

Tổng quan về mạng học sâu vật lý

Trần Châu Thanh Thiện*

Khoa Công nghệ thông tin, Trường Đại học Nguyễn Tất Thành, Thành phố Hồ Chí Minh

*tccthien@ntt.edu.vn

Tóm tắt

Trong những năm gần đây, mô hình mạng học sâu vật lý (Physics-Informed Neural Networks - PINNs) đã trở thành hướng đi mới trong lĩnh vực tính toán khoa học, khi kết hợp trí tuệ nhân tạo với các mô hình vật lý. PINNs cho phép tích hợp trực tiếp các phương trình vi phân (ODEs, PDEs) vào quá trình huấn luyện mạng nơ-ron, giúp tạo ra các mô hình vừa chính xác về mặt vật lý, vừa có khả năng xử lý dữ liệu thực tế. Bài báo cung cấp cái nhìn tổng quan về PINNs, từ nền tảng lý thuyết, kiến trúc mạng, đến cơ chế huấn luyện và các ứng dụng điển hình như giải PDEs, mô hình nghịch đảo, mô phỏng hệ động lực và đa vật lý. Ngoài ra, bài viết cũng phân tích các ưu điểm, thách thức kỹ thuật hiện nay và định hướng nghiên cứu tương lai như adaptive PINNs, phân rã miền (domain decomposition), và các biến thể như XPINNs, hp-VPINNs, MgFNO. Kết luận, PINNs là công cụ tiềm năng trong các bài toán có dữ liệu hạn chế nhưng đòi hỏi độ chính xác vật lý cao. Việc phát triển và ứng dụng PINNs tại Việt Nam là cần thiết, góp phần thúc đẩy lĩnh vực khoa học tính toán và trí tuệ nhân tạo.

Nhận 16/04/2025

Được duyệt 11/07/2025

Công bố 30/10/2025

Từ khóa

Mạng học sâu vật lý, mô hình vật lý, phương trình vi phân, học máy khoa học, mô phỏng hiện tượng vật lý, bài toán nghịch đảo.

© 2025 Journal of Science and Technology - NTTU

1. Đặt vấn đề

1.1. Bối cảnh và động lực

Trong thời đại số hoá khoa học và công nghệ, nhu cầu xây dựng các mô phỏng hiện tượng vật lý ngày càng tăng cao trong nhiều lĩnh vực: từ dự báo khí tượng, thủy văn, mô hình y sinh, địa chất, vật liệu cho đến kỹ thuật hàng không và năng lượng. Tuy nhiên, các phương pháp mô phỏng truyền thống như phần tử hữu hạn (FEM), sai phân hữu hạn (FDM) hay phương pháp thể tích hữu hạn (FVM) thường đòi hỏi chi phí tính toán lớn, khó mở rộng cho bài toán nhiều chiều hoặc miền tính toán phức tạp.

Trong khi đó, học sâu đã đạt được những thành tựu vượt bậc trong nhận diện hình ảnh, xử lý ngôn ngữ và chuỗi thời gian. Tuy nhiên, các mô hình học sâu thuần túy lại gặp khó khăn khi áp dụng vào các lĩnh vực kỹ thuật và khoa học tự nhiên, nơi mà dữ liệu huấn luyện thường khan hiếm, và tính đúng đắn vật lý là yếu tố bắt buộc.

Mạng học sâu vật lý ra đời như một giải pháp trung hoà giữa hai thế giới: kết hợp cấu trúc mạng học sâu với ràng buộc từ các phương trình vật lý (ODEs, PDEs), cho phép mô hình vừa học từ dữ liệu, vừa đảm bảo tuân thủ các định luật vật lý cơ bản. Ý tưởng này do Raissi et al. [1] đề xuất vào năm 2019, và nhanh chóng mở ra một hướng mới cho lĩnh vực Học máy khoa học.

Đặc biệt, sự phát triển của các biến thể mới như XPINNs, hp-VPINNs, MgFNO và PINO/FNO cho thấy tiềm năng mở rộng ứng dụng mạnh mẽ của phương

pháp này trong môi trường nhiều tỉ lệ, đa trường vật lý, và miền tính toán lớn.

Do đó, việc nghiên cứu tổng quan về PINNs không chỉ có ý nghĩa học thuật, mà còn mang tính thực tiễn cao trong việc định hướng ứng dụng học máy vào các ngành khoa học, kỹ thuật tại Việt Nam, nơi dữ liệu còn hạn chế nhưng nhu cầu mô phỏng chính xác ngày càng lớn.

1.2. Đóng góp của bài báo

Bài báo này được xây dựng nhằm đáp ứng ba mục tiêu chính:

- (i) hệ thống hóa tiến bộ của PINNs từ năm 2019 đến năm 2025;
- (ii) phân tích điểm mạnh, hạn chế và đặc trưng của từng nhánh giải thuật chính;
- (iii) đề xuất khả năng ứng dụng thực tiễn của PINNs và các biến thể trong bối cảnh nghiên cứu và công nghiệp tại Việt Nam.

