逢甲大學應用數學系畢業專題

結合物理訊息與徑向基網路求解微分方程之研究

應數四乙: 吳岳峰

指導教授: 游承書

一、摘要

本專題欲探討神經網路(artificial neural networks)求解微分方程問題。我們利用徑向基函數(radial basis function)建立淺層神經網路做為函數近似解，為了使其滿足微方程式問題，利用物理訊息網路(physics-informed neural networks, PINNs)的想法，給定適當的損失函數來約束網路使其滿足給定的微分方程條件。在數值實驗中首先擬合複雜函數觀察此徑向基網路的擬合狀況，之後將其結合彈簧振盪運動的微分方程問題來進行求解。從數值實驗中觀察到物理訊息徑向基網路比傳統多層前饋式神經網路更能夠良好的逼近真實解析解。

二、研究動機與方法

微分方程描述大多數物理現象，其解通常是複雜非線性函數，而在傳統上求解往往受限方程式複雜度導致運算需要大量的成本。另一方面，由於神經網路的通用近似性質 [1] 能夠擬合高度複雜非線性函數且能靈活處理高維數據，而與傳統數值方法相比更容易實現，因此神經網路自然被考慮用於求解微分方程 [3]，而本專題使用徑向基函數作為基底的淺層神經網路 (RBF-NN) [2]:

$$a = f(x) = [\emptyset_1(x; c_1, \sigma_1), \emptyset_2(x; c_2, \sigma_2), \dots, \emptyset_n(x; c_n, \sigma_n)],$$
$$\hat{u} = a \cdot W + b,$$

其中 $\phi_i(x; c_i, \sigma_i) = \exp(-\frac{\|x-c_i\|^2}{2\sigma_i^2})$， c_i和 σ_i分別表示徑向基函數的中心與標準差(如圖1藍色方框部分)， W 和 b 分別為權重向量與偏權向量。我們考慮彈簧振盪運動的二階微分方程問題 [4]:

$$m\frac{d^2u}{dt^2} + \mu\frac{du}{dt} + ku = 0, t \in (0, 1],$$
$$u(0) = 0, \qquad \left.\frac{du}{dt}\right|_{t=0} = 0.$$

預期 RBF-NN 能夠逼近微分方程的解析解，因此需要限制 RBF-NN 以滿足上述問題。可利用微分方程式以及初使條件的均方誤差做為損失函數(如圖1，稱之為 RBF-PINN)，並透過梯度下降法最小化損失函數來尋找適當的近似解。數值實驗中我們將比較 RBF-PINN 與多層物理訊息神經網路 (PINNs) [3] 的效能。

