩnh vực khoa học và kỹ thuật, mang lại những bước tiến vượt bậc trong các ứng dụng như thị giác máy tính, xử lý ngôn ngữ tự nhiên, chẩn đoán y học và hệ thống tự hành [1], [2], [3], [4], [5]. Nhờ sự tiến bộ vượt bậc trong công nghệ tính toán, mạng nơ-ron học sâu cũng ngày càng được ứng dụng rộng rãi và hiệu quả trong mô phỏng, mô hình hóa các hệ thống phức tạp như dự báo thời tiết [6] và dự đoán cấu trúc protein [7]. Tuy nhiên, việc áp dụng mạng nơ-ron vào các bài toán vật lý - thường được mô tả dưới dạng các phương trình vi phân và các công thức toán học liên quan vẫn còn tồn tại một số thách thức, bao gồm nhu cầu về lượng dữ liệu lớn, hạn chế trong khả năng diễn giải và thiếu tính tuân thủ các định luật vật lý đã biết. Do đó, khi dữ liệu khan hiếm, bị nhiễu hoặc có quy mô nhỏ thì hiệu suất của mô hình sẽ suy giảm đáng kể. Ngoài ra, khả năng ngoại suy của các mô hình học sâu thuần dữ liệu trong một số bài toán vật lý vẫn còn là vấn đề cần được xem xét, đặc biệt khi mô hình được áp dụng cho các trạng thái nằm ngoài miền dữ liệu huấn luyện. Do quá trình huấn luyện chủ yếu dựa trên việc giảm sai số giữa giá trị dự đoán và dữ liệu quan sát, các nghiệm thu được đôi khi có thể chưa phản ánh đầy đủ các ràng buộc vật lý của hệ, dẫn đến những nghiệm thiếu tính nhất quán vật lý, hay thường được gọi là các nghiệm “phi vật lý”. Để khắc phục những hạn chế này, một phương pháp tiếp cận mới đang được quan tâm rộng rãi là mạng nơ-ron tích hợp vật lý, được Raissi và cộng sự giới thiệu vào năm 2017 trong chuỗi bài báo gồm hai phần [8], [9] và sau đó được công bố thành một phiên bản hoàn chỉnh vào năm 2019 [10]. Phương pháp này cho thấy mạng nơ-ron không chỉ có khả năng nội suy dữ liệu rời rạc mà còn có thể được huấn luyện để đồng thời thỏa mãn các quy luật vật lý thông qua việc giảm sai số các phương trình vi phân chi phối hệ. Cách tiếp cận này thể hiện sự kết hợp giữa học máy và cơ sở vật lý, trong đó các ràng buộc vật lý được tích hợp trực tiếp vào hàm mất mát. Nhờ đó, phương pháp có thể giúp giảm mức độ phụ thuộc vào lượng dữ liệu huấn luyện lớn vốn khó thu thập hoặc tốn kém về thời gian và chi phí, đồng thời nâng cao khả năng tổng quát hóa và độ tin cậy của mô hình.

Trong nghiên cứu này, chúng tôi khảo sát khả năng áp dụng mạng nơ-ron tích hợp vật lý trong việc kết hợp dữ liệu quan sát với các ràng buộc vật lý để mô hình hóa các hệ động lực học. Cụ thể, bài báo tập trung vào hai bài toán vật lý điển hình. Thứ nhất, mạng nơ-ron tích hợp vật lý được áp dụng để mô phỏng chuyển động của vật có lực cản, qua đó đánh giá khả năng tái tạo quỹ đạo chuyển động trong điều kiện dữ liệu huấn luyện hạn chế và có nhiễu. Thứ hai, bài báo xem xét bài toán dao động của hệ lò xo với thành phần giảm chấn chưa được mô tả tường minh, trong đó thành phần động lực học chưa biết được xấp xỉ bằng mạng nơ-ron thông qua mô hình phương trình vi phân lai. Thông qua các thực nghiệm, nghiên cứu làm rõ vai trò của việc tích hợp ràng buộc vật lý trong việc cải thiện độ ổn định của nghiệm và khả năng tổng quát hóa của mô hình so với các phương pháp học máy thuần dữ liệu. Bố cục của bài báo bao gồm: Phần I giới thiệu tổng quan bài báo; Phần II trình bày phương pháp nghiên cứu; Phần III mô tả chi tiết hai bài toán thực nghiệm, bao gồm bài toán chuyển động có yếu tố lực cản và bài toán dao động của hệ lò xo với thành phần lực cản chưa biết; Phần IV trình bày và thảo luận các kết quả dự đoán thu được từ mô hình đối với từng bài toán. Cuối cùng, Phần V đưa ra các kết luận chính và định hướng nghiên cứu trong tương lai.

II. PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

Mạng nơ-ron tích hợp vật lý được dùng để giải các hệ phương trình vi phân mô tả hiện tượng vật lý có thể viết dưới dạng tổng quát:

$$\mathcal{N}[u(t, x); \lambda] = 0, x \in \mathbb{R}^D, t \in \mathbb{R} \quad (1)$$

trong đó $\mathcal{N}[u(t, x); \lambda]$ là toán tử vi phân mô tả hệ vật lý, $u(t, x)$ là nghiệm (ẩn) của hệ, biểu diễn đại lượng vật lý phụ thuộc vào thời gian t và vị trí không gian x , λ là các tham số đặc trưng của hệ [10]. Nhiều hiện tượng vật lý khác nhau có thể được mô tả dưới dạng tổng quát này, bao gồm các định luật bảo toàn, phương trình chuyển động, cũng như nhiều dạng phương trình vật lý khác. Ý tưởng của mạng nơ-ron tích hợp vật lý là sử dụng một mạng nơ-ron $\hat{u}_\theta(t, x)$ được tham số hóa bởi các trọng số θ để xấp xỉ nghiệm $u(t, x)$ của hệ vật lý và dùng phương trình (1) như một ràng buộc trong quá trình huấn luyện. Việc huấn luyện được thực hiện bằng cách tối thiểu hóa hàm mất mát tổng bao gồm sai số so với dữ liệu thực nghiệm, sai số so với các điều kiện biên, sai số so với các điều kiện đầu và sai số của phương trình vật lý, được biểu diễn như sau:

$$\mathcal{L} = \lambda_d \mathcal{L}_d + \lambda_b \mathcal{L}_b + \lambda_0 \mathcal{L}_0 + \lambda_p \mathcal{L}_p \quad (2)$$

với $\lambda_d, \lambda_b, \lambda_0, \lambda_p$ lần lượt là các hệ số điều chỉnh được sử dụng nhằm cân bằng mức độ ảnh hưởng tương đối giữa các thành phần trong hàm mất mát, giúp quá trình huấn luyện vừa đảm bảo độ chính xác của dữ liệu, vừa thỏa mãn các điều kiện biên, điều kiện đầu, đồng thời tuân thủ các phương trình vật lý. Các thành phần $\mathcal{L}_d, \mathcal{L}_b, \mathcal{L}_0, \mathcal{L}_p$ tương ứng là các thành phần hàm mất mát phát sinh từ dữ liệu thực nghiệm, điều kiện biên, điều kiện đầu và các ràng buộc vật lý của hệ. Trong đó, các hàm mất mát được xác định như sau:

Hàm mất mát dữ liệu

$$\mathcal{L}_d = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \|u(t_d^i, x_d^i) - \hat{u}_\theta(t_d^i, x_d^i)\|^2 \quad (3)$$

Hàm mất mát điều kiện biên

$$\mathcal{L}_b = \frac{1}{N_b} \sum_{j=1}^{N_b} \|u(t_b^j, x_b^j) - \hat{u}_\theta(t_b^j, x_b^j)\|^2 \quad (4)$$

Hàm mất mát điều kiện đầu

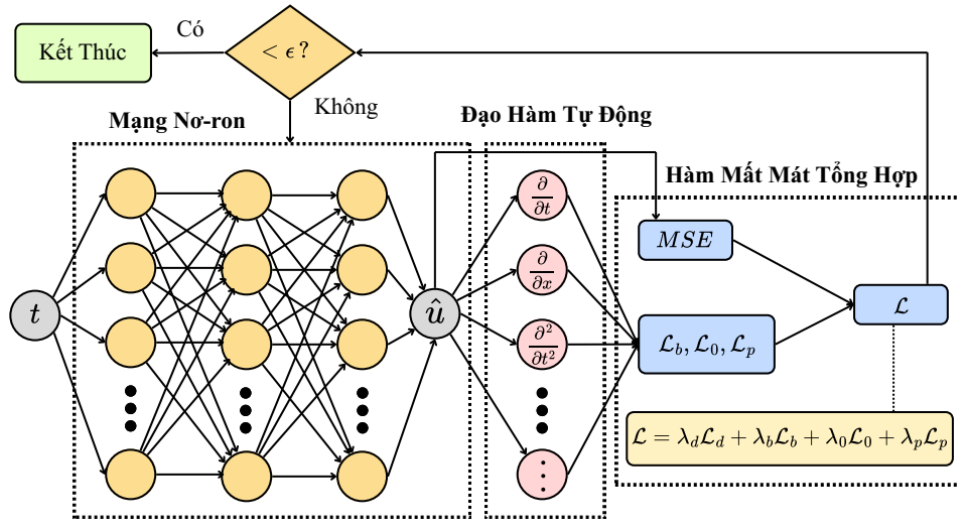
$$\mathcal{L}_0 = \frac{1}{N_0} \sum_{k=1}^{N_0} \|u(0, x_0^k) - \hat{u}_\theta(0, x_0^k)\|^2 \quad (5)$$

với N_d, N_b, N_0 là số lượng điểm dữ liệu tương ứng với dữ liệu thực nghiệm, điều kiện biên và điều kiện đầu, $u(t_d^i, x_d^i), u(t_b^j, x_b^j), u(0, x_0^k)$ là các giá trị thu được tại những điểm dữ liệu tương ứng như trên, $\hat{u}_\theta(t, x)$ là giá trị dự đoán của mạng nơ-ron tại các điểm dữ liệu lần lượt như trên.

Hàm mất mát vật lý

$$\mathcal{L}_p = \frac{1}{N_p} \sum_{m=1}^{N_p} \|\mathcal{N}[\hat{u}_\theta(t_p^m, x_p^m); \lambda]\|^2 \quad (6)$$

với N_p là số lượng điểm được lấy mẫu trong toàn miền tính toán, $\{\hat{u}_\theta(t_p^m, x_p^m)\}_{m=1}^{N_p}$ là các giá trị dự đoán của mạng nơ-ron trên toàn miền đó.



Hình 1. Sơ đồ tổng quát của mạng nơ-ron tích hợp vật lý

Trong nghiên cứu này, chúng tôi sử dụng mạng nơ-ron kết nối đầy đủ truyền thẳng để xấp xỉ nghiệm của các hệ phương trình vi phân mô tả hiện tượng vật lý đang xét. Cấu trúc mạng được lựa chọn linh hoạt theo từng bài toán, với số lớp ẩn và số nơ-ron khác nhau, sử dụng hàm kích hoạt $\tanh$ nhằm đảm bảo tính trơn, hỗ trợ tốt việc tính toán đạo hàm bằng kỹ thuật đạo hàm tự động trong gói thư viện học sâu của PyTorch [11], từ đó thuận tiện hơn trong việc tối ưu hóa các trọng số của mạng bằng phương pháp lan truyền ngược. Với lớp đầu ra, chúng tôi sử dụng hàm kích hoạt tuyến tính để dự đoán các đại lượng vật lý. Trong các phần thực nghiệm, quá trình huấn luyện được thực hiện bằng cách tối thiểu hóa hàm mất mát. Cấu trúc hàm mất mát được điều chỉnh linh hoạt tùy theo từng bài toán cụ thể. Mô hình học máy thuần dữ liệu được sử dụng làm cơ sở so sánh có cùng kiến trúc mạng nơ-ron truyền thẳng như trong mô hình mạng nơ-ron tích hợp vật lý, bao gồm số lớp ẩn, số nơ-ron và hàm kích hoạt tương tự, nhằm đảm bảo tính nhất quán trong khả năng biểu diễn của mô hình. Do cấu trúc và cơ chế huấn luyện của hai bài toán có sự khác biệt, số epoch được lựa chọn cũng không giống nhau. Với bài toán đầu tiên, cần phải tối ưu nhiều thành phần loss nên cần nhiều epoch hơn để hội tụ, hàm mất mát tổng hợp bao gồm sai số dữ liệu, điều kiện đầu và các ràng buộc vật lý từ phương trình chuyển động cho phép mô hình đồng thời khớp dữ liệu quan sát và tuân thủ các ràng buộc vật lý của hệ. Trong khi ở bài toán thứ hai với mô hình phương trình vi phân lại, có loss đơn giản hơn nên hội tụ nhanh và chỉ cần ít epoch, ràng buộc vật lý được tích hợp trực tiếp vào phương trình động lực học thay vì xuất hiện dưới dạng một thành phần hàm mất mát riêng biệt.

