

融合多物理损失函数的偏微分方程智能求解方法

任睿轩,黎铁军,金长松,陈新海*

(国防科技大学 计算机学院, 湖南 长沙 410073)

摘要:在传统物理信息神经网络(physics-informed neural network, PINN)的基础上,通过融合维度扩展和多物理损失函数,提出了两种改进的偏微分方程求解方法,分别是:基于改进多层感知机的维度扩展物理信息神经网络(expanding physics-informed neural network with modified multi-layer perceptron, EmPINN)和多物理损失函数物理信息神经网络(diverse loss function physics-informed neural network, DL-PINN)。EmPINN 创新性地提出了一种带有残差连接和维度扩展机制的神经网络结构,DL-PINN 在 EmPINN 的基础上,将维度扩展机制、梯度增强物理信息与变分物理信息相结合,更有效地融入多种物理信息,进一步提高神经网络的拟合能力。实验结果表明,所提出的方法优于传统的物理信息神经网络方法,在不同偏微分方程案例上实现了最高两个数量级的求解精度提升。

关键词:偏微分方程;物理信息神经网络;维度扩展;多物理损失函数

中图分类号:TP391 **文献标志码:**A **文章编号:**1001-2486(2025)05-246-08

论文
拓展

Intelligent solution method integrating diverse physics loss functions for solving partial differential equations

REN Ruixuan, LI Tiejun, JIN Changsong, CHEN Xinhai*

(College of Computer Science and Technology, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China)

Abstract: Building upon the traditional PINN (physics-informed neural network), two improved methods for solving partial differential equations, EmPINN (expanding physics-informed neural network with modified multi-layer perceptron) and DL-PINN (diverse loss function physics-informed neural network), were presented by incorporating dimension expansion and diverse physics loss functions. EmPINN innovatively introduced a neural network structure with residual connections and a dimension-expanding mechanism. DL-PINN, based on EmPINN, combined the dimension-expanding mechanism with gradient enhancement and variational physical information to incorporate multiple physical information more effectively and improved the fitting capability of the neural network. Experimental results demonstrate that the proposed methods outperform traditional PINN method, improve solution accuracy by up to two orders of magnitude on different partial differential equation cases.

Keywords: partial differential equations; physics-informed neural network; dimension-expanding; diverse physics loss functions

偏微分方程(partial differential equations, PDEs)广泛应用于材料科学、航空航天和流体力学等科学和工程领域。当前 PDEs 主要采用数值计算方法进行求解,例如有限差分、有限元和有限体积方法等。这些数值计算方法需要将 PDEs 的求解域进行离散化,然后在网格节点上求解 PDEs。然而,随着方程维度的增加,网格节点的数量呈指数级增长,所导致的维度灾难使得采用

传统数值计算方法求解复杂 PDEs 时会面临计算开销大、计算流程复杂等问题。因此,研究高效的 PDEs 代理求解方法成了研究热点。

人工智能(artificial intelligence, AI)作为一种新的技术驱动力,正在推动各个行业的变革。随着可用数据和计算资源的快速增长,深度学习等 AI 技术已广泛用于科学计算的各个领域,如网格生成^[1]、网格质量评估^[2]和涡旋检测^[3]。目前,

收稿日期:2023-09-25

基金项目:国家自然科学基金资助项目(62072464)

第一作者:任睿轩(2000—),男,山东济南人,硕士研究生, E-mail: renruixuan18@nudt.edu.cn

*通信作者:陈新海(1995—),男,四川眉山人,助理研究员,博士, E-mail: chenxinhai16@nudt.edu.cn

引用格式:任睿轩,黎铁军,金长松,等.融合多物理损失函数的偏微分方程智能求解方法[J].国防科技大学学报,2025,47(5):246-253.

Citation: REN R X, LI T J, JIN C S, et al. Intelligent solution method integrating diverse physics loss functions for solving partial differential equations[J]. Journal of National University of Defense Technology, 2025, 47(5): 246-253.

基于深度学习的 PDEs 求解方法已成为 PDEs 代理求解方法的热门领域。与数值方法将求解域离散化为网格单元,然后迭代求解 PDEs 的方式不同,基于深度学习的方法提供了一种无网格的偏微分方程求解方法。通过将物理信息嵌入神经网络的损失函数中,经过训练的神经网络能够有效地求解 PDEs。将神经网络用于求解 PDEs 的想法最早源于 1998 年 Lagaris 等^[4]的工作。而后 Raissi 等^[5]在研究高斯过程时应用了物理领域的先验知识,他们发现并指出,在与数学物理相关的许多问题中,有大量的先验知识,尚未在深度学习中得到应用。这些先验知识如底层物理定律或经验规律,能够作为一个正则化机制,将问题的解约束在一个更小的搜索空间。这种加入物理领域先验知识的深度学习方法被称为物理信息学习。随着自动微分 (automatic differentiation, AD) 技术^[6]的出现,物理信息学习可以被应用于神经网络,从而产生了物理信息神经网络^[7] (physics-informed neural network, PINN)。该方法将 PDEs 的残差项和边界条件项添加到神经网络的损失函数中,使用自动微分技术计算 PDEs 中的微分项,优化损失函数以获得最佳参数,完成训练即可求解 PDEs。PINN 已成功应用于解决不同领域的多种问题,例如光学^[8]、流体力学^[9]和生物医学^[10]。这些研究为 PINN 在解决复杂科学问题上的应用提供了有力的支持,并丰富了其在各研究领域的应用。

