生物智能算法 神经网络组

Personal information

- name: 钟伟东
- student id: 21821073
- email: 519043202@qq.com

Timeine

Task	Due	Done
1. 选择论文	Mar. 14	√
2. 精读论文，理解模型	Mar. 21	√
3. 复现论文	Apr. 4	√
4. 完成对比实验	Apr. 11	√
5. 形成最后报告	Apr. 18	√

1. Choose papers

DGM: A deep learning algorithm for solving partial differential equations

> Journal of Computational Physics Volume 375, 15 December 2018, Pages 1339-1364

摘要：

> 高维偏微分方程(PDE)一直是一项长期的计算挑战。文章通过用深度神经网络近似解高维偏微分方程，神经网络经过训练以满足PDE，初始条件和边界条件。文章的算法是无网格的，通过批量随机采样的时间和空间点上训练神经网络，网格的存在会使得在较高的维度上的PDE无法求解（例如有限元，有限差分方法）。该算法在一类高维自由边界偏微分方程上进行了测试，我们能够在多达200个维度上精确求解。该算法还在高维Hamilton-Jacobi-Bellman PDE和Burgers方程上进行了测试，神经网络的解近似于Burgers方程的一般解，在连续的不同边界条件和物理条件下。算法称为“Deep Galerkin Method（DGM）”，因为它在原理上与Galerkin方法类似，其解由神经网络近似而不是基函数的线性组合。

2. Read paper and understand

传统方法：

1. 确定性数值逼近方法（有限差分，有限元）
2. 随机性数值逼近方法（蒙特卡洛，离散SDE）

确定性方法：用网格计算，会有维度灾难，并且只能计算网格上的点，周边的点要用插值

随机性方法：只提供了在单一固定时空点上的值

> The above mentioned random numerical approximation methods involving Monte Carlo approximations typically overcome this curse of dimensionality but only provide approximations of the Kolmogorov PDE at a single fixed space-time point.

下图是一类PDE方程的数学定义，第一项为方程本身（其中u就是我们想要拟合的方程），第二项为方程初始条件，第三项为方程的边界条件。

$$\begin{cases} (\partial_t + \mathcal{L})\, u(t, \boldsymbol{x}) = 0, & (t, \boldsymbol{x}) \in [0, T] \times \Omega \\ u(0, \boldsymbol{x}) = u_0(\boldsymbol{x}), & \boldsymbol{x} \in \Omega \qquad \text{(initial condition)} \\ u(t, \boldsymbol{x}) = g(t, \boldsymbol{x}), & (t, \boldsymbol{x}) \in [0, T] \times \partial\Omega \qquad \text{(boundary condition)} \end{cases}$$

根据这三个部分，构建三个损失函数分别对应方程，初始条件，边界条件

1. A measure of how well the approximation satisfies the **differential operator**:

$$\left\| (\partial_t + \mathcal{L})\, f(t, \boldsymbol{x}; \boldsymbol{\theta}) \right\|^2_{[0,T]\times\Omega,\ \nu_1}$$

Note: parameterizing f as a neural network means that the differential operator can be computed easily using backpropagation.

2. A measure of how well the approximation satisfies the **boundary condition**:

$$\left\| f(t, \boldsymbol{x}; \boldsymbol{\theta}) - g(t, \boldsymbol{x}) \right\|^2_{[0,T]\times\partial\Omega,\ \nu_2}$$

3. A measure of how well the approximation satisfies the **initial condition**:

$$\left\| f(0, \boldsymbol{x}; \boldsymbol{\theta}) - u_0(\boldsymbol{x}) \right\|^2_{\Omega,\ \nu_3}$$