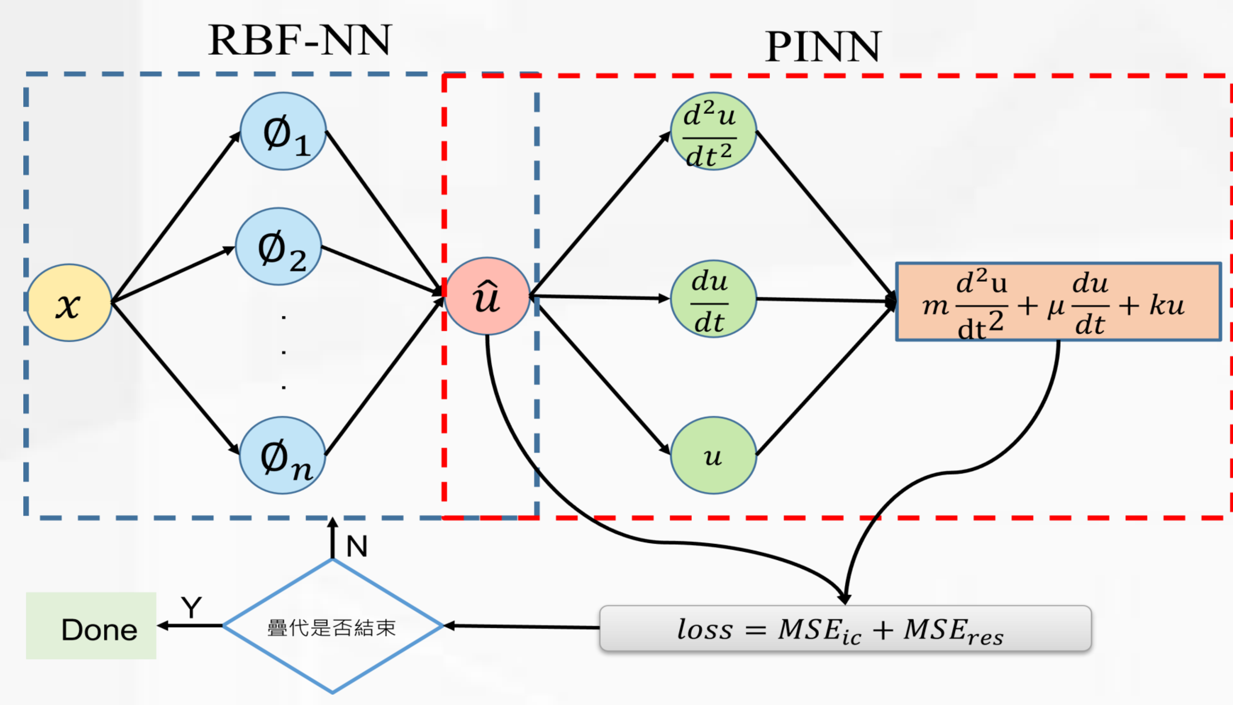

圖1：RBF-PINN 網路示意圖

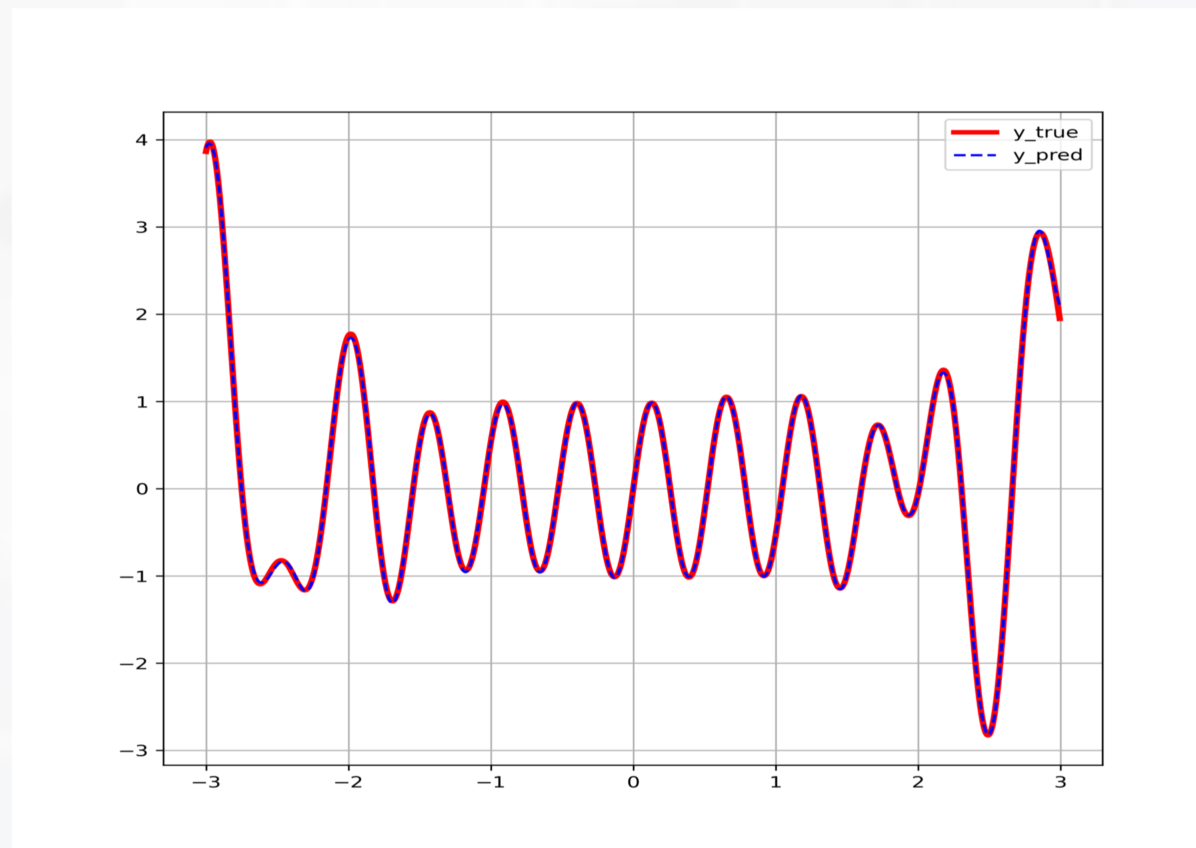

圖2：實驗一 RBF-NN 數值結果(MSE: 10^{-3})

三、研究結果

實驗一：首先測試徑向基網路是否能夠有效擬合函數，考慮擬合一個具有一定複雜度之波型函數如下:

$$y(x) = (x^3 - x)\frac{\sin(7x)}{x} + \sin(12x), x \in [-3, 3].$$

給定訓練數據 1000 筆，學習率 2×10^{-2} 與 50 個徑向基函數並訓練 2000 回合 。從圖 2 數值實驗結果可觀察出 RBF-NN 能有效的擬合複雜非線性函數。