对 PINN 进行改进,提高它求解 PDE 的精确度和训练速度,是一个重要的研究方向。因此出现了一系列相关研究,例如可训练激活函数物理信息神经网络^[11]、变分物理信息神经网络^[12] (hp-variational physics informed neural network, hp-VPINN)、梯度增强物理信息神经网络^[13] (gradient-enhanced physics informed neural network, gPINN)、梯度优化物理信息神经网络^[14]、域分解物理信息神经网络^[15]以及物理信息神经网络与迁移学习^[16]的结合。这些方法主要聚焦于更好地利用物理信息,但对于更好地将神经网络的拟合能力与物理信息相结合的研究不多。

本文融合维度扩展和多物理损失函数,提出了两种偏微分方程智能求解方法——基于改进多层感知机 (multi-layer perceptron, MLP) 的维度扩展物理信息神经网络 (expanding physics-informed neural network with modified multi-layer perceptron, EmPINN) 和多物理损失函数物理信息神经网络 (diverse loss function physics-informed neural network, DL-PINN),以提高 PINN 方法的精度,并

且更好地将神经网络的拟合能力与物理信息相结合。EmPINN 的核心在于维度扩展机制。该机制引入了一个在特征变换层中执行的维度扩展操作,它将低维求解域映射到高维空间。此外,EmPINN 还使用了带有残差连接的 MLP。为了更好地利用物理信息,本文将维度扩展机制、梯度增强与变分物理信息相结合,从而形成 DL-PINN 方法。DL-PINN 能够更好地将 PDEs 蕴含的物理信息融入神经网络求解的过程中,进一步提高神经网络的拟合能力。

1 问题背景

1.1 问题描述

考虑非线性偏微分方程系统的一般形式如下:

$$u_t + \mathcal{A}[u] = 0, x \in \Omega, t \in [0, T] \quad (1)$$

$$u + \mathcal{B}[u] = g(t, x, \dots), x \in \partial\Omega \quad (2)$$

$u(x, t)$ 是 PDEs 的解, $\mathcal{A}[u] = uu_x - \gamma u_{xx}$ 和 $\mathcal{B}[u]$ 是非线性算子。式 (2) 表示初始条件 (initial condition, IC) 和边界条件 (boundary condition, BC)。确定了 PDEs 和对应的 BC 和 IC, 才能够对问题进行求解。

1.2 物理信息神经网络

定义深度神经网络 $NN(x, t; \theta)$ 对解函数 $u(x, t)$ 进行近似, 输入是时空坐标 (x, t) , 输出是 Burgers 方程的解 $u_{NN}(x, t)$, θ 是神经网络中所有可以训练的参数所构成的集合。定义神经网络 $f(x, t; \theta) = u_t + uu_x - \gamma u_{xx}$ 对 PDEs 进行拟合, 将 PDEs 视作值恒为零的函数, 使用自动微分技术可以对 $f(x, t; \theta)$ 进行计算。PINN 的原理如图 1 所示。

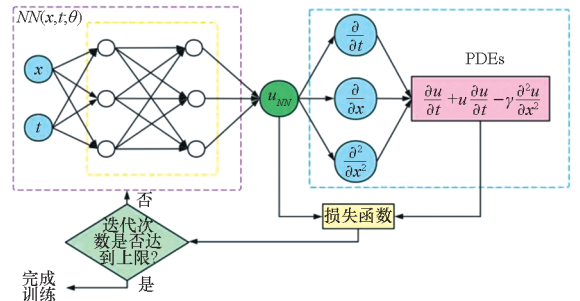


图 1 PINN 原理图

Fig. 1 The schematic diagram of PINN

为了优化神经网络,定义损失函数如下:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\theta; T) &= \mathcal{L}_b(\theta; T_b) + \mathcal{L}_f(\theta; T_f) \\ &= \frac{1}{N_b} \sum_{i=1}^{N_b} |u(t_b^i, x_b^i) - u_b^i|^2 + \frac{1}{N_f} \sum_{i=1}^{N_f} |f(t_f^i, x_f^i)|^2 \end{aligned} \quad (3)$$

式中, T_b 是边界点集, T_f 是求解域内使用拉丁超立方采样 (Latin hypercube sampling, LHS) 方法^[17] 随机采样的点集, N_b 是边界条件点的个数, N_f 是采样点的个数, u_b^i 是满足边界条件的函数值。使用随机采样点有助于避免固定采样点引入的偏差, 同时也使得模型能够更好地适应整个求解域的特征。

物理信息神经网络方法将 PDEs 编码进损失函数中, 通过对神经网络进行训练, 使神经网络的输出满足底层物理定律, 从而获得 PDEs 的数值解。与传统神经网络相比, 物理信息神经网络方法的优势在于无须使用大量带有标签的数据来进行训练, 并且具有很强的泛化能力。

2 研究方法

2.1 基于改进多层感知机的维度扩展物理信息神经网络

基于改进多层感知机的维度扩展物理信息神经网络提出了一种带有残差连接和维度扩展机制的神经网络结构: 在神经网络中引入一个特征变换层^[18], 执行扩展维度的操作; 并且在常规的 MLP 中引入残差连接^[19] 来对其进行改进, 引入残差连接后的 MLP 记为 mMLP。

首先, 以输入特征 (x, y) 为例, 经过特征变换层后, (x, y) 会扩展维度, 变成 (x, y, x^2, y^2) 。维度扩展机制定义了一个从输入 $X_{in} \in \mathbb{R}^2$ 到输出 $X \in \mathbb{R}^4$ 的映射:

$$X_{in}(x, y) \rightarrow X(x, y, x^2, y^2) \quad (4)$$

经过这个特征变换后, 求解域从二维的输入空间映射到了四维空间。Bengio 等^[20] 的研究表明, 神经网络在学习高维数据表示方面具有更强的能力, 并强调了神经网络在求解高维问题方面的潜力。因此, 使用神经网络在新的四维空间中进行训练和优化, 更容易对 PDEs 的解函数进行拟合。