III. THỰC NGHIỆM

A. BÀI TOÁN CHUYỂN ĐỘNG CÓ YẾU TỐ LỰC CẢN

Trong mục này, chúng tôi xét chuyển động của một quả bóng chày trong mặt phẳng Oxy có khối lượng m dưới tác dụng đồng thời của trọng lực và lực cản môi trường tỷ lệ với bình phương vận tốc. Khi đó, phương trình chuyển động của vật theo hai phương x và y được mô tả bởi hệ phương trình vi phân

$$\begin{cases} \ddot{x}(t) = -\frac{D}{m}\sqrt{\dot{x}(t)^2 + \dot{y}(t)^2} \dot{x}(t) \\ \ddot{y}(t) = -g - \frac{D}{m}\sqrt{\dot{x}(t)^2 + \dot{y}(t)^2} \dot{y}(t) \end{cases} \quad (7)$$

trong đó g là gia tốc trọng trường, $D = \frac{1}{2}\rho C_d A$ là tham số lực cản phụ thuộc vào khối lượng riêng của không khí ρ , hệ số cản C_d và diện tích mặt cắt A của vật.

Điều kiện đầu của bài toán được xác định bởi

$$x(0) = x_0, \quad y(0) = y_0, \quad \dot{x}(0) = v_0 \cos \alpha, \quad \dot{y}(0) = v_0 \sin \alpha \quad (8)$$

trong đó x_0, y_0, v_0 là các điều kiện ban đầu của vật và α là góc ném so với phương ngang.

Các tham số vật lý được lựa chọn nhằm mô phỏng chuyển động của quả bóng chày được thể hiện trong Bảng 1.

Bảng 1. Các tham số đầu vào cho bài toán chuyển động

$g \text{ (m/s}^2\text{)}$	$m \text{ (kg)}$	$\alpha \text{ (}^\circ\text{)}$	$v_0 \text{ (m/s)}$	$\rho \text{ (kg/m}^3\text{)}$	C_d	$A \text{ (m}^2\text{)}$
9.81	0.145	35	50	1.293	0.5	0.00425

Dữ liệu huấn luyện cho bài toán được xây dựng từ nghiệm giải số của hệ phương trình (7) [12]. Để phản ánh sai số đo đạc thường gặp trong thực tế, một lượng nhiễu ngẫu nhiên nhỏ được bổ sung vào dữ liệu quan sát theo phân phối chuẩn với độ lệch chuẩn xác định. Mạng nơ-ron dùng để xấp xỉ nghiệm được xây dựng với bốn lớp ẩn, mỗi lớp gồm 256 nơ-ron và sử dụng hàm kích hoạt *tanh*. Quá trình huấn luyện áp dụng thuật toán tối ưu Adam với tốc độ học 0,01 trong 1500 epochs. Các tham số của mạng được tối ưu bằng cách cực tiểu hóa hàm mất mát tổng

$$\mathcal{L} = \lambda_d \mathcal{L}_d + \lambda_0 \mathcal{L}_0 + \lambda_p \mathcal{L}_p \quad (9)$$

trong đó

Hàm mất mát điều kiện đầu

$$\mathcal{L}_0 = \|x(0) - \hat{x}_\theta(0)\|^2 + \|y(0) - \hat{y}_\theta(0)\|^2 + \|\dot{x}(0) - \hat{\dot{x}}_\theta(0)\|^2 + \|\dot{y}(0) - \hat{\dot{y}}_\theta(0)\|^2 \quad (10)$$

Hàm mất mát dữ liệu

$$\mathcal{L}_d = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} [\|x(t_d^i) - \hat{x}_\theta(t_d^i)\|^2 + \|y(t_d^i) - \hat{y}_\theta(t_d^i)\|^2 + \|\dot{x}(t_d^i) - \hat{\dot{x}}_\theta(t_d^i)\|^2 + \|\dot{y}(t_d^i) - \hat{\dot{y}}_\theta(t_d^i)\|^2] \quad (11)$$

Hàm mất mát vật lý

$$\mathcal{L}_p = \frac{1}{N_p} \sum_{m=1}^{N_p} \|\mathcal{N}[\hat{u}_\theta(t_p^m)]\|^2 \quad (12)$$

Ngoài các ràng buộc động lực học từ phương trình (7), còn có các ràng buộc động học

$$\frac{dx}{dt} = \dot{x}(t), \quad \frac{dy}{dt} = \dot{y}(t)$$

nhằm đảm bảo tính nhất quán giữa các đại lượng vật lý được dự đoán. Do đó, hàm mất mát vật lý bao gồm hai thành phần. Thứ nhất, sai số động học được đưa vào nhằm đánh giá mức độ nhất quán giữa vận tốc dự đoán và đạo hàm theo thời gian của vị trí, qua đó đảm bảo mối quan hệ động học cơ bản giữa các đại lượng vật lý được thỏa mãn. Thứ hai, sai số động lực học phản ánh mức độ tuân thủ của nghiệm dự đoán đối với phương trình mô tả chuyển động của hệ. Thành phần này đóng vai trò quan trọng trong việc ràng buộc vật lý, đặc biệt trong các vùng thời gian không có dữ liệu huấn luyện.

Các hệ số điều chỉnh trong hàm mất mát tổng hợp được thiết lập với ưu tiên cho ràng buộc vật lý, cụ thể $\lambda_d = \lambda_0 = 1$ và $\lambda_p = 10$. Giá trị λ_p được chọn lớn hơn nhằm nhấn mạnh tính nhất quán vật lý khi số điểm dữ liệu ít và được chọn dựa trên quá trình thực nghiệm bằng cách thay đổi giá trị trong khoảng hẹp để đảm bảo nghiệm không phụ thuộc quá mức vào một thành phần mà mang tính cân bằng. Tập dữ liệu huấn luyện gồm năm điểm rời rạc được phân bố không đều theo thời gian, đại diện cho trạng thái của vật tại các thời điểm khác nhau trong suốt quá trình chuyển động. Việc sử dụng số lượng dữ liệu hạn chế nhằm đánh giá khả năng của mô hình trong việc suy luận quỹ đạo chuyển động dựa trên sự kết hợp giữa dữ liệu và các ràng buộc vật lý của hệ. Các điểm dữ liệu dùng để huấn luyện mô hình được trình bày ở Bảng 2.