1.3. Phạm vi và phương pháp khảo sát

1.3.1. Mục tiêu khảo sát

Bài báo hướng đến việc tổng hợp và hệ thống hóa các hướng phát triển chính của PINNs và các biến thể mở rộng giai đoạn 2019-2025. Do hạn chế về hạ tầng tính toán, tác giả không tiến hành thực nghiệm lại, mà thay vào đó sử dụng kết quả công bố trong các bài báo khoa học uy tín để định lượng so sánh hiệu quả các mô hình. Cách tiếp cận này nhằm đảm bảo tính khách quan và mở rộng phạm vi khảo sát trong điều kiện tài nguyên phù hợp.



1.3.2. Phạm vi nội dung

- Phạm vi mô hình: bao gồm các mạng PINNs cổ điển, các biến thể như XPINNs, hp-VPINNs, gPINNs cũng như các nhánh học toán tử sâu như FNO, PINO, MgFNO và PINTO.
- Loại bài toán: giới hạn ở các bài toán PDEs/ODEs phổ biến có benchmark công bố rộng rãi như Burgers 1D, Allen-Cahn 2D, Darcy Flow và Navier-Stokes.
- Tiêu chí lựa chọn tài liệu:
 - ✓ Bài báo quốc tế từ năm 2019 đến tháng 6/2025.
 - ✓ Ưu tiên các nghiên cứu có kết quả định lượng rõ ràng (Rel. L2 error, MAE, inference time).
 - ✓ Ưu tiên công bố tại các hội nghị (ICLR, NeurIPS, ICML) và tạp chí Q1 theo SCImago.

1.3.3. Phương pháp thu thập và tổng hợp dữ liệu

- Công cụ truy xuất: Google Scholar, Scopus, arXiv API, Zotero.
- Từ khóa tìm kiếm: "PINNs", "Physics-Informed Neural Networks", "XPINNs", "FNO", "PINO", "PINTO", "scientific machine learning".
- Chiến lược chọn lọc:
 - ✓ Đọc toàn văn để xác nhận mô hình có áp dụng PDEs, trình bày công thức loss rõ ràng, có báo cáo số liệu thực nghiệm.
 - ✓ Lưu trữ thông tin gồm: mô hình, cấu trúc mạng, hàm mất mát, bài toán, dữ liệu, độ lỗi Rel. L2, thời gian huấn luyện (nếu có), phần cứng sử dụng.
 - ✓ Chuẩn hóa so sánh: với mỗi bài toán (ví dụ Burgers 1D), nếu có nhiều báo cáo, chỉ chọn kết quả tốt nhất từ mỗi mô hình để tạo bảng so sánh. Các giá trị được ghi nhận kèm nguồn trích dẫn rõ ràng trong phần Tài liệu tham khảo.

1.3.4. Giới hạn khảo sát

- Do không thực hiện huấn luyện lại, bài báo không đánh giá độ ổn định mô hình theo từng lần chạy mà chỉ ghi nhận giá trị trung bình tốt nhất từ các báo cáo gốc.
- Sai khác về điều kiện biên, lưới không gian, thời gian hoặc cách chọn điểm đối chiếu vật lý có thể làm các kết quả khác biệt; vì vậy bảng định lượng chỉ mang tính chất tham khảo thứ bậc.

2. Kiến thức nền

2.1. Quy ước ký hiệu

Bảng 1. Quy ước ký hiệu

Ký hiệu	Diễn giải
$x \in \Omega \subset \mathbb{R}^d$	Biến không gian trong miền tính toán
$t \in [0, T]$	Biến thời gian
$u(x, t)$	Nghiệm thực của hệ vật lý

$\mathcal{N}(x, t, \theta)$	Mạng nơ-ron bao gồm các biến không gian x , thời gian t , và tham số θ .
$u_\theta(x, t)$	Nghiệm xấp xỉ bởi mạng nơ-ron, tham số bởi θ
$\mathcal{N}[u]$	Toán tử vi phân (PDEs)
$f(x, t)$	Thành phần nguồn ngoại sinh
$\mathcal{R}_{phys}$	Phần dư phương trình vật lý
λ_k	Trọng số hàm mất mát
$\mathcal{L}_{data}, \mathcal{L}_{bc}, \mathcal{L}_{phys}$	Các thành phần trong hàm mất mát
N_d, N_f	Số lượng điểm dữ liệu và điểm đối chiếu vật lý

2.2. Phương trình vi phân và bài toán mô phỏng

Phương trình vi phân là công cụ cốt lõi trong mô hình hóa các hệ thống động học, vật lý tính toán và sinh học. Chúng mô tả sự thay đổi của đại lượng vật lý theo không gian và thời gian, ví dụ: nhiệt độ, áp suất, nồng độ, vận tốc,...

Những bài toán này thường được biểu diễn tổng quát như sau: $\mathcal{N}[u](x, t) = f(x, t)$, $x \in \Omega$, $t \in [0, T]$

Tùy vào thông tin đầu vào, bài toán được phân loại thành:

- Bài toán giá trị ban đầu (Initial Value Problem): xác định nghiệm từ điều kiện khởi đầu tại $t = 0$.
- Bài toán biên (Boundary Value Problem): xác định nghiệm thỏa mãn điều kiện tại biên không gian của miền tính toán.