其次, 这种方法使用了 mMLP, 这样做的好处是能够通过残差连接增强隐藏状态。隐藏层数为 L 的 mMLP 的网络架构由以下公式定义:

$$H^{(1)} = W_1 X + b_1 \quad (5)$$

$$H^{(i+1)} = W_i H^{(i)} + b_i + H^{(i)}, 1 < i < L \quad (6)$$

$$f_\theta(X) = WH^{(L)} + b \quad (7)$$

通过在神经网络结构中引入维度扩展和残差连接。EmPINN 可以更充分地利用神经网络的拟合能力, 提高 PINN 在求解 PDEs 时的精确度。EmPINN 方法只对神经网络的结构进行了改进,

因此它的损失函数定义与 PINN 是类似的。EmPINN 的原理图如图 2 所示。

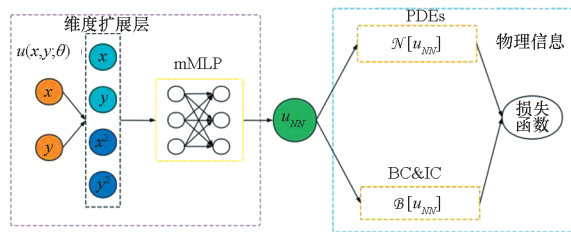


图 2 EmPINN 原理图

Fig. 2 The schematic diagram of EmPINN

2.2 多物理损失函数物理信息神经网络

已有的方法如 hp-VPINN^[12] 和 gPINN^[13], 都是在损失函数方面对 PINN 进行改进。hp-VPINN 将 PDEs 的变分形式加入损失函数中, gPINN 将 PDEs 的微分形式加入损失函数中, 并且 hp-VPINN 包含着将方程的定义域分解的思想, 对问题分而治之, 能够对每个区域进行单独的超参数初始化和训练。

在网络结构和损失函数上的不同改进, 是可以进行结合的, 因此, 在上文提出的 EmPINN 的基础上, 结合梯度增强和变分物理信息思想, 提出了多物理损失函数物理信息神经网络 DL-PINN。DL-PINN 可以更好地将神经网络的拟合能力与 PDEs 蕴含的物理信息相结合, 提高物理信息神经网络求解偏微分方程的准确度。DL-PINN 的原理图如图 3 所示。

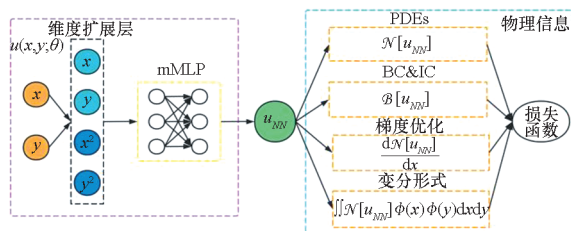


图 3 DL-PINN 的原理图

Fig. 3 The schematic diagram of DL-PINN

以式 (1) 给出的方程为例, DL-PINN 方法的损失函数定义如下:

$$\mathcal{L}(\theta; T) = \lambda_b \mathcal{L}_b(\theta; T_b) + \lambda_f \mathcal{L}_f(\theta; T_f) + \mathcal{L}_g(\theta; T_g) + \lambda_v \mathcal{L}_v(\theta; T_v) \quad (8)$$

$$\mathcal{L}_b(\theta; T_b) = \frac{1}{N_b} \sum_{i=1}^{N_b} |u_{NN}(x_b^i, t_b^i) - u_b^i|^2 \quad (9)$$

$$\mathcal{L}_f(\theta; T_f) = \frac{1}{N_f} \sum_{i=1}^{N_f} |u_{NN_f} + u_{NN} u_{NN_x} - \gamma u_{NN_{xx}}(x_f^i, t_f^i)|^2 \quad (10)$$

$$\mathcal{L}_g(\theta;T_g)=\sum_{g_i=1}^dw_{g_i}\mathcal{L}_{g_i}(\theta;T_{g_i})=\sum_{g_i=1}^dw_{g_i}\frac{\partial \mathcal{L}_f}{\partial x_{g_i}}\tag{11}$$

$$\mathcal{L}_v(\theta;T_v)=\sum_{k_1,k_2=1}^{K_1K_2}\sum_{e_x=1}^{N_{el_x}}\sum_{e_t=1}^{N_{el_t}}\iint N[u_{NN}]\phi_{k_1}^{(e_x)}(x)\phi_{k_2}^{(e_t)}(t)dxdt\tag{12}$$

其中: T_g 是求解域内随机采样的点集; T_v 是求积点集; N_{el_x} 和 N_{el_t} 是在 x 维度和 t 维度上分解的求解域的个数; $\phi(x)$ 和 $\phi(t)$ 分别是在 x 维度和 t 维度上的测试函数,选取 Legendre 多项式的组合作为测试函数; K_1 和 K_2 分别是 x 维度和 t 维度中的测试函数数量。后续实验中, N_{el_x} 和 N_{el_t} 设置为 2, K_1 和 K_2 设置为 5。需要注意的是,变分残差的构建不是唯一的,因为可以利用 Jacobi 多项式的不同性质来进行积分并推导出各种公式。使用 Legendre 多项式的递归公式来计算变分残差,求积点的数量为 50。为了更好地训练模型,每个损失项都分配了不同的权重,这样的方式能够更好地对模型进行训练^[19]。 w_{g_i} 是每个 $\mathcal{L}_{g_i}(\theta;T_{g_i})$ 微分损失项的权重, λ_b 是边界损失项的权重, λ_f 是 PDEs 残差损失项的权重, λ_v 是 PDEs 残差积分损失项的权重。