Bảng 2. Các điểm dữ liệu dùng để huấn luyện mô hình

$t \text{ (s)}$	$x \text{ (m)}$	$y \text{ (m)}$	$v_x \text{ (m/s)}$	$v_y \text{ (m/s)}$
0.15	5.94	5.05	38.25	25.35
0.50	18.40	12.74	33.26	18.83
1.00	33.71	20.24	28.28	11.46
3.20	82.27	19.47	17.50	-10.35
4.40	100.95	1.90	13.70	-18.53

B. BÀI TOÁN DAO ĐỘNG CỦA HỆ LÒ XO VỚI THÀNH PHẦN LỰC CẢN CHƯA BIẾT

Trong bài toán thứ hai, chúng tôi xét một hệ dao động cơ học gồm lò xo, vật nặng và thành phần giảm chấn. Phương trình chuyển động của hệ trên được mô tả bởi phương trình vi phân bậc hai:

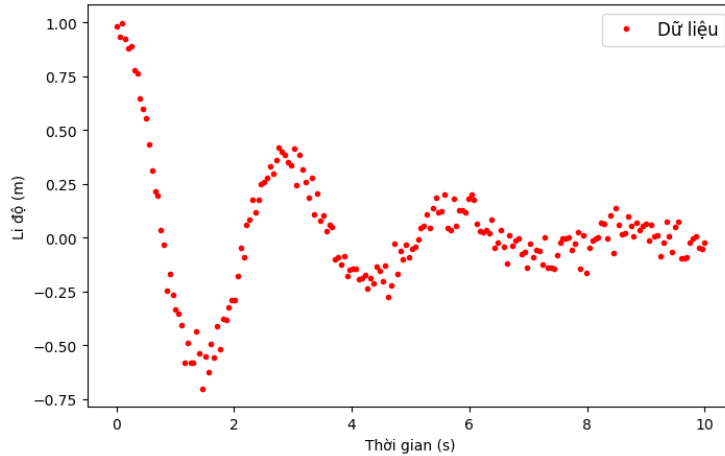
$$m\ddot{x}(t) + c\dot{x}(t) + kx(t) = 0 \quad (13)$$

trong đó m là khối lượng của vật nặng, c là hệ số giảm chấn, k là độ cứng lò xo và x là li độ. Trong nhiều trường hợp thực tế, thành phần giảm chấn có thể không được mô tả chính xác hoặc không tuân theo dạng tuyến tính đơn giản mà phụ thuộc phi tuyến vào trạng thái của hệ hoặc điều kiện môi trường. Điều này khiến việc mô hình hóa và giải bài toán theo phương pháp truyền thống gặp nhiều hạn chế. Để giải quyết vấn đề này, chúng tôi tiếp cận bài toán theo hướng phương trình vi phân lai, trong đó phần động lực học đã biết của hệ được giữ nguyên, trong khi thành phần giảm chấn chưa biết được xấp xỉ bằng một mạng nơ-ron. Khi đó, phương trình chuyển động của hệ được viết lại dưới dạng:

$$m\ddot{x}(t) + g_\theta[x(t), \dot{x}(t)] + kx(t) = 0 \quad (14)$$

trong đó g_θ là mạng nơ-ron truyền thẳng được tham số hóa bởi tập trọng số θ , nhận đầu vào là trạng thái tức thời của hệ, bao gồm li độ $x(t)$ và vận tốc $\dot{x}(t)$. Đầu ra là thành phần lực cản tương ứng được học từ dữ liệu, sau đó nghiệm dự đoán được tìm bằng cách giải số phương trình vi phân (14). Cách tiếp cận này cho phép mạng nơ-ron đóng vai trò bổ sung cho mô hình vật lý, để dàng mô hình hóa các thành phần chưa rõ ràng hoặc khó biểu diễn bằng công thức giải tích.

Dữ liệu huấn luyện cho bài toán được xây dựng từ nghiệm giải số phương trình (13) của hệ dao động với hệ số giảm chấn đã biết, sau đó thêm nhiễu ngẫu nhiên nhỏ nhằm mô phỏng sai số đo đạc trong thực nghiệm. Hình 2 minh họa tập dữ liệu mô phỏng được sử dụng trong quá trình huấn luyện.



Hình 2. Dữ liệu mô phỏng dùng để huấn luyện mô hình

Thành phần lực cản chưa biết được xấp xỉ bởi một mạng nơ-ron g_θ gồm hai lớp ẩn, mỗi lớp mười sáu nơ-ron, sử dụng hàm kích hoạt *tanh*. Hệ phương trình vi phân lai được giải bằng phương pháp Runge-Kutta bậc bốn. Quá trình huấn luyện được thực hiện trong 100 epochs, sử dụng thuật toán tối ưu Adam với tốc độ học khởi tạo là 0,01.

Hàm mất mát tổng được xác định

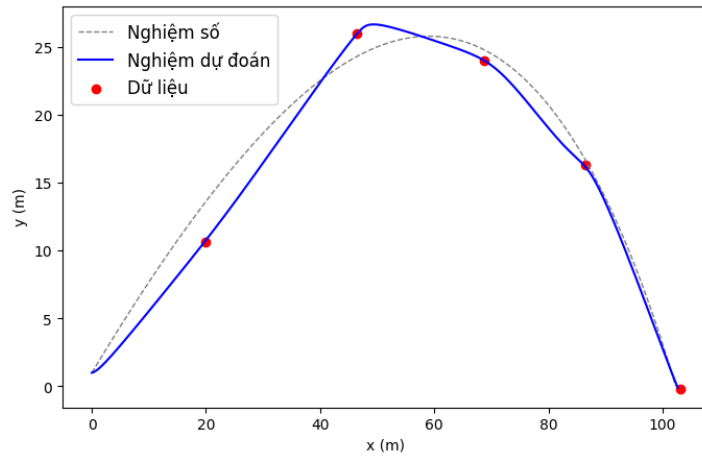
$$\mathcal{L} = \frac{1}{N_p} \left[\|x(t_p^i) - \hat{x}_\theta(t_p^i)\|^2 + \|\dot{x}(t_p^i) - \hat{\dot{x}}_\theta(t_p^i)\|^2 \right] \quad (15)$$

Trong quá trình huấn luyện, thành phần lực cản thực không được cung cấp cho mô hình mà được học thông qua việc tối ưu hóa sai số giữa nghiệm dự đoán và dữ liệu quan sát từ (15).