Ví dụ một số phương trình phổ biến:

- Phương trình nhiệt:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Mô tả khuếch tán nhiệt, được dùng trong mô hình truyền nhiệt, dòng khuếch tán hóa học.

- Phương trình sóng:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Áp dụng cho sóng cơ học, dao động cấu trúc.

- Phương trình động lực học chất lỏng:

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \nabla u \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 u$$

Mô tả chuyển động của chất lỏng không nén, có độ nhớt. Karniadakis, G. E., Beskok, A., & Aluru, N. [2].

Các phương pháp truyền thống để giải phương trình vi phân bao gồm: phần tử hữu hạn, sai phân hữu hạn và thể tích hữu hạn. Tuy nhiên, những phương pháp này gặp khó khăn khi mở rộng sang không gian nhiều chiều hoặc khi dữ liệu đo thực nghiệm không đầy đủ.

2.3. Mạng nơ-ron nhân tạo

PINNs tiếp cận bài toán bằng cách dùng một mạng nơ-ron $u_\theta(x, t)$ để xấp xỉ nghiệm của hệ vi phân. Mạng học hàm ánh xạ:

$$(x, t) \mapsto u_\theta(x, t)$$

Mạng này được huấn luyện sao cho đầu ra của nó không chỉ phù hợp với dữ liệu đầu vào, mà còn thỏa mãn phương trình vật lý dưới dạng phần dư:

$$\mathcal{R}_{phys}(x, t; \theta) := \mathcal{N}[u_\theta](x, t) - f(x, t)$$

Sai số này được đưa vào hàm mất mát như một ràng buộc vật lý, bên cạnh sai số dữ liệu và điều kiện biên. Các đạo hàm của u_θ được tính qua vi phân tự động, cho phép mạng “chèn” vào biểu thức phương trình vật lý.

2.4. Hàm mất mát tổng quát

Hàm mất mát huấn luyện PINNs có cấu trúc tổng quát gồm ba phần:

$$\mathcal{L}(\theta) = \lambda_{data} \mathcal{L}_{data} + \lambda_{bc} \mathcal{L}_{bc} + \lambda_{phys} \mathcal{L}_{phys}$$

Trong đó:

- $\mathcal{L}_{data}$: sai số tại điểm dữ liệu quan sát.
- $\mathcal{L}_{bc}$: sai số tại các điều kiện biên hoặc khởi tạo.
- $\mathcal{L}_{phys}$: sai số giữa nghiệm mạng học được và phương trình vi phân.
- $\lambda_{data}, \lambda_{bc}, \lambda_{phys}$: trọng số điều chỉnh mức ưu tiên của từng thành phần.

3. Kiến trúc và nguyên lý hoạt động của PINNs

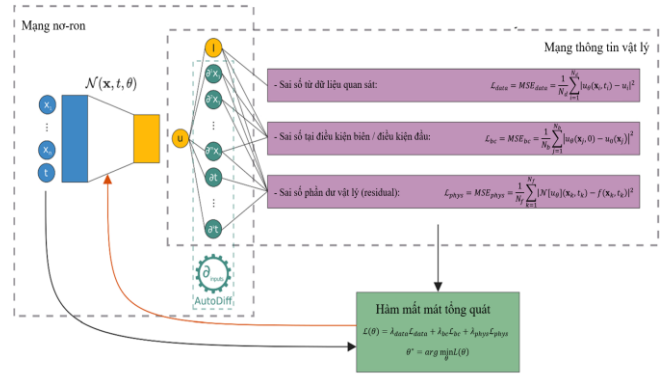
3.1. Kiến trúc tổng quát của PINNs

PINNs là một kiến trúc lai kết hợp giữa mạng nơ-ron và mô hình vật lý dưới dạng phương trình vi phân. Không giống các mô hình học sâu thuần túy chỉ học từ dữ liệu gán nhãn, PINNs được huấn luyện dựa trên ba nguồn thông tin: (i) dữ liệu thực nghiệm (nếu có), (ii) điều kiện biên/khởi tạo, và (iii) tri thức vật lý biểu diễn dưới dạng phương trình đạo hàm riêng (PDEs).

Ý tưởng này được giới thiệu lần đầu tiên trong công trình của Raissi et al. [1] – một trong những bài báo nền tảng đặt tên cho thuật ngữ “PINNs”:

Kiến trúc của PINNs có thể chia làm ba khối chức năng chính được thể hiện rõ trong Hình 1 bên dưới:

- Mạng nơ-ron dự đoán nghiệm vật lý $\mathcal{N}(x, t, \theta)$;
- Mạng thông tin vật lý: nơi đánh giá sai số theo từng nguồn: dữ liệu thực nghiệm, điều kiện biên và phần dư vật lý.
- Hàm mất mát huấn luyện tổng quát: là tổ hợp tuyến tính của các thành phần mất mát với các trọng số để cân bằng tầm quan trọng của từng thành phần.



Hình 1. Kiến trúc tổng quát của mạng PINNs

3.2. Mạng nơ-ron xấp xỉ nghiệm

Mạng nơ-ron $u_\theta(x, t)$, nhận đầu vào là cặp tọa độ không gian, thời gian (x, t) , và trả về đầu ra là nghiệm vật lý ước lượng u .