3 结果与讨论

本节研究并比较 EmPINN 方法和 DL-PINN 方法与一些常用的基于深度神经网络的 PDEs 求解方法的性能,包括 PINN、gPINN 和 hp-VPINN 等,所有实验都在相同的实验环境下进行,每个示例使用的超参数在表 1 中进行了说明。在所有的示例中,使用 tanh 作为激活函数,学习率为 0.001。为了最小化损失函数,使用自适应矩估计 (adaptive moment estimation, Adam) 优化器与限制内存的拟牛顿法 - 边界约束 (limited-memory broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno box constraints, L-BFGS-B) 优化器^[21] 相结合的优化策略:先使用 Adam 优化器应用于随机梯度下降训练,再使用 L-BFGS-B 优化器对结果进行微调。在训练过程中将 TensorFlow 和 Numpy 的随机种子设置为 1 234,以确保实验结果的可重复性。

评判求解的准确度,一般会以式 (13) 给出的相对 L2 误差作为标准。

$$L^2_{\text{error}}=\frac{\|u_{\text{pred}}-u_{\text{exact}}\|_2}{\|u_{\text{exact}}\|_2}\tag{13}$$

式中: u_{exact} 是方程数值解,一般由数值方法求解得到,可作为准确解; u_{pred} 是新方法 (神经网络) 的预

测解。

表 1 实验中使用的超参数					
Tab. 1 Hyperparameters used in this study					
问题名称	网络深度/层	网络宽度/单元	N_f /个	N_b /个	最大迭代次数
Poisson 方程	3	20	50	80	500
Burgers 方程	5	40	5 000	100	10 000

文中的所有代码都基于 Python 3.7.4 和 TensorFlow 1.14.0。所有示例的数值实验都在装有第十代 Intel (R) Core (TM) i7 - 10510U @ 1.80 GHz 处理器和 16.0 GB 内存的笔记本电脑上运行。

3.1 Poisson 方程实验结果

Poisson 方程是一个常见于静力学、机械工程和理论物理的偏微分方程,也是微电子器件三大基本方程之一,应用非常广泛。考虑求解二维 Poisson 方程,方程形式如下:

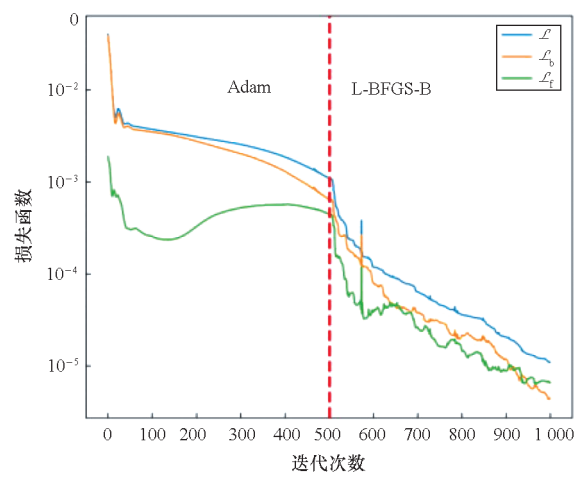
$$\nabla^2 u(x,y)=f(x,y),(x,y)\in[-1,1]\times[-1,1]\tag{14}$$

为了便于验证,求解齐次方程,即 $f(x,y)=0$ 在整个定义域上恒成立。给出方程的解析解如下:

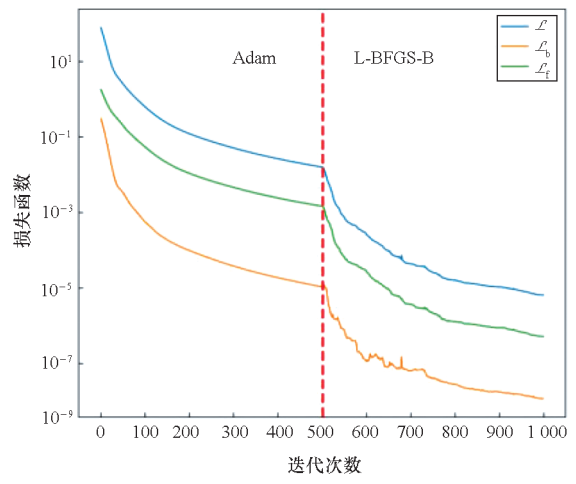
$$u_{\text{exact}}(x,y)=\frac{2\times(1+y)}{(3+x)^2+(1+y)^2}\tag{15}$$

使用 EmPINN 和 DL-PINN 等方法求解 Poisson 方程时,损失项的权重 λ_b 、 λ_f 和 λ_v 都被设置为 10, w_x 和 w_y 被设置为 0.001。图 4(a)、图 4(b) 和图 4(c) 分别展示了使用 50 个训练点求解 Poisson 方程时, PINN、EmPINN 和 DL-PINN 方法的损失函数收敛情况。每个方法都在 Adam 优化器下进行了 500 次优化,并由 L-BFGS-B 优化器进行了微调。比较图 4(a) 和图 4(b),注意到无论使用哪种优化器进行训练,EmPINN 方法的表现都更好。图 4(c) 展示了 DL-PINN 方法的损失函数,在 Adam 优化器的优化阶段,损失项的变化更平稳,而使用 L-BFGS-B 优化器时,损失项的变化非常大,收敛速度较快。