實驗二：為了利用 RBF-PINN 求解彈簧振盪運動微分方程，我們將時域 $(0, 1]$ 均勻選取 35 個等距點做為訓練點並透過 K-mean 選取 20 個點做為徑向基函數初始中心進行訓練。我們也考慮 2 組單層與 10 層 PINNs 做為比較，其激活函數皆為 tanh 且隱藏層的神經元個數皆為 20。實驗設定訓練回合數 10000、初始學習率為 10^{-3} 且每 5000 回合將遞減 0.5 倍。從數值實驗可以看出 RBF-PINN 可良好的逼近真實解析解(如圖3)，而單層(如圖4)與 10 層(如圖5)都無法對問題有更好的效果。

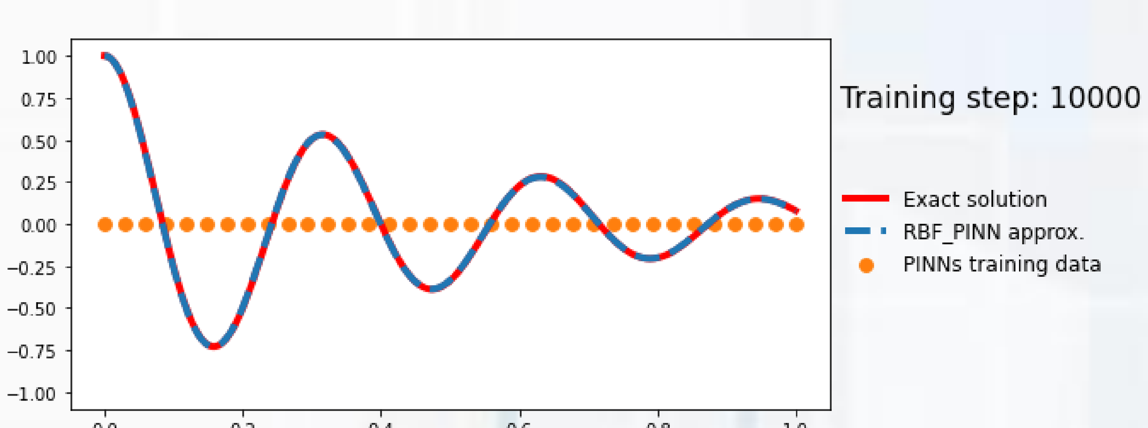

圖3：RBF-PINN 數值結果(MSE:9×10^{-6})