IV. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

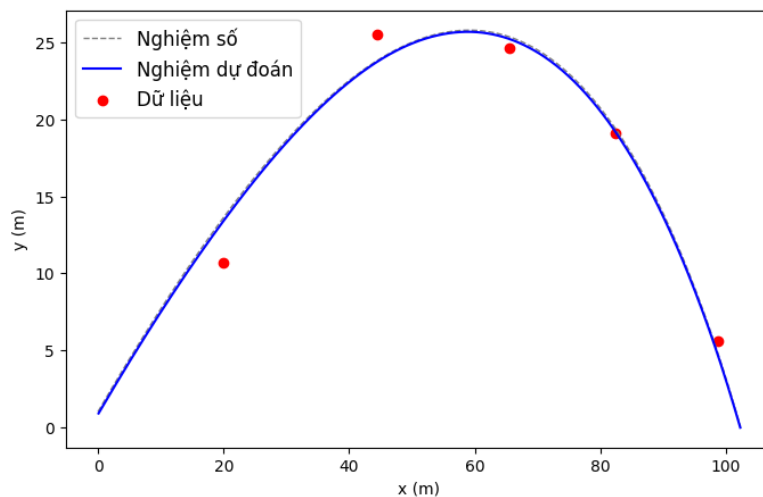
A. ĐÁNH GIÁ KẾT QUẢ DỰ ĐOÁN BÀI TOÁN CHUYỂN ĐỘNG CÓ YẾU TỐ LỰC CẢN

Sau khi huấn luyện mô hình mạng nơ-ron tích hợp vật lý cho bài toán chuyển động có yếu tố lực cản với tập dữ liệu huấn luyện đã thiết lập ở mục trước, chúng tôi tiến hành đánh giá khả năng tái tạo quỹ đạo chuyển động của vật và mức độ tổng quát hóa của mô hình.



Hình 3. Quỹ đạo chuyển động được dự đoán bằng mô hình thuần dữ liệu

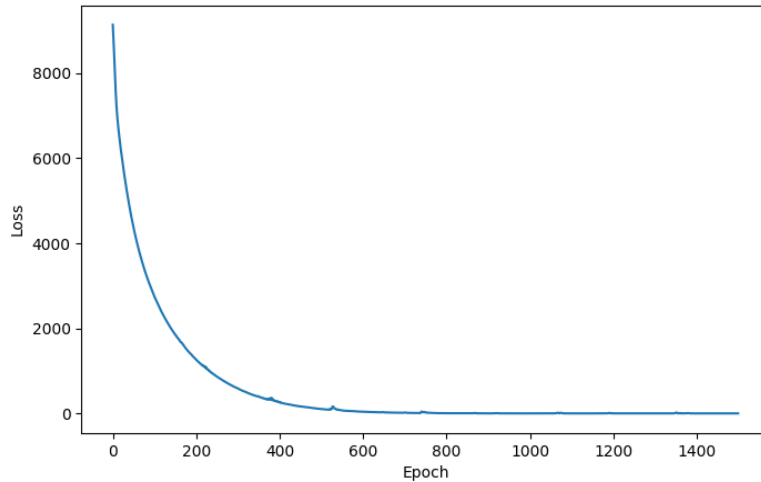
Kết quả dự đoán được trình bày trong Hình 3 và Hình 4. Trong Hình 3, quỹ đạo dự đoán bởi mô hình học máy thuần dữ liệu bám sát các điểm dữ liệu quan sát tại những vị trí có mẫu huấn luyện, tuy nhiên xuất hiện sai lệch đáng kể tại các vùng ít dữ liệu. Điều này phản ánh hạn chế của các phương pháp học dựa hoàn toàn trên dữ liệu, khi khả năng ngoại suy ngoài miền huấn luyện còn phụ thuộc mạnh vào phân bố và mật độ mẫu.



Hình 4. Quỹ đạo chuyển động được dự đoán bằng mô hình mạng nơ-ron tích hợp vật lý

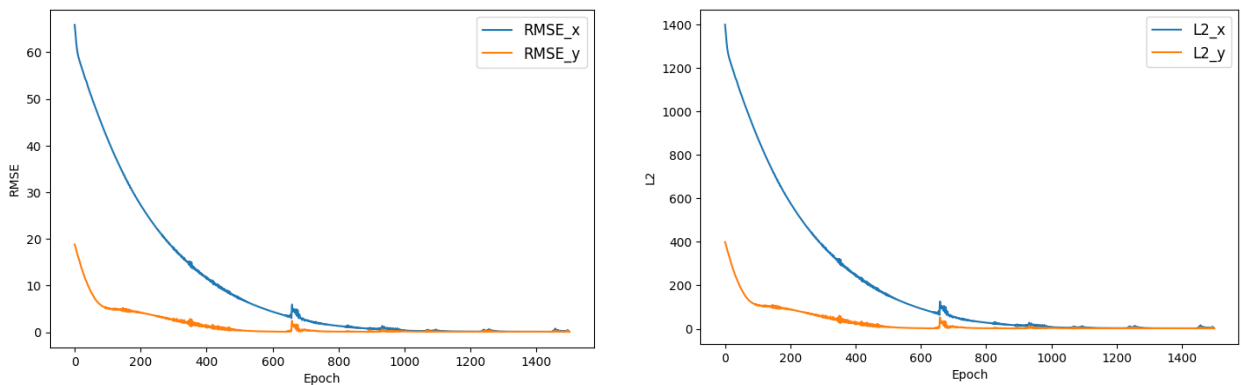
Ngược lại, Hình 4 cho thấy quỹ đạo dự đoán bởi mô hình mạng nơ-ron tích hợp vật lý có ổn định hơn và bám sát nghiệm trên toàn bộ miền khảo sát, bao gồm cả những khoảng thời gian không có dữ liệu huấn luyện. Kết quả này cho thấy việc tích hợp các ràng buộc vật lý vào quá trình huấn luyện giúp cải thiện khả năng tổng quát hóa, nâng cao độ tin cậy của nghiệm dự đoán trong điều kiện dữ liệu bị hạn chế.