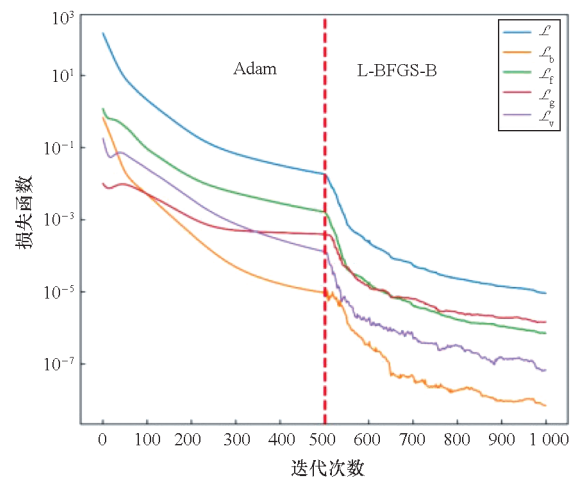
图 5(a) 和图 5(b) 分别展示了 Poisson 方程的准确解和由 DL-PINN 给出的预测解,这两幅图像非常接近。图 5(c) 展示了 DL-PINN 方法求解 Poisson 方程时,逐点绝对误差的分布在 $O(10^{-3})\sim O(10^{-4})$ 范围。可以明显看出,DL-PINN 方法非常有效地求解了 Poisson 方程。



(a) PINN 求解 Poisson 方程的损失函数
(a) Loss function of PINN for solving Poisson equation



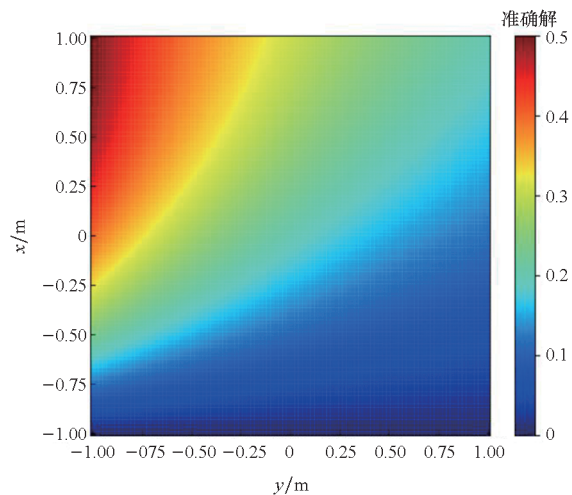
(b) EmPINN 求解 Poisson 方程的损失函数
(b) Loss function of EmPINN for solving Poisson equation



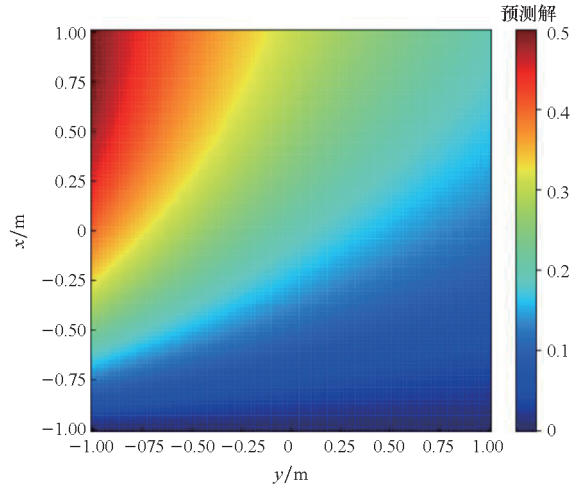
(c) DL-PINN 求解 Poisson 方程的损失函数
(c) Loss function of DL-PINN for solving Poisson equation

图 4 PINN、EmPINN 和 DL-PINN 求解 Poisson 方程的损失函数图像(y 轴是对数刻度)

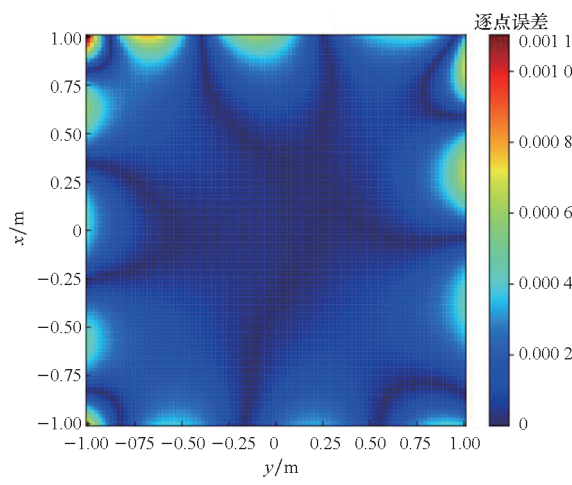
Fig. 4 Loss function of PINN, EmPINN and DL-PINN (on the log scale) for solving Poisson's equation



(a) Poisson 方程的准确解
(a) Exact solution of Poisson equation



(b) DL-PINN 方法求解 Poisson 方程的预测解
(b) Predicted solution of Poisson equation given by DL-PINN



(c) DL-PINN 方法求解 Poisson 方程的预测解与 Poisson 方程准确解的逐点绝对误差
(c) Point-wise absolute error of DL-PINN for solving Poisson equation

图 5 Poisson 方程的准确解与 DL-PINN 方法求解 Poisson 方程的预测解的比较

Fig. 5 Comparison between the exact solution of Poisson equation and the predicted solution given by DL-PINN