Biểu thức toán học được mã hoá trong hàm $\mathcal{N}(x, t; \theta)$, với:

- θ : tập trọng số của mạng nơ-ron;
- $x_1, \dots, x_n$: tọa độ không gian đầu vào;
- t : biến thời gian.

Đầu ra $u_\theta(x, t)$ sẽ được dùng để tính đạo hàm theo không gian và thời gian thông qua vi phân tự động, được biểu diễn trong sơ đồ với biểu tượng “ ∂ AutoDiff”.

3.2. Mạng thông tin vật lý

Từ đầu ra u_θ , hệ thống tính toán ba loại sai số chính:

3.2.1. Sai số từ dữ liệu quan sát:

$$\mathcal{L}_{data} = MSE_{data} = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} |u_\theta(x_i, t_i) - u_i|^2$$

Trong đó:

- N_d : số điểm dữ liệu thực nghiệm.
- u_i : giá trị đo tại (x_i, t_i) .

Mục tiêu: đây là sai số bình phương giữa đầu ra mạng và giá trị quan sát thực tế. Sai số này đảm bảo mạng học được mối quan hệ từ dữ liệu đầu vào đến giá trị vật lý quan sát.

3.2.2. Sai số tại điều kiện biên / điều kiện đầu:

$$\mathcal{L}_{bc} = MSE_{bc} = \frac{1}{N_b} \sum_{i=1}^{N_b} |u_\theta(x_i, 0) - u_0(x_i)|^2$$

Trong đó:

- N_b : số điểm biên hoặc thời điểm ban đầu.
- $u_0(x)$: nghiệm đã biết tại biên hoặc khởi tạo.

Mục tiêu: đây là sai số bình phương giữa giá trị dự đoán $u(x_i)$ và điều kiện biên/điều kiện ban đầu tại các điểm x_i . Sai số này giúp mạng học được điều kiện khởi tạo hoặc giá trị tại biên không gian. Mạng phải thỏa mãn các điều kiện ban đầu như nhiệt độ tại $t = 0$ hoặc điều kiện Dirichlet tại biên.

3.2.3. Sai số phần dư vật lý:

Đây là thành phần cốt lõi của PINNs, chính là tư tưởng "AI hiểu vật lý".

Giả sử phương trình đạo hàm riêng được mô tả bởi toán tử:

$$\mathcal{N}[u](x, t) = f(x, t)$$

thì phần dư là sai số giữa nghiệm mạng và nghiệm đúng:

$$\mathcal{R}_{phys}(x, t) := \mathcal{N}[u_{\theta}](x, t) - f(x, t)$$

Ví dụ: với phương trình nhiệt:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Rightarrow \mathcal{R}_{phys}(x, t) = \frac{\partial u_{\theta}}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 u_{\theta}}{\partial x^2}$$

Đạo hàm này được tính bằng vi phân tự động thông qua đồ thị tính toán của mạng nơ-ron. Hàm mất mát phần dư:

$$\mathcal{L}_{phys} = \frac{1}{N_f} \sum_{k=1}^{N_f} |\mathcal{R}_{phys}(x_k, t_k)|^2$$

Trong đó:

- N_f : số điểm đối chiếu vật lý, được chọn ngẫu nhiên trong toàn miền không gian, thời gian.

Mục tiêu: đây là phần dư của phương trình vi phân, kiểm tra mức độ tuân thủ vật lý của nghiệm mạng. Sai số này giúp mô hình học được nghiệm sao cho thỏa mãn phương trình vật lý tại mọi điểm không có nhãn.

3.3. Hàm mất mát tổng

Toàn bộ quá trình huấn luyện tối ưu tham số θ của mạng bằng cách tối thiểu hóa hàm mất mát tổng hợp:

$$\mathcal{L}(\theta) = \lambda_{data} \mathcal{L}_{data} + \lambda_{bc} \mathcal{L}_{bc} + \lambda_{phys} \mathcal{L}_{phys}$$

$$\theta^* = \arg \min_{\theta} \mathcal{L}(\theta)$$

Với λ_{data} , λ_{bc} , λ_{phys} : trọng số điều chỉnh mức ưu tiên của từng thành phần. Ví dụ nếu dữ liệu ít tăng λ_{data} . Nếu điều kiện biên quan trọng tăng λ_{bc} .

Raissi et al. [1] đã trình bày rõ cách xây dựng toán tử vi phân từ mạng nơ-ron thông qua vi phân tự động và tính toán hàm mất mát vật lý tại các điểm đối chiếu vật lý. Phương pháp này cho phép mô hình "học" phương trình vật lý mà không cần rời rạc hóa miền.

Theo Faroughi et al. [3], các phiên bản PINNs hiện đại còn thêm vào hàm mất mát biên (boundary condition loss) để xử lý các ràng buộc Dirichlet hoặc Neumann.