Hiệu quả của mô hình được phân tích thông qua sự hội tụ của các thành phần hàm mất mát, độ khớp giữa quỹ đạo dự đoán và dữ liệu quan sát, cũng như sai số theo từng thành phần tọa độ. Hình 5 minh họa đường cong hàm mất mát tổng trong suốt quá trình huấn luyện. Có thể nhận thấy rằng giá trị hàm mất mát giảm nhanh trong giai đoạn đầu và dần hội tụ về giá trị rất nhỏ khi số epoch tăng lên. Sự hội tụ ổn định cho thấy nghiệm dự đoán của mô hình không chỉ khớp tốt với dữ liệu quan sát và các điều kiện ban đầu mà còn thỏa các ràng buộc vật lý thông qua phương trình động lực học của hệ.



Hình 5. Đường cong hàm mất mát tổng trong quá trình huấn luyện của bài toán chuyển động có yếu tố lực cản

Bên cạnh việc đánh giá trực quan quỹ đạo chuyển động, chúng tôi tiến hành phân tích định lượng sai số của mô hình thông qua các chỉ số RMSE và chuẩn L^2 theo từng epoch trong quá trình huấn luyện. Hình 6 minh họa sự biến thiên của các chỉ số này đối với hai thành phần tọa độ. Sai số RMSE và chuẩn L^2 giảm nhanh trong giai đoạn đầu và dần hội tụ về giá trị rất nhỏ, cho thấy mô hình học hiệu quả và ổn định. Mặc dù xuất hiện một số dao động nhỏ trong quá trình huấn luyện do tối ưu đồng thời nhiều thành phần trong hàm mất mát, xu hướng tổng thể vẫn hội tụ tốt.



Hình 6. RMSE và L^2 trong quá trình huấn luyện mô hình

Bảng 3 cho thấy mô hình mạng nơ-ron tích hợp vật lý đạt sai số thấp hơn đáng kể so với mô hình thuần dữ liệu, với RMSE giảm từ 4.979 xuống còn 0.157 và chuẩn L^2 giảm từ 105.744 xuống còn 3.338. Sự cải thiện rõ rệt này khẳng định rằng việc tích hợp các ràng buộc vật lý vào quá trình huấn luyện không chỉ giúp mô hình khớp tốt với dữ liệu quan sát mà còn nâng cao khả năng tổng quát hóa, đặc biệt trong các vùng không có dữ liệu huấn luyện. Những kết quả này phù hợp với các quan sát định tính từ quỹ đạo dự đoán, đồng thời cung cấp bằng chứng định lượng cho thấy mô hình mạng nơ-ron tích hợp vật lý cho hiệu năng vượt trội so với các phương pháp học máy thuần dữ liệu trong bài toán cụ thể này.

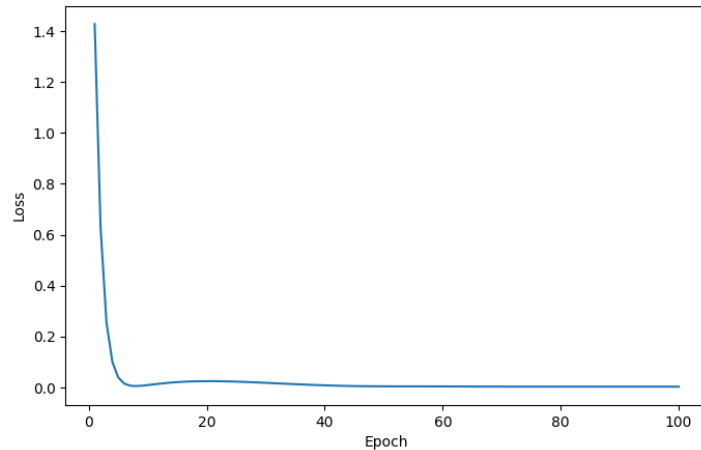
Bảng 3. So sánh sai số RMSE và chuẩn L^2 giữa các mô hình

Phương pháp	RMSE	L^2
Mô hình mạng nơ-ron tích hợp vật lý	0.157	3.338
Mô hình thuần dữ liệu	4.979	105.744

B. ĐÁNH GIÁ KẾT QUẢ DỰ ĐOÁN BÀI TOÁN DAO ĐỘNG CỦA HỆ LÒ XO VỚI THÀNH PHẦN LỰC CẢN CHƯA BIẾT

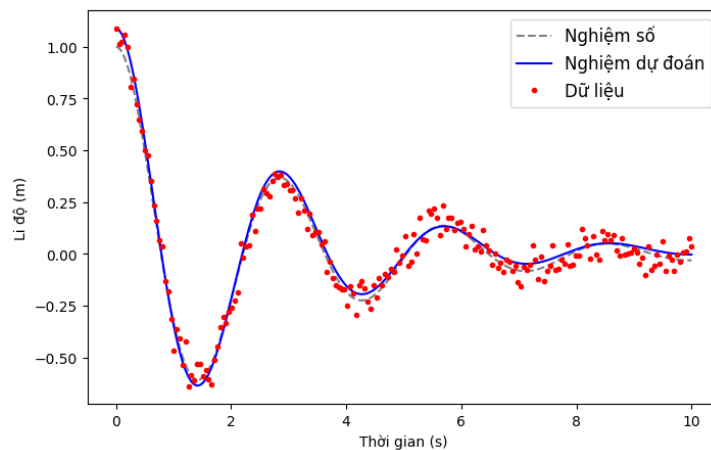
Sau khi huấn luyện mô hình cho bài toán dao động của hệ lò xo, chúng tôi tiến hành đánh giá khả năng dự đoán li độ theo thời gian của hệ trong điều kiện dữ liệu quan sát có nhiễu cũng như khả năng suy luận thành phần giảm

chẩn chưa biết từ dữ liệu. Trong bài toán này, hàm mất mát được xây dựng dưới dạng sai số bình phương trung bình giữa nghiệm dự đoán và dữ liệu quan sát, trong đó ràng buộc vật lý của hệ không được đưa vào dưới dạng một thành phần hàm mất mát tường minh mà được tích hợp trực tiếp vào phương trình vi phân lai thông qua phần động lực học đã biết của hệ. Sự hội tụ của hàm mất mát trong quá trình huấn luyện được thể hiện trong Hình 7, cho thấy giá trị loss giảm nhanh trong giai đoạn đầu và dần ổn định sau một số epoch, phản ánh tính ổn định của quá trình tối ưu.

