TIME: A Transparent, Interpretable, Model-Adaptive and Explainable Neural Network for Dynamic Physical Processes

Target

学习动力系统,通过卷积核近似其算子。网络采用GAN的形式,学习编码后的PDE的表示,解码用来可视化,检验编码的效果。这里的监督主要是拟合边界条件?以及卷积算子有正则。

/Method——TIME

全卷积网络,下图是TIME、PDE solver,反问题solver的比较

Model Representing a Physical Process

$$\nabla_t (au(x,t)) + \nabla_x \cdot b\nabla_x u(x,t) = 0$$
 or $\mathcal{L}(u(x,t)) = 0$

Forward Solver

Given the representation \mathcal{L} , a, b, boundary, and initial conditions find $u_b(x,t)$

Inverse Solver

Given the representation \mathcal{L} , forward solver, boundary, and initial conditions find a, b

TIME

Given $u_h(x,t)$, boundary, and initial conditions find an approximate representation \mathcal{L}_u

Motivation/Idea/Background

- 找不变性结构。%的非要说得这么骚,搞了半天不变性指观测数据的不变性,即PDE规律。。。
- 用CNN学习好的特征表示
- 可解释性与高准确性不可兼得
- 希望网络low weight (high weight冗余且降低可解释性)
- 背景之一,本文说前人工作中时空算子之间没有区别。如 Neural ODE和PDE-Net,前者用ResNet结构表示一阶时间算子 $\frac{\partial x}{\partial t}$,每个网络block表示空间分布x;后者则把空间算子分离 开来计算,这里没明白,设计的多重 δt -block只在一条u轨线上,模拟 $u(x_0,t_0)$ 到 $u(x_0,t_n)$ 的过程,应该是时间算子分离为 n份,整个 δt -block是一个长时时间算子?

Experiments

先说下数据,5种形式的方程数据,由给定的形式人工生成,具体的生成和设置方式见原文(5.1)节。据说实际数据可能存在稀疏或者missing的情况,这时?

TIME使用的网络是End-End Encoder Decoder Network, 其中允许skip connections。对isolated system网络中有boundary layer, 对coupled system 网络中有coupling layer, 不过这些是什么意思没看懂。

网络的输入是space-time image, 特征图, 为2阶张量, 维度 $W \times H$; 且有训练标签, 也是2阶张量, 维度 $2 \times H$ prescribed by the point-wise source terms at x=0 and x=L spatial boundaries。有点迷糊,勉强认为是把边界条件也当成输入变量了,在特征图上下加了两道边缘处的杠。

网络其它设置太晦涩了,深度和方程最高偏导阶数一致,每层的卷积核数目和莫名其妙的算子自由度有关,skip connections使网络更稳定.....都没说原因,太启发式了。

最后,训练的loss是预测出的边界条件和true labels的MSE,以及kernel的 和为0的正则,原因只有一句没看明白。

最后最后,核表示的可解释性和消融实验不看了,大概就是每一层的卷积核拿出来说,看,这些是啥? 劈里啪啦说一大段。

/Pros

- 模型透明,可解释性,大概是卷积算出来之后有那么点
- 模型自适应,大概是网络维度自己调
- 稳健,通过实验验证,稳健么?
- 网络low weight, 这个还算有点意思

Cons

写得我看不明白,没意思了

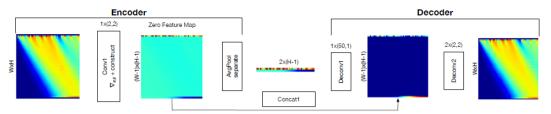


Figure 1: A single layer encoder-decoder for a two-dimensional hyperbolic problem with complete observation data.

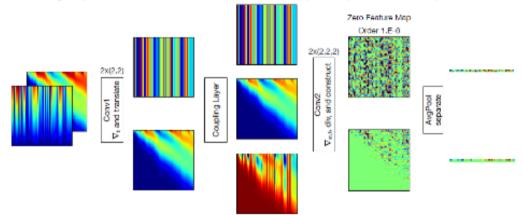


Figure 4: Encoder for a coupled process with elliptic and hyperbolic forms in the input channels. The coupling layer allows the elliptic and hyperbolic forms to interact. The network is capable of representing isolated elliptic and hyperbolic input maps as well at the cost of redundant kernel evaluations.

这两张模型图谁能看明白? 不清楚PDE 时空image的话

小结:这篇文章写得有点晦涩,主要是PDE方面的术语,包括(1)时空算子的区别; (2)边界条件怎么使用; (3)网络的结构设计说的不是那么清楚,一会一个结构特点(4)时不时来几个kernel,卷积网络的kernel干啥了 感觉能借鉴的思想有: (1)编码解码时空图像的方式可视化; (2)网络low weight解释性比high好; (3)终于有一篇文章考虑边界条件了,不过也是把它扔进数据里做监督