3.4. Tính đạo hàm bằng vi phân tự động

PINNs dựa vào cơ chế vi phân tự động (automatic differentiation) trong các thư viện như TensorFlow hoặc PyTorch để tính đạo hàm bậc cao. Điều này giúp giảm thiểu lỗi rời rạc và cho phép xây dựng hàm mất mát từ phương trình vật lý một cách linh hoạt. Ta có thể:

- Tính đạo hàm theo không gian và thời gian lên đầu ra của mạng.

- Áp dụng phương trình vật lý vào hàm mất mát mà không cần viết tay đạo hàm.
- Các đạo hàm này được sử dụng để kiểm tra phần dư vật lý của phương trình đạo hàm riêng.

Toscano et al. [4] cho rằng khả năng tự động tính đạo hàm chính là lý do khiến PINNs trở thành lựa chọn ưu việt so với phương pháp số truyền thống trong nhiều tình huống có điều kiện biên phức tạp.

3.5. Phân loại các nhánh phát triển và so sánh ưu, nhược điểm

3.5.1. Phân loại các nhánh PINNs

Các nhánh phát triển của PINNs có thể được phân loại thành ba hướng chính:

Bảng 2. Phân loại các nhánh phát triển PINNs

Nhánh phát triển	Tên gọi tiêu biểu	Mục tiêu cải tiến
Chia miền / phân vùng	XPINNs	Khả năng mở rộng không gian lớn, giảm chi phí cục bộ
Tăng khả năng hội tụ / thích nghi không gian	hp-VPINNs, gPINNs	Giải quyết bất thường gradient, tăng độ chính xác hội tụ
Học toán tử sâu / Fourier-based	FNO, PINO, MgFNO, PINTO	Tổng quát hóa trên miền mới, tăng tốc suy diễn

3.5.2. So sánh tổng hợp ưu và nhược điểm các nhánh của PI

Bảng 3. So sánh tổng hợp ưu và nhược điểm các nhánh của PINNs

Biến thể	Nguồn tham khảo	Ý tưởng cải tiến chính	Ưu điểm	Nhược điểm
PINNs (gốc)	Raissi et al. [1]	Ánh xạ hàm + phần dư	Đơn giản, dễ huấn luyện	Bất thường gradient, không mở rộng.
XPINNs	Jagtap et al. [5]	Phân chia miền tính toán thành các tiểu miền, mỗi tiểu miền huấn luyện một mạng riêng biệt, ghép lại bằng điều kiện tiếp nối.	Hỗ trợ song song hóa tốt. Khả năng mở rộng cho miền tính toán lớn.	Thiết kế giao tuyến và đồng bộ hoá phức tạp.

hp-VPINNs	Kharazmi et al. [6]	Kết hợp tính chính xác bộ kích thước lưới (h) và bậc nội suy (p), giúp mạng thích ứng với nghiệm có biến thiên nhanh hoặc nghiệm nhợt.	Tăng độ chính xác cho bài toán có đặc trưng cục bộ. Hội tụ nhanh hơn PINNs cổ điển.	Đòi hỏi chiến lược phân vùng và tối ưu thích nghi tinh vi.
gPINNs	Yu et al. [7]	Bổ sung các đạo hàm bậc cao vào hàm mất mát, giúp cải thiện dòng gradient và giảm tình trạng mất ổn định khi huấn luyện.	Ổn định gradient, tăng khả năng hội tụ.	Tăng chi phí tính toán do phải lấy đạo hàm nhiều bậc.
FNO/PINO/PINTO	- FN O: Li et al. [8] - PIN O: Chen, Xu, et al. [9] - PIN TO: Boya & Subramani [10]	Không học nghiệm điểm $u(x, t)$, mà học ánh xạ toán tử $\mathcal{G}: f \mapsto u$, cho phép tổng quát hóa trên toàn miền.	Suy diễn nhanh, đặc biệt phù hợp cho hệ tham số hóa. Tổng quát hóa tốt trên miền chưa thấy.	Cần lượng dữ liệu đầy đủ và phân phối tốt.
MgFNO	Guo & Li [11]	Mở rộng FNO với phương pháp đa lưới, kết hợp biến đổi Fourier và phân giải nhiều tỉ lệ, đạt độ chính xác vượt trội trong các bài toán vật lý không gian cao.	Sai số cực thấp so với PINNs cổ điển. Hiệu quả cao với các bài toán đa chiều, phức tạp.	Đòi hỏi tài nguyên GPU mạnh và tiền xử lý dữ liệu tốt.

3.5.3. So sánh định lượng giữa các biến thể

Bảng 4, so sánh định lượng các biến thể PINNs, tổng hợp từ các bài báo công bố chính thức trong giai đoạn

2019-2024. Bảng trình bày sai số tương đối chuẩn hóa (Relative L2 Error %) trên một số bài toán chuẩn trong cộng đồng PINNs: Burgers 1D, Darcy 2D, và Navier–Stokes 2D không nén. Các con số được lấy nguyên văn từ kết quả thực nghiệm trong các bài báo, giúp minh họa mức độ cải tiến qua từng biến thể.