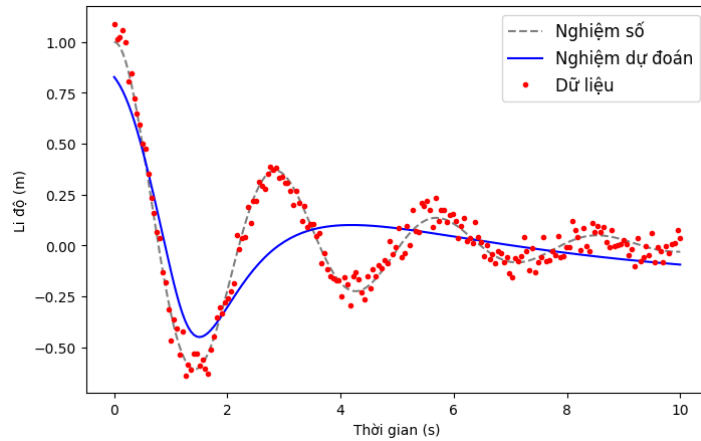


Hình 7. Đường cong hàm mất mát trong quá trình huấn luyện của bài toán dao động của hệ lò xo với phần lực cản chưa biết

Kết quả so sánh giữa nghiệm giải số, dữ liệu nhiễu và nghiệm dự đoán cho thấy mô hình tái tạo tốt xu hướng suy giảm biên độ dao động theo thời gian và các đặc trưng động học chính của hệ bao gồm tần số dao động và tốc độ suy giảm năng lượng. Nghiệm dự đoán của mô hình duy trì được tính nhất quán giữa li độ và vận tốc, phản ánh khả năng học đồng thời các biến trạng thái thông qua ràng buộc phương trình vi phân. Các kết quả này được minh họa trong Hình 8.



Hình 8. Dao động theo thời gian được dự đoán bằng mô hình mạng nơ-ron lai



Hình 9. Dao động theo thời gian được dự đoán bằng mô hình thuần dữ liệu

Mặc dù thành phần giảm chấn không được giả định dưới dạng tuyến tính, mô hình vẫn suy luận được thành phần lực cản từ dữ liệu, cho thấy ưu thế của cách tiếp cận kết hợp giữa mô hình vật lý và học máy trong việc nhận dạng các thành phần động lực học chưa biết. So với phương pháp huấn luyện thuần dựa trên dữ liệu ở Hình 9, mô hình cho kết quả ổn định hơn và ít nhạy cảm với nhiễu, qua đó nhấn mạnh vai trò của việc kết hợp tính chất vật lý với học máy trong mô hình hóa và mô phỏng các hệ động lực học phức tạp.

Kết quả trong Bảng 4 cho thấy mô hình mạng nơ-ron lai đạt sai số thấp hơn so với mô hình thuần dữ liệu. Điều này chứng tỏ việc tích hợp thông tin vật lý vào phương trình động lực học giúp cải thiện độ chính xác và khả năng suy luận thành phần chưa biết của hệ.

Bảng 4. So sánh sai số RMSE và chuẩn L^2 giữa mô hình mạng nơ-ron lai và mô hình thuần dữ liệu

Phương pháp	RMSE	L^2
Mô hình mạng nơ-ron lai	0.029	0.418
Mô hình thuần dữ liệu	0.269	3.806

C. SO SÁNH HIỆU QUẢ DỰ ĐOÁN GIỮA CÁC MÔ HÌNH

Cả hai bài toán đều khai thác sự kết hợp giữa học máy và các định luật vật lý nhưng cách thức tích hợp vật lý trong hai mô hình có sự khác biệt rõ rệt. Với bài toán chuyển động có lực cản, ràng buộc vật lý được đưa trực tiếp vào hàm mất mát, trong khi ở bài toán dao động của hệ lò xo, ràng buộc vật lý được tích hợp ngay trong phương trình động lực học.

Kết quả thực nghiệm cho thấy các cách tiếp cận tích hợp thông tin vật lý đều giúp cải thiện độ ổn định của nghiệm dự đoán và tăng cường tính nhất quán vật lý so với các mô hình học máy thuần dữ liệu. Tùy theo cách thức tích hợp các ràng buộc vật lý, mỗi mô hình thể hiện những ưu điểm khác nhau trong quá trình mô hình hóa, đặc biệt liên quan đến khả năng suy luận thành phần chưa biết và mức độ phụ thuộc vào dữ liệu huấn luyện. Điều này cho thấy việc lựa chọn phương pháp phù hợp cần được cân nhắc dựa trên đặc trưng của bài toán cũng như mức độ hiểu biết sẵn có về mô hình vật lý của hệ.

V. KẾT LUẬN

Chúng tôi đã khảo sát và áp dụng mạng nơ-ron tích hợp vật lý để giải và mô phỏng hai bài toán động lực học điển hình, bao gồm chuyển động của vật có yếu tố lực cản và dao động của hệ lò xo với thành phần giảm chấn chưa xác định. Bằng cách tích hợp trực tiếp các ràng buộc vật lý dưới dạng phương trình vi phân vào quá trình huấn luyện, mô hình đề xuất cho thấy khả năng tái tạo quỹ đạo chuyển động phù hợp với nghiệm giải số ngay cả trong điều kiện dữ liệu huấn luyện hạn chế và có nhiễu. Các kết quả thực nghiệm minh họa rằng phương pháp mạng nơ-ron tích hợp vật lý không chỉ cải thiện độ chính xác dự đoán mà còn đảm bảo tính nhất quán vật lý của nghiệm thu được so với các phương pháp học máy thuần dữ liệu. Bên cạnh đó, việc mở rộng phương pháp sang mô hình phương trình vi phân lai cho bài toán hệ lò xo cho thấy tiềm năng của mạng nơ-ron trong việc suy luận và biểu diễn các thành phần chưa biết từ dữ liệu quan sát, trong khi vẫn giữ nguyên cấu trúc vật lý của hệ. Cách tiếp cận này đặc biệt hữu ích trong các trường hợp mô hình vật lý chỉ được biết một phần hoặc tập dữ liệu thực nghiệm nhỏ, qua đó mở rộng phạm vi ứng dụng của học máy trong mô hình hóa các bài toán phức tạp. Bên cạnh những kết quả đạt được, nghiên cứu này cũng tồn tại một số hạn chế. Việc huấn luyện mạng nơ-ron tích hợp vật lý thường

đòi hỏi chi phí tính toán cao, đặc biệt khi số điểm lấy mẫu cho ràng buộc vật lý tăng lên hoặc khi bài toán được mở rộng sang các hệ có nhiều bậc tự do. Ngoài ra, việc lựa chọn cấu trúc mạng, các hệ số trọng số trong hàm mất mát và các siêu tham số huấn luyện vẫn mang tính kinh nghiệm, có thể ảnh hưởng đến tốc độ hội tụ cũng như độ ổn định của nghiệm dự đoán.