训练过程需要分别对方程所在的域和边界初始条件上进行采样

经过网络前向传播，计算损失反向传播更新网络参数

1. Generate random points (t_n, x_n) from $[0, T] \times \Omega$ and (τ_n, z_n) from $[0, T] \times \partial\Omega$ according to respective probability densities ν_1 and ν_2. Also, draw the random point w_n from Ω with probability density ν_3.
2. Calculate the squared error $G(\theta_n, s_n)$ at the randomly sampled points $s_n = \{(t_n, x_n), (\tau_n, z_n), w_n\}$ where:

$$G(\theta_n, s_n) = \left(\frac{\partial f}{\partial t}(t_n, x_n; \theta_n) + \mathcal{L} f(t_n, x_n; \theta_n) \right)^2 + \left(f(\tau_n, z_n; \theta_n) - g(z_n) \right)^2 + \left(f(0, w_n; \theta_n) - u_0(w_n) \right)^2.$$

3. Take a descent step at the random point s_n:

$$\theta_{n+1} = \theta_n - \alpha_n \nabla_\theta G(\theta_n, s_n)$$

4. Repeat until convergence criterion is satisfied.

文章提出了新的网络层，DMG Layer，与LSTM类似在内部加入了更多的变量

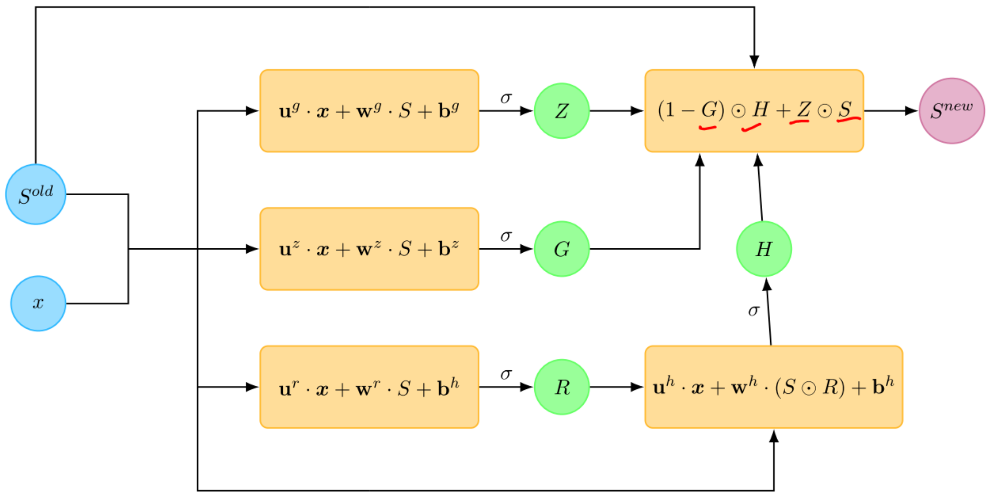


Figure 5.3: *Operations within a single DGM layer.*

整个网络结构如下，x是采样点输入，将x输入到每个DGM层中，主要目的是为了防止梯度消失，使得网络拟合效果更好

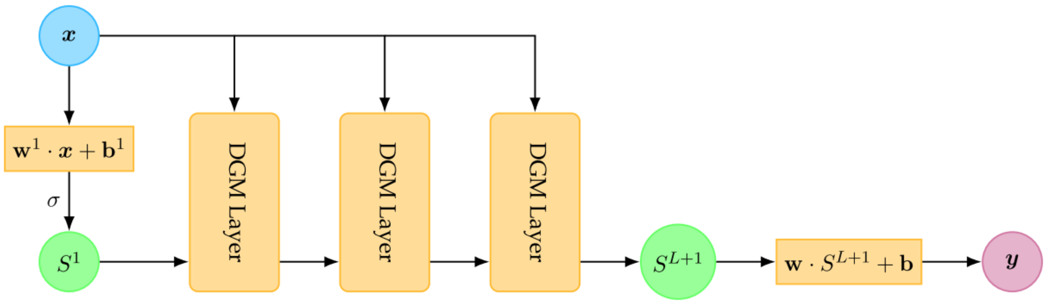
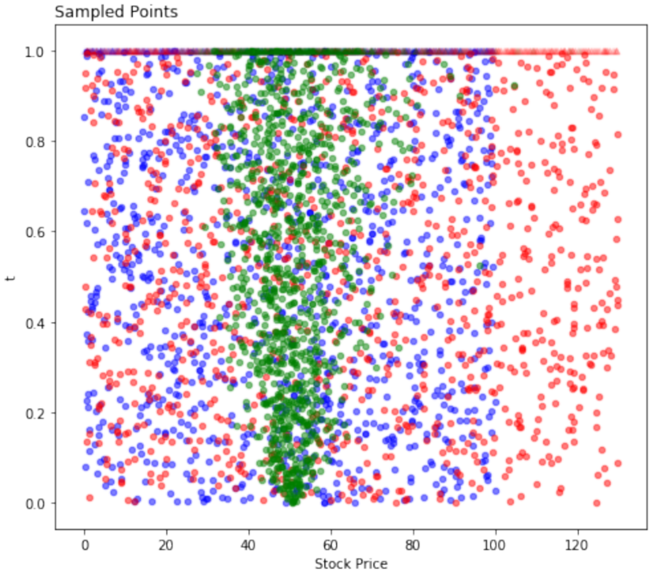