Bảng 4. So sánh hiệu suất định lượng của các biến thể (Chỉ số: Sai số tương đối chuẩn hóa L2 – %)

Phương pháp	Burgers 1D	Darcy 2D	Navier–Stokes 2D	Nguồn tham khảo
PINNs (gốc)	0,067	–	6,99	Raissi et al. [1]
XPINNs	0,593	–	2,10	Jagtap et al. [5]
hp-VPINNs	–	0,88	1,47	Kharazmi et al. [6]
gPINNs	0,052	–	1,98	Yu et al. [7]
FNO	1,60	0,96	1,28	Li et al. [8]
PINO	0,742	–	–	Chen, Xu, et al. [9]
PINTO	0,48 (seen)	–	0,52	Boya & Subramani [10]
MgFNO	0,17	0,28	0,22	Guo & Li [11]

Tổng kết hiệu suất:

Bảng 5. So tổng hợp hiệu suất các biến thể của PINNs

Biến thể	Thế mạnh chính	Hiệu suất tổng quát
PINNs (gốc)	Bài toán 1D đơn giản	Tốt (1D), yếu (2D)
XPINNs	Miền lớn, song song	Vừa
hp-VPINNs	Nghiem biến thiên mạnh	Tốt (2D)
gPINNs	Ổn định gradient	Tốt (1D, 2D vừa phải)
FNO	Học toán tử	Trung bình
PINO	Mới, chưa đủ dữ liệu	Cần thêm kiểm chứng
PINTO	Tối ưu 2D chất lưu	Rất tốt
MgFNO	Tốt mọi chiều	Xuất sắc toàn diện

4. Phân tích ưu điểm, thách thức và hướng phát triển

4.1. Ưu điểm, thách thức khi triển khai

PINNs mang lại nhiều tiềm năng vượt trội với nhiều ưu điểm:

Thứ nhất, tận dụng tri thức vật lý hiệu quả: PINNs không yêu cầu lượng lớn dữ liệu thực nghiệm nhờ khai



thác tri thức từ phương trình vật lý, điều này đặc biệt hữu ích trong các lĩnh vực như khí tượng, địa vật lý, y sinh, nơi dữ liệu khan hiếm Cuomo et al. [12] và Raissi et al. [1].

Thứ hai, tự động đảm bảo tính đúng đắn vật lý: thông qua hàm mất mát vật lý, PINNs đảm bảo nghiệm luôn tuân thủ các định luật cơ bản, giúp loại bỏ các nghiệm "ảo" Raissi et al. [1] và Toscano et al. [4].

Thứ ba, linh hoạt với các dạng bài toán: có thể xử lý đồng thời nhiều phương trình và điều kiện biên ràng buộc Cuomo et al. [12].

Cuối cùng, giảm thiểu rời rạc hóa không gian, thời gian: nhờ sử dụng vi phân tự động, PINNs không cần xây lưới rời rạc như phương pháp phần tử hữu hạn, giúp tiết kiệm bộ nhớ De Ryck & Mishra [13].

Tuy nhiên, PINNs cũng đối mặt với nhiều thách thức kỹ thuật:

Thứ nhất, mất cân bằng trong hàm mất mát: huấn luyện PINNs là một quá trình tối ưu đa mục tiêu (dữ liệu, phương trình, và điều kiện biên), nếu cân chỉnh các trọng số λ không tốt có thể khiến mô hình hội tụ kém Toscano et al. [4], De Ryck & Mishra [13], Faroughi et al. [3].

Thứ hai, thời gian huấn luyện dài: do việc tính đạo hàm nhiều lần bằng vi phân tự động, đặc biệt với bài toán nhiều chiều Cuomo et al. [12], Kim, D et al. [14].

Thứ ba, hiện tượng bất thường gradient: do phải tính đạo hàm bậc cao qua nhiều lớp mạng, do đó có thể gây ra hiện tượng suy giảm hoặc bùng nổ gradient, ảnh hưởng đến độ hội tụ De Ryck & Mishra [13], Faroughi et al. [3].

Cuối cùng, khó khăn trong chọn điểm đối chiếu vật lý: chất lượng nghiệm phụ thuộc nhiều vào việc chọn các điểm này trong miền tính toán Cuomo et al. [12], De Ryck & Mishra [13].

4.2. Các hướng nghiên cứu tương lai

Các hướng nghiên cứu chính trong tương lai bao gồm: *PINNs thích ứng (Adaptive PINNs)*, sử dụng phương pháp lấy mẫu thích ứng để tự động chọn điểm đối chiếu vật lý tại vùng sai số cao Toscano et al. [12]; *chia miền tính toán (Domain decomposition)*, nhằm chia nhỏ miền bài toán thành các miền con (DD-PINNs) để huấn luyện song song hiệu quả De Ryck & Mishra [13]; *học chuyển giao (Transfer Learning)*, tận dụng kết quả từ bài toán đơn giản để khởi tạo mô hình phức tạp, giúp giảm thời gian huấn luyện Toscano et al. [4]; *PINNs cho hệ đa vật lý và đa tỉ lệ*, mở rộng mô hình để giải các hệ phức tạp có nhiều trường tương tác Kim, D et al. [14]; và *MgFNO*, phương pháp kết hợp FNO với thuật toán đa lưới V-cycle để khắc phục hiện tượng bất thường gradient.