Trong các nghiên cứu tiếp theo, hướng tiếp cận này có thể tiếp tục được mở rộng theo nhiều hướng khác nhau nhằm nâng cao tính linh hoạt và khả năng ứng dụng. Một trong những hướng quan trọng là xem xét và định lượng tính bất định của nghiệm dự đoán bởi mô hình, từ đó cung cấp không chỉ giá trị dự đoán mà còn mức độ tin cậy đi kèm. Bên cạnh đó, việc kết hợp và so sánh nhiều mô hình huấn luyện độc lập cũng có thể giúp đánh giá tính ổn định và độ tin cậy của kết quả thu được. Cuối cùng, phương pháp có khả năng phát triển cho các bài toán phức tạp hơn, các bài toán suy luận ngược và các hiện tượng vật lý có mức độ phi tuyến cao, góp phần mở rộng phạm vi ứng dụng trong nghiên cứu khoa học và kỹ thuật.

VI. LỜI CẢM ƠN

Nghiên cứu này được tài trợ bởi Nguồn ngân sách khoa học và công nghệ Trường Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh trong đề tài sinh viên NCKH năm học 2025 – 2026.

VII. TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] J. Ker, L. Wang, J. Rao, and T. Lim (2017), "Deep learning applications in medical image analysis," *IEEE Access*, vol. 6, pp. 9375-9389.
- [2] A. Krizhevsky, I. Sutskever, and G. E. Hinton (2012), "Imagenet classification with deep convolutional neural networks," *Advances in neural information processing systems*, vol. 25.
- [3] K. Muhammad, A. Ullah, J. Lloret, J. Del Ser, and V. H. C. De Albuquerque (2020), "Deep learning for safe autonomous driving: Current challenges and future directions," *IEEE Transactions on Intelligent Transportation Systems*, vol. 22, no. 7, pp. 4316-4336.
- [4] L. Shi, Y. Wang, Y. Cheng, and R. Wei (2020), "Review of attention mechanism in natural language processing," *Data Analysis Knowledge Discovery*, vol. 4, no. 5, pp. 1-14.
- [5] Z.-Q. Zhao, P. Zheng, S.-t. Xu, and X. Wu (2019), "Object detection with deep learning: A review," *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, vol. 30, no. 11, pp. 3212-3232.
- [6] J. Pathak *et al.* (2022), "Fourcastnet: A global data-driven high-resolution weather model using adaptive fourier neural operators," *ArXiv (Cornell University)*.
- [7] K. M. Ruff and R. V. Pappu (2021), "AlphaFold and implications for intrinsically disordered proteins," *Journal of molecular biology*, vol. 433, no. 20, p. 167208.
- [8] M. Raissi, P. Perdikaris, and G. E. Karniadakis (2017), "Physics Informed Deep Learning (Part I): Data-driven Solutions of Nonlinear Partial Differential Equations," *arXiv.org*.
- [9] M. Raissi, P. Perdikaris, and G. E. Karniadakis (2017), "Physics Informed Deep Learning (Part II): Data-driven Discovery of Nonlinear Partial Differential Equations," *arXiv (Cornell University)*.
- [10] M. Raissi, P. Perdikaris, and G. E. Karniadakis (2019), "Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations," *Journal of Computational Physics*, vol. 378, pp. 686-707.
- [11] A. Paszke *et al.* (2017), "Automatic differentiation in pytorch," *31st Conference on Neural Information Processing Systems*.
- [12] P. Mohazzabi (2018), "When does air resistance become significant in projectile motion?," *The Physics Teacher*, vol. 56, no. 3, pp. 168-169.

APPLICATION OF PHYSICS-INFORMED NEURAL NETWORKS IN SOLVING AND SIMULATING ONE-DIMENSIONAL AND TWO-DIMENSIONAL PHYSICS PROBLEMS

Tran Hy Phuc, Nguyen Vu Thu Nhan, Nguyen Minh Hai

ABSTRACT— Physics-informed neural networks constitute an approach that integrates observational data with physical laws expressed in the form of differential equations in order to model and simulate physical systems efficiently. Unlike purely data-driven deep learning methods, this approach directly incorporates physical constraints into the loss function, thereby reducing dependence on large training datasets and improving the model's generalization capability. In this study, we investigate the applicability of physics-informed neural networks and hybrid differential equation models to solve two representative physical problems: the motion of an object subject to drag forces and the oscillation of a spring-mass system with an unknown damping component. Experimental results demonstrate that the proposed models are capable of accurately reproducing motion trajectories even when the training data are limited and contaminated with noise. This study provides further

empirical evidence of the applicability of physics-informed neural networks in modeling physical systems and suggests the potential for extending this approach to a wide range of other problem classes.

Keywords — Physics-informed neural networks, deep learning methods, machine learning, physical simulation



Trần Hỷ Phúc hiện là sinh viên khoa Vật Lý tại Trường Đại học Sư Phạm Thành phố Hồ Chí Minh (HCMUE). Hướng nghiên cứu chính là ứng dụng AI trong lĩnh vực vật lý và giáo dục.



Nguyễn Vũ Thụ Nhân là giảng viên khoa Vật Lý tại trường Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh (HCMUE). Hướng nghiên cứu của ông là ứng dụng AI trong giảng dạy và giáo dục.



Nguyễn Minh Hải nhận bằng Tiến sĩ Khoa học Máy tính tại Học viện Khoa học và Công nghệ, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam (VAST) năm 2025. Hiện ông là giảng viên của Trường Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh (HCMUE). Hướng nghiên cứu của ông tập trung vào trí tuệ nhân tạo, với định hướng phát triển và ứng dụng

các mô hình học máy và học sâu trong các lĩnh vực y tế và giáo dục, nhằm nâng cao hiệu quả khai thác dữ liệu và giải quyết các vấn đề khoa học và công nghệ gắn với yêu cầu thực tiễn.