表 2 展示了使用 EmPINN 和 DL-PINN 方法与使用其他方法求解 Poisson 方程的比较结果。为了确保在不同方法之间进行公平比较,所有实验均使用了相同的超参数,如表 1 所示。实验结果显示,本文提出的方法 EmPINN 和 DL-PINN 求解 Poisson 方程的相对 L2 误差比 PINN、gPINN 和 hp-VPINN 低两个数量级,而 DL-PINN 方法的表现最佳,相对 L2 误差为 3.20×10^{-5} 。

表 2 不同方法求解 Poisson 方程的相对 L2 误差比较

Tab. 2 Comparison of the relative L2-error of different methods on Poisson equation	
求解 Poisson 方程的方法	相对 L2 误差
PINN	2.28×10^{-3}
gPINN	2.16×10^{-3}
hp-VPINN	1.26×10^{-3}
EmPINN	6.70×10^{-5}
DL-PINN	3.20×10^{-5}

3.2 Burgers 方程实验结果

Burgers 方程是一个模拟冲击波的传播和反射的非线性偏微分方程,在流体力学、气体动力学等领域都有应用,具有很好的研究价值。本文求解的 Burgers 方程形式如下:

$$N[u] = u_t + uu_x - \left(\frac{0.01}{\pi}\right)u_{xx} = 0, (x, t) \in (0, 1) \times (0, 1]$$

(16)

$$u(x, 0) = -\sin(\pi x), x \in (0, 1)$$

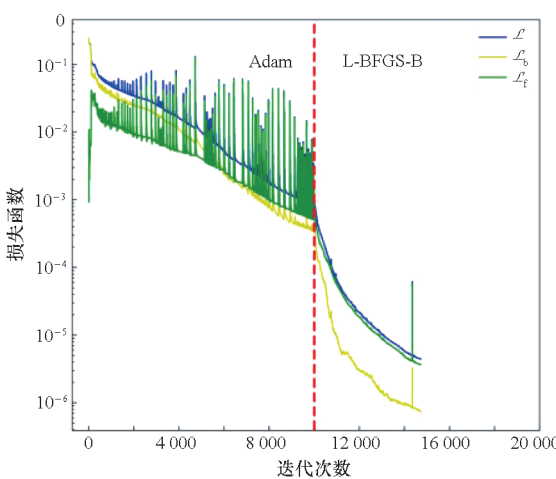
(17)

$$u(-1, t) = u(1, t) = 0$$

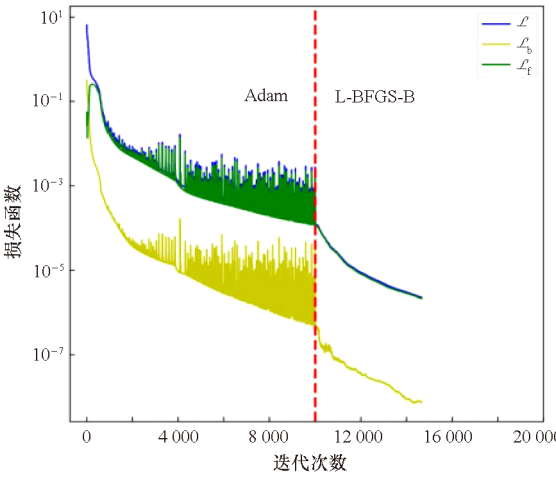
(18)

使用 EmPINN 和 DL-PINN 等方法求解 Burgers 方程时,损失项的超参数 λ_b 被设置为 20, λ_f 和 λ_v 都被设置为 1, w_x 和 w_t 都被设置为 0.001。图 6(a)、图 6(b)和图 6(c)分别展示了使用 5 000 个训练点求解 Burgers 方程时, PINN、EmPINN 和 DL-PINN 的损失函数收敛情况。每个方法都在 Adam 优化器下进行了 10 000 次优化,并由 L-BFGS-B 优化器进行了微调。DL-PINN 在 Adam 优化器的优化阶段,损失函数的曲线剧烈振荡,但损失函数值在整体上减小较少,这表明 Adam 优化器的训练效果有限。DL-PINN 在 L-BFGS-B 优化器优化阶段,损失函数的下降更为明显,在 17 000 次迭代左右,每个损失项趋于收敛。

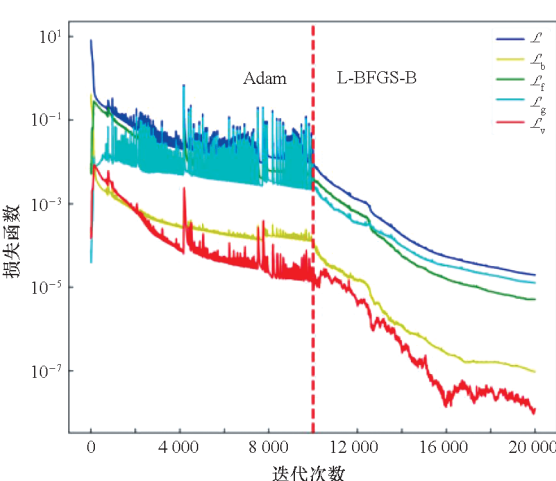
图 7(a)和图 7(b)分别展示了 Burgers 方程的准确解和由 DL-PINN 给出的预测解,图 7(c)显示了 DL-PINN 方法求解 Burgers 方程的逐点绝对误差在 $O(10^{-3})$ 范围内。DL-PINN 方法非常有



(a) PINN 求解 Burgers 方程的损失函数
(a) Loss function of PINN for solving Burgers' equation