5. Đề xuất ứng dụng tại Việt Nam

PINNs và các biến thể của nó không chỉ mang lại tiềm năng lý thuyết trong việc giải phương trình đạo hàm riêng, mà còn mở ra nhiều hướng ứng dụng thực tiễn trong bối cảnh Việt Nam, nơi thường gặp thách thức về dữ liệu khan hiếm, điều kiện biên không đầy đủ và hạ tầng tính toán hạn chế.

Dựa trên nhu cầu thực tế và các kết quả định lượng được tổng hợp ở các mục trên, chúng tôi đề xuất ba nhóm lĩnh vực ứng dụng ưu tiên cho PINNs và các biến thể nhẹ tại Việt Nam, cụ thể như sau:

5.1. Mô phỏng khí tượng, thủy văn

Việt Nam là quốc gia chịu ảnh hưởng nặng nề bởi biến đổi khí hậu, với các hiện tượng như mưa cực đoan, xâm nhập mặn, và lũ quét gia tăng về tần suất và cường độ. Các hệ thống cảnh báo sớm thường gặp khó khăn do:

- Thiếu dữ liệu quan trắc đều đặn theo không gian, thời gian;
- Mô hình vật lý truyền thống cần lưới tinh và chi phí tính toán lớn;
- Độ phân giải không gian còn thấp, đặc biệt ở vùng núi hoặc ven biển.

Trong bối cảnh này, các mô hình PINNs và các biến thể hoàn toàn có thể tích hợp để:

- Mô phỏng mực nước lũ, trường nhiệt độ mặt nước (SST), hoặc dòng chảy bề mặt;
- Dự báo lan truyền lũ trên nền dữ liệu đầu vào giới hạn;
- Tổng quát hóa theo điều kiện biên và địa hình biến đổi, điều mà PINNs gốc có thể thực hiện thông qua residual vật lý.

5.2. Mô hình địa chất, địa vật lý

Trong lĩnh vực thăm dò địa chất, việc xác định cấu trúc tầng đá từ tín hiệu sóng địa chấn (seismic wave) là một bài toán ngược điển hình, thường được giải bằng phương pháp nghịch đảo hoặc mô hình hóa sóng 2D/3D. Tuy nhiên, các phương pháp truyền thống thường gặp trở ngại do:

- Không đủ độ phân giải không gian, đặc biệt ở khu vực miền núi phía Bắc và Tây Nguyên;
- Mô hình hóa nghịch đảo toàn sóng (FWI) đòi hỏi siêu máy tính;
- Dữ liệu đo sóng có nhiễu và không liên tục.

PINNs, đặc biệt khi kết hợp với mô hình gPINNs hoặc hp-VPINNs, có thể:

- Mô phỏng lan truyền sóng địa chấn 2D;
- Học ánh xạ từ tín hiệu biên sang trường sóng trong lòng đất;
- Áp dụng trong bài toán ngược: suy đoán tốc độ lan truyền, mật độ hoặc các dị thường dưới lòng đất.

5.3. Y sinh học, mô phỏng lan truyền

Trong y học mô phỏng, đặc biệt với các ứng dụng phi truyền thống như:

- Mô hình khuếch tán thuốc trong mô học (tissue-based drug transport);
- Lan truyền bệnh truyền nhiễm (dịch tễ học PDEs-based như SEIR-PDEs);
- Mô phỏng dẫn truyền tín hiệu thần kinh hoặc dòng máu vi mạch;

PINNs cho phép mô phỏng các hệ PDEs phản ứng – khuếch tán (reaction–diffusion) trong trường hợp:

- Thiếu dữ liệu đầy đủ trên toàn mô hình sinh học;
- Điều kiện biên được đo đạc tại một vài lát cắt hoặc thời điểm;
- Nghiệm thật không thể truy cập trực tiếp (ví dụ: dẫn truyền thuốc trong mô sâu).

6. Kết luận và kiến nghị

6.1. Kết luận

PINNs là một trong những hướng tiếp cận tiên tiến trong lĩnh vực học máy khoa học, cho phép kết hợp hiệu quả giữa mô hình học sâu và tri thức vật lý. Với khả năng tích hợp các phương trình vi phân trực tiếp vào quá trình huấn luyện mạng nơ-ron, PINNs đã mở ra một lối đi mới trong việc giải quyết các bài toán mô phỏng vật lý truyền thống mà không cần đến rời rạc hóa hoặc lưới tính toán phức tạp.