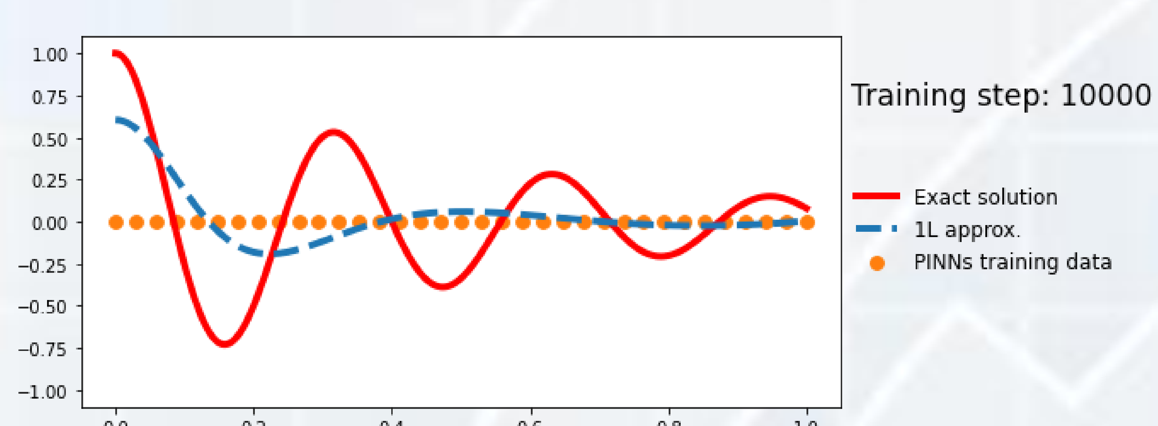

圖4：單層 PINNs 數值結果(MSE:2×10^{-1})

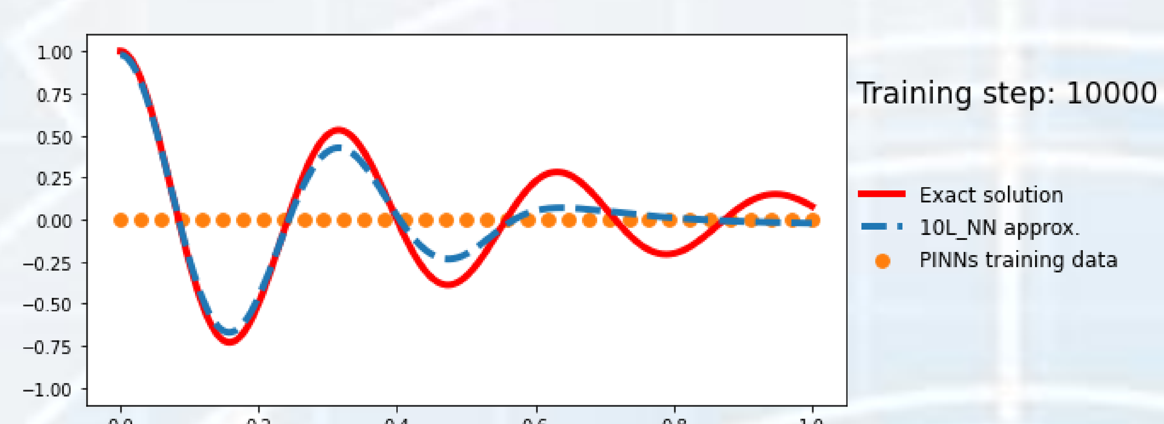

圖5：10 層 PINNs 數值結果(MSE: 5×10^{-4})

四、結論

本專題結合徑向基網路與物理訊息來求解微分方程問題，我們考慮一組彈簧振盪運動微分方程做為實驗例子，數值實驗結果表明淺層 RBF-PINN 比多層 PINNs 能更有效率的找到最適解。未來將進一步研究 RBF-PINN 應用於高維度偏微分方程或是結合現實資料配合理論方程來進行預測與分析。

五、參考文獻

[1] C. F. Higham and D. J. Higham, Deep learning: an introduction for applied mathematicians, *SIAM Review*, 61(2019), pp. 860-891.

[2] Q. Jiang, L. Zhu, C. Shu and V. Sekar, An efficient multilayer RBF neural network and its application to regression problems, *Neural Computing and Applications*, 26(2021), pp. 4133-4150.

[3] M. Raissi, P. Perdikaris and G. E. Karniadakis, Physics-informed neural networks: a deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations, *Journal of Computational Physics*, 378(2019), pp. 686-707

[4] Ingo Berg, Damped harmonic oscillator - derivation and solution of the differential equations, https://beltoforion.de/en/harmonic_oscillator/ (2022)