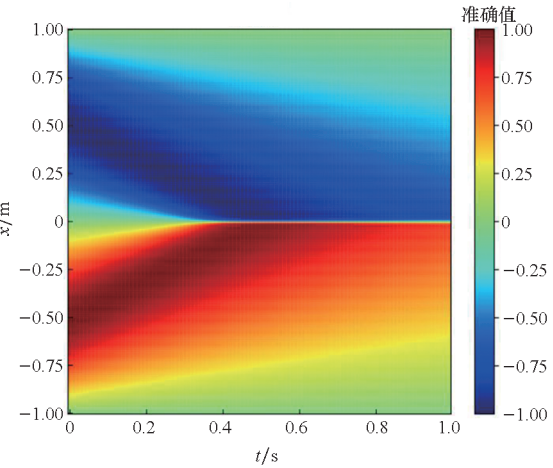
(b) EmPINN 求解 Burgers 方程的损失函数
(b) Loss function of EmPINN for solving Burgers' equation



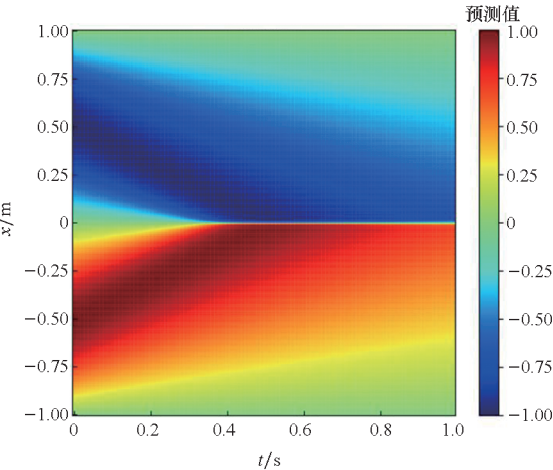
(c) DL-PINN 求解 Burgers 方程的损失函数
(c) Loss function of DL-PINN for solving Burgers' equation

图 6 PINN、EmPINN 和 DL-PINN 求解 Burgers 方程的损失函数图像(y 轴是对数刻度)

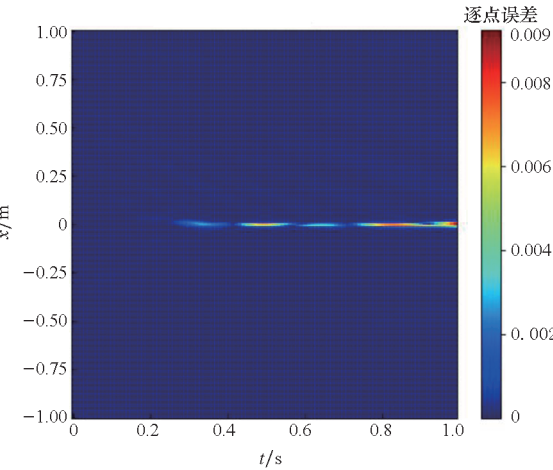
Fig. 6 Loss function of PINN, EmPINN and DL-PINN (on the log scale) for solving Burgers' equation



(a) Burgers 方程的准确解
(a) Exact solution of Burgers' equation



(b) DL-PINN 方法求解 Burgers 方程的预测解
(b) Predicted solution of Burgers' equation given by DL-PINN



(c) DL-PINN 方法求解 Burgers 方程的预测解与 Burgers 方程准确解的逐点绝对误差
(c) Point-wise absolute error of DL-PINN for solving Burgers' equation

图 7 Burgers 方程的准确解与 DL-PINN 方法求解 Burgers 方程预测解的比较
Fig.7 Comparison between the exact solution of Burgers' equation and the predicted solution given by DL-PINN

效地求解了 Burgers 方程。

表 3 展示了使用 EmPINN 和 DL-PINN 方法与使用其他方法求解 Burgers 方程的比较结果。结果显示,在求解 Burgers 方程时,EmPINN 方法的相对 L2 误差为 3.78×10^{-3} ,DL-PINN 方法的表现最好,相对 L2 误差为 3.44×10^{-4} ,这个值比 PINN、gPINN 和 hp-VPINN 等方法低两个数量级,比 EmPINN 方法低一个数量级。

表 3 不同方法求解 Burgers 方程的相对 L2 误差比较
Tab.3 Comparison of the relative L2-error of different methods on Burgers' equation

求解 Burgers 方程的方法	相对 L2 误差
PINN	3.50×10^{-2}
gPINN	7.43×10^{-2}
hp-VPINN	2.77×10^{-2}
EmPINN	3.78×10^{-3}
DL-PINN	3.44×10^{-4}

4 结论

物理信息神经网络将深度学习与物理领域的专业知识相结合,为求解复杂 PDEs 提供了新的方法。研究和优化此类神经网络以更准确地求解 PDEs 很有意义。本文针对 PINN 方法求解 PDEs 精度不高的问题,从不同方面改进 PINN 以提高其求解 PDEs 的准确度。这些改进包括引入维度扩展机制、采用带有残差连接的 MLP 结构、使用梯度增强技术以及引入变分物理信息等方法。根据上述研究,本文融合维度扩展和多物理损失函数,提出了两种偏微分方程智能求解方法:EmPINN 和 DL-PINN。这两种方法可以充分将物理信息和神经网络强大的拟合能力相结合。Poisson 方程和 Burgers 方程得到的实验结果表明,这两种方法能够提高 PINN 求解 PDEs 的准确度,并且优于目前的常规方法 1~2 个数量级。

与 PINN 方法及其部分变体 gPINN、hp-VPINN 等相比,EmPINN 引入了拟合能力更强的网络结构,从而提高了求解 PDEs 的精度,并且不需要引入额外的超参数,但是由于使用了更复杂的网络结构,EmPINN 需要更长的时间来进行训练。DL-PINN 在 EmPINN 的基础上,结合了梯度增强技术和变分物理信息,改进了损失函数。这样做能够更好地将神经网络的拟合能力与物理信息相结合,提高求解 PDEs 的精度,然而,这样会引入额外的超参数,即 PDEs 微分损失项和 PDEs