Tài liệu tham khảo

1. Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 378, 686-707.
2. Karniadakis, G., Beskok, A., & Aluru, N. (2006). *Microflows and nanoflows: fundamentals and simulation* (Vol. 29). Springer Science & Business Media.
3. Faroughi, S. A., Pawar, N., Fernandes, C., Raissi, M., Das, S., Kalantari, N. K., & Mahjour, S. K. (2022). Physics-guided, physics-informed, and physics-encoded neural networks in scientific computing. *arXiv preprint arXiv:2211.07377*.
4. Toscano, J. D., Cueto, E., & González, D. (2024). From PINNs to PIKANs: Recent advances in physics-informed machine learning. *arXiv preprint arXiv:2410.13228*.
5. Jagtap, A. D., & Karniadakis, G. E. (2020). Extended physics-informed neural networks (XPINNs): A generalized space-time domain decomposition based deep learning framework for nonlinear partial differential equations. *Communications in Computational Physics*, 28(5).
6. Kharazmi, E., Zhang, Z., & Karniadakis, G. E. (2021). hp-VPINNs: Variational physics-informed neural networks with domain decomposition. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 374, 113547.
7. Yu, J., Lu, L., Meng, X., & Karniadakis, G. E. (2022). Gradient-enhanced physics-informed neural networks for forward and inverse PDE problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 393, 114823.
8. Li, Z., Kovachki, N., Azizzadenesheli, K., Liu, B., Bhattacharya, K., Stuart, A., & Anandkumar, A. (2020). Fourier neural operator for parametric partial differential equations. *arXiv preprint arXiv:2010.08895*.
9. Chen, X., Yongjie, F. U., Liu, S., & Di, X. (2023, July). Physics-informed neural operator for coupled forward-backward partial differential equations. In *1st Workshop on the Synergy of Scientific and Machine Learning Modeling@ ICML2023*.

Bài báo này đã trình bày tổng quan về kiến trúc, nguyên lý hoạt động, ưu điểm, thách thức và xu hướng phát triển của PINNs. Các nghiên cứu gần đây cho thấy PINNs không chỉ giải quyết được các bài toán trực tiếp và bài toán nghịch đảo trong môi trường dữ liệu khan hiếm, mà còn có tiềm năng lớn trong các lĩnh vực như mô phỏng đa tỉ lệ, hệ thống đa vật lý, và bài toán nghịch đảo trong thực tiễn.

6.2. Kiến nghị

Tuy nhiên, để PINNs có thể được ứng dụng rộng rãi hơn trong công nghiệp và nghiên cứu, các vấn đề như tối ưu hóa hiệu quả, lựa chọn điểm đối chiếu vật lý, chuẩn hóa hàm mất mát và giảm thời gian huấn luyện cần tiếp tục được quan tâm. Những hướng nghiên cứu như lấy mẫu thích ứng, phân chia miền, và phát triển các biến thể như XPINNs, hp-VPINNs, MgFNO đang mở ra nhiều triển vọng.

Tại Việt Nam, PINNs là một chủ đề còn mới nhưng đầy tiềm năng, đặc biệt trong các lĩnh vực như mô hình khí tượng, thủy văn, địa chất, môi trường và y sinh học. Việc tiếp cận, nghiên cứu và ứng dụng PINNs sẽ giúp nâng cao năng lực mô phỏng, dự báo và ra quyết định của các hệ thống khoa học kỹ thuật trong nước.

Lời cảm ơn

Chúng tôi xin cảm ơn Trường Đại học Nguyễn Tất Thành, Thành phố Hồ Chí Minh đã hỗ trợ cho nghiên cứu này.

- 10.Boya, S. K., & Subramani, D. N. (2025). PINTO: Physics-informed transformer neural operator for learning generalized solutions of partial differential equations for any initial and boundary condition. *Computer Physics Communications*, 109702.
- 11.Guo, Z. H., & Li, H. B. (2024). MgFNO: Multi-grid Architecture Fourier Neural Operator for Parametric Partial Differential Equations. *arXiv preprint arXiv:2407.08615*.
- 12.Cuomo, S., Di Cola, V. S., Giampaolo, F., Raissi, M., Piccialli, F., & Calabrò, F. (2022). Scientific machine learning through physics-informed neural networks: Where we are and what's next. *arXiv preprint arXiv:2201.05624*.
- 13.De Ryck, T., & Mishra, S. (2024). Numerical analysis of physics-informed neural networks and related models in physics-informed machine learning. *Acta Numerica*, 33, 633-713.
- 14.Kim, D., & Lee, J. (2024). A review of physics-informed neural networks for multiscale analysis and inverse problems. *Multiscale Science and Engineering*, 6(1), 1-11.

An Overview of Physics-Informed Neural Networks

Thien Tran Chau Thanh*

Faculty of Information Technology, Nguyen Tat Thanh University, Ho Chi Minh City.

Email: *tctthien@ntt.edu.vn

Abstract In recent years, Physics-Informed Neural Networks (PINNs) have emerged as a promising approach in scientific computing by integrating artificial intelligence with traditional physics-based models. PINNs incorporate differential equations (ODEs, PDEs) directly into the training process of neural networks, enabling the construction of models that are both physically consistent and capable of handling real-world data.

This paper provides a comprehensive overview of PINNs, including their theoretical foundations, network architecture, training mechanisms, and typical applications such as solving partial differential equations, inverse modeling, dynamical systems, and multiphysics simulations. It also discusses key advantages, current technical challenges, and future research directions, including adaptive PINNs, domain decomposition strategies, and advanced variants such as XPINNs, hp-VPINNs, and MgFNO.

In conclusion, PINNs represent a powerful tool for problems involving limited data but requiring high physical fidelity. Their development and application in Vietnam are both timely and essential, contributing to the advancement of scientific computing and artificial intelligence research.

Keywords Physics-Informed Neural Networks, physical modeling, differential equations, scientific machine learning, physical simulation, inverse problems.