In dieser Sektion stellen

Die Idee für diesen Ansatz stammt aus Paper 1, in welchem sogenannte konservative physikinformiertes neuronales Netzwerke, abgekürzt cPINNs, auf diskreten Gebieten für nichtlineare Erhaltungsgesetze präsentiert wurden. Dabei wird das Gebiet, auf welchem das betreffende Erhaltungsgesetz definiert ist, in mehrere aneinander grenzende Teilgebiete aufgeteilt und die Erhaltungseigenschaft wird durch die Durchsetzung der Flusskontinuität in der starken Form entlang der Schnittstellen dieser Teilgebieten erreicht. Abgesehen von der Flusskontinuitätsbedingung wird an der gemeinsamen Schnittstelle zwischen zwei Teilgebieten auch eine Durchschnittslösung, gegeben durch zwei verschiedene neuronale Netze, erzwungen.

Ein weiterer Vorteil der vorgeschlagenen Methode ist die zusätzliche Freiheit, die sie hinsichtlich der Wahl des Optimierungsalgorithmus und der verschiedenen Trainingsparameter wie Residualpunkte, Aktivierungsfunktion, Breite und Tiefe des Netzes usw. bietet. Verschiedene Formen von Fehlern, die bei cPINN auftreten, wie Optimierungs-, Generalisierungs- und Approximationsfehler, und ihre Quellen werden kurz diskutiert. In cPINN werden lokal adaptive Aktivierungsfunktionen verwendet, wodurch das Modell im Vergleich zu seinen festen Gegenstücken schneller trainiert werden kann. Mit der vorgeschlagenen Methode werden sowohl Vorwärts- als auch Rückwärtsprobleme gelöst.

Abb. 1 zeigt das Schema des cPINN-Algorithmus, bei dem neben dem NN- und PDE-Teil auch zusätzliche Schnittstellenbedingungen zur Verlustfunktion beitragen. Die Schnittstellenbedingung umfasst Flusskontinuitätsbedingungen in starker Form sowie die Erzwingung der durchschnittlichen Lösung, die durch zwei NNs entlang der gemeinsamen Schnittstelle gegeben ist. Obwohl es nicht notwendig ist, die durchschnittliche Lösung entlang der gemeinsamen Schnittstelle zu erzwingen, zeigen unsere numerischen Experimente, dass dies die Konvergenzrate drastisch beschleunigt. Abb. 2 zeigt die schematische Darstellung der PINN- und cPINN-Methoden. Im Gegensatz zu PINN unterteilt cPINN die Domäne in eine Reihe von kleinen Unterdomänen, in denen wir völlig unterschiedliche neuronale Netze (hier als Sub-PINN-Netze bezeichnet) mit unterschiedlicher Architektur einsetzen können, um die Lösung derselben zugrunde liegenden PDE zu erhalten. Eine solche Domänenzerlegung ermöglicht auch eine einfache Parallelisierung des Netzes, was im Hinblick auf das Erreichen von Berechnungseffizienz sehr wichtig ist. Ein weiterer Aspekt des vorgeschlagenen Algorithmus ist, dass wir die Hyperparameter des Netzes wie Optimierungsmethode, Aktivierungsfunktion, Tiefe oder Breite des Netzes frei wählen können, je nach intuitivem Wissen über die Regelmäßigkeit der Lösung in jeder Teildomäne. Im Falle glatter Zonen kann ein flaches Netz verwendet werden, während ein tiefes neuronales Netz in einer Region eingesetzt werden kann, in der eine komplexe Lösung erwartet wird.

Die cPINN-Formulierung berücksichtigt die Kontinuität des Flusses an den Schnittstellen der einzelnen Teilgebiete, die sich an den Erhaltungsgesetzen orientiert. Die Gesamtlösung wird in diesem Fall rekonstruiert, indem alle Lösungen in jedem Teilgebiet unter Verwendung der richtigen Schnittstellenbedingungen zusammengefügt werden. Dieser Ansatz kann auf einen allgemeineren Fall ausgedehnt werden, der im Folgenden als Mörtel-PINN bezeichnet wird, um die nicht überlappenden Teilgebiete zu verbinden, in denen die Schnittstellenbedingungen nicht notwendigerweise aus den Erhaltungsgesetzen stammen, sondern vielmehr von der entsprechenden Regelgleichung in jedem einzelnen Problem abhängen.

Die Verlustfunktion von cPINN wird für jede Subdomäne definiert, die eine ähnliche Struktur wie die PINN-Verlustfunktion in jeder Subdomäne hat, aber mit den Schnittstellenbedingungen ausgestattet ist.