Figure 5.2: *Bird's-eye perspective of overall DGM architecture.*

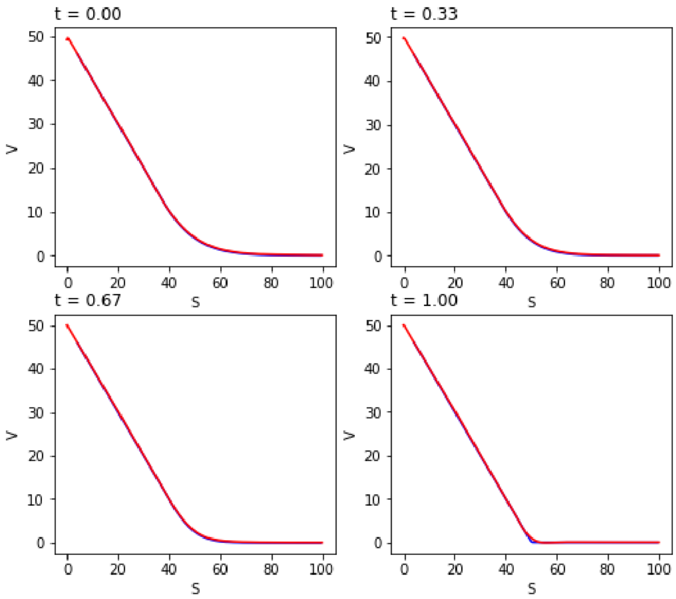
3. Implementation

实现代码与结果在code文件夹中

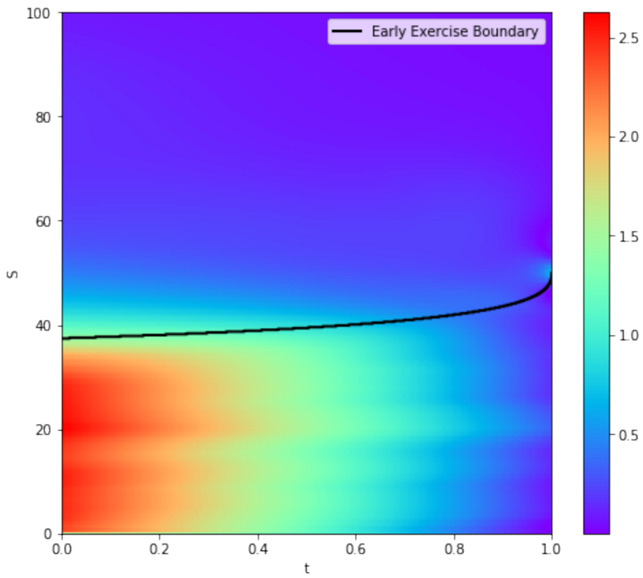
4. Experiment



采样数据的可视化



最终拟合结果与有限差分法拟合结果的比对



网络拟合结果与真值之间的差

5. Result

经过实验测试，该方法能够解决高维问题上传统方法出现维度灾难的问题，但是在使用过程中仍有很多部分（例如网络的超参数，采样的分布，PDE方程的近似推导等）需要进行调整才能获得可靠的结果，并且在初值边界处拟合较好，其他地方效果会次一点。