残差积分损失项的权重系数,从而引入了调整权重的问题。因此,未来的工作将研究 DL-PINN 方法的可解释性,实现自动地确定最佳权重系数,进一步提高性能。本文提出的 EmPINN 和 DL-PINN 方法,仅有实验结果验证其准确性和适用性,缺少可解释性研究,并且很难为特定的 PDEs 系统设计合适的神经网络。随着深度学习技术的不断进步,基于 PINN 的方法在高效、准确地求解 PDEs 方面具有巨大潜力,有望实现 PDEs 的精准高效的代理求解。另外,基于 PINN 的 EmPINN 和 DL-PINN 方法,其适用性不仅局限于求解一般 PDEs,还可以在计算流体力学领域提供新的建模和预测方法。例如,通过求解 Navier-Stokes 方程,模拟具有较大尺度的涡旋结构,这也是未来工作的重点研究方向。

致谢

本工作是在国防科技大学计算机学院张建民研究员和李汉卿博士的帮助下完成的,特此致谢!

参考文献 (References)

[1] CHEN X H, LIU J, YAN J J, et al. An improved structured mesh generation method based on physics-informed neural networks[EB/OL]. (2022 - 10 - 18) [2023 - 09 - 16]. <http://arxiv.org/abs/2210.09546>.

[2] CHEN X H, WANG Z C, LIU J, et al. A neural network-based mesh quality indicator for three-dimensional cylinder modelling[J]. *Entropy*, 2022, 24(9): 1245.

[3] DENG L, CHEN J Q, WANG Y Q, et al. MVU-Net: a multi-view U-Net architecture for weakly supervised vortex detection[J]. *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, 2022, 16(1): 1567 - 1586.

[4] LAGARIS I E, LIKAS A, FOTIADIS D I. Artificial neural networks for solving ordinary and partial differential equations[J]. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 1998, 9(5): 987 - 1000.

[5] RAISSI M, KARNIADAKIS G E. Hidden physics models: machine learning of nonlinear partial differential equations[J]. *Journal of Computational Physics*, 2018, 357: 125 - 141.

[6] BAYDIN A G, PEARLMUTTER B A, RADUL A A, et al. Automatic differentiation in machine learning: a survey[J]. *Journal of Machine Learning Research*, 2018, 18: 1 - 43.

[7] 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]. *Journal of Computational Physics*, 2019, 378: 686 - 707.

[8] CHEN Y Y, LU L, KARNIADAKIS G E, et al. Physics-informed neural networks for inverse problems in nano-optics and metamaterials [J]. *Optics Express*, 2020, 28 (8): 11618 - 11633.

[9] JIN X W, CAI S Z, LI H, et al. NSFnets (navier-stokes flow nets): physics-informed neural networks for the incompressible navier-stokes equations [J]. *Journal of Computational Physics*, 2021, 426: 109951.

[10] COSTABAL F S, YANG Y B, PERDIKARIS P, et al. Physics-informed neural networks for cardiac activation mapping[J]. *Frontiers in Physics*, 2020, 8: 42.

[11] JAGTAP A D, KAWAGUCHI K, KARNIADAKIS G E. Adaptive activation functions accelerate convergence in deep and physics-informed neural networks [J]. *Journal of Computational Physics*, 2020, 404: 109136.

[12] KHARAZMI E, ZHANG Z Q, KARNIADAKIS G E M. hp-VPINNs: variational physics-informed neural networks with domain decomposition [J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2021, 374: 113547.

[13] YU J, LU L, MENG X H, et al. Gradient-enhanced physics-informed neural networks for forward and inverse PDEs problems[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2022, 393: 114823.

[14] 田十方, 李彪. 基于梯度优化物理信息神经网络求解复杂非线性问题[J]. *物理学报*, 2023, 72(10): 100202.

TIAN S F, LI B. Solving complex nonlinear problems based on gradient-optimized physics-informed neural networks[J]. *Acta Physica Sinica*, 2023, 72(10): 100202. (in Chinese)

[15] JAGTAP A D, KARNIADAKIS G E. Extended physics-informed neural networks (XPINNs): a generalized space-time domain decomposition based deep learning framework for nonlinear partial differential equations [J]. *Communications in Computational Physics*, 2020, 28(5): 2002 - 2041.

[16] CHEN X H, GONG C Y, WAN Q, et al. Transfer learning for deep neural network-based partial differential equations solving[J]. *Advances in Aerodynamics*, 2021, 3(1): 36.

[17] STEIN M. Large sample properties of simulations using Latin hypercube sampling [J]. *Technometrics*, 1987, 29 (2): 143 - 151.

[18] CHEN X H, CHEN R L, WAN Q, et al. An improved data-free surrogate model for solving partial differential equations using deep neural networks [J]. *Scientific Reports*, 2021, 11: 19507.

[19] WANG S F, WANG H W, PERDIKARIS P. Improved architectures and training algorithms for deep operator networks [J]. *Journal of Scientific Computing*, 2022, 92(2): 35.

[20] BENGIO Y, COURVILLE A, VINCENT P. Representation learning: a review and new perspectives [J]. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2013, 35(8): 1798 - 1828.

[21] MORALES J L, NOCEDAL J. Remark on “algorithm 778: L-BFGS-B: fortran subroutines for large-scale bound constrained optimization” [J]. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 2011, 38(1): 1 - 4.