基于物理信息神经网络（PINN）的微分方程求解：优化模型、算法实现与数值分析

1 问题背景

偏微分方程是现代科学与工程模拟的基石，其高维与复杂边界问题的求解传统上面临”维度灾难”。物理信息神经网络（Physics-Informed Neural Networks, PINNs）将微分方程的控制方程和边界条件作为约束，嵌入到神经网络的损失函数中，从而将一个偏微分方程求解问题转化为一个参数优化问题。该方法的核心在于通过设计一个包含控制方程残差和边界条件残差的复合损失函数，并利用最优化算法求解网络参数，使得神经网络的解在满足数据的同时严格服从物理规律。

2 具体问题

考虑如下带有 Dirichlet 边界条件的二维泊松方程：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x,y), & (x,y) \in \Omega = [0,1] \times [0,1], \\ u(x,y) = g(x,y), & (x,y) \in \partial\Omega, \end{cases}$$

其中，我们设定：

源项：$f(x,y) = -2\pi^2 \sin(\pi x)\sin(\pi y)$；

边界条件：$g(x,y) = 0$。

3 问题要求

3.1 建立最优化模型

(a) 构建一个前馈神经网络 $\hat{u}(x,y;p)$ 作为实验解，其中 p 为网络参数（权重和偏置）。

(b) 详细推导并建立 PINN 的复合损失函数：

$$J(p) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} L_{\text{PDE}}(x_i, y_i; p) + \frac{\lambda}{M}\sum_{k=1}^{M} L_{\text{BC}}(x_k, y_k; p),$$

其中：

$$L_{\text{PDE}}(x_i, y_i; p) = \left[\frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial x^2}(x_i, y_i; p) + \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial y^2}(x_i, y_i; p) - f(x_i, y_i) \right]^2,$$

$$L_{\text{BC}}(x_k, y_k; p) = [\hat{u}(x_k, y_k; p) - g(x_k, y_k)]^2 .$$

(c) 要求明确解释模型中 N（内部配置点数量）、M（边界配置点数量）和 λ（惩罚系数）的物理与数学意义，并分析 λ 对解的质量的影响。

3.2 设计求解算法

主要任务：

- 设计并实现至少两种不同的优化算法（例如：梯度下降法、拟牛顿法）来求解上述最优化问题；
- 比较不同算法在收敛速度、稳定性和求解精度上的差异。

3.3 数值实验与分析

实验内容：

- 在区域 Ω 内及边界 $\partial\Omega$ 上分别均匀采样，生成训练点集；
- 系统性地进行数值实验，可选择从以下角度分析影响求解精度的因素：
  - 隐藏层节点数 m；
  - 惩罚系数 λ 的不同取值；
  - 内部点数量 N 与边界点数量 M 的比例；
- 绘制数值解与精确解的对比图，并计算 L^2 误差范数以量化误差。

4 报告撰写要求

- 报告内容应逻辑清晰，结构完整；
- 数值实验结果需以图表等形式清晰呈现，并辅以必要的分析讨论；
- 编程语言不限，但需将主要代码作为附录附在报告末尾；
- 严格遵守学术规范，对引用的任何外部内容需明确标注。