深度学习（Mscale网络）求解椭圆方程代码模板（Deep-Ritz方法）

刘子旗, 许志钦*

2020 年 10 月 23 日

根据神经网络的F-Principle [1]，网络在训练的过程中会优先拟合训练数据的低频部分。但是在某些特殊的场合下（如使用神经网络求解微分方程），需要拟合目标函数的高频部分。实验希望找到一种特殊的网络结构，更快地拟合目标函数的高频部分。

这里提出了一种新的网络结构：Mscale，用于求解椭圆方程。

椭圆方程的Ritz方法

椭圆方程的一般形式为

$$
\begin{aligned}
-\nabla(a(x)\nabla u(x)) + c(x)u(x) = f(x) \quad x \in \Omega \\
u(x) = u_0(x) \quad x \in \partial\Omega
\end{aligned}
$$

通过数学上的推导[2]，方程可以转化为泛函的极小值问题

$$
\begin{aligned}
&\min_u J(u) = \int_\Omega \frac{1}{2}a(x)|\nabla u(x)|^2 + c(x)|u(x)|^2 - f(x)u(x)\ dx \\
&\text{s.t.} \quad u(x) = u_0(x) \quad x \in \partial\Omega
\end{aligned}
$$

这是一个约束优化问题，我们用加惩罚项的方法把它近似转化成无约束优化问题

$$
\min_u \int_\Omega \frac{1}{2}a(x)|\nabla u(x)|^2 + \frac{1}{2}c(x)|u(x)|^2 - f(x)u(x)\ dx + \int_{\partial\Omega} |u(x) - u_0(x)|^2\ dx
$$

*xuzhiqin@sjtu.edu.cn

用神经网络$N(x;\theta)$表示未知函数，用蒙特卡洛方法计算积分的值，就得到了最终的优化问题

$$\begin{aligned}\min_{\theta} L(\theta) = &\frac{|\Omega|}{|S_1|}\sum_{x_i\in S_1}\frac{1}{2}a(x_i)|\nabla N(x_i;\theta)|^2 + \frac{1}{2}c(x_i)|N(x_i;\theta)|^2 - f(x_i)N(x_i;\theta)\\ &+\beta\frac{|\partial\Omega|}{|S_2|}\sum_{x_i\in S_2}|N(x_i;\theta)-u_0(x_i)|^2\ dx\end{aligned}$$

其中S_1和S_2是在Ω和$\partial\Omega$上随机生成的点。

神经网络结构

一般的神经网络定义为一个函数$N(x):\mathbb{R}^d\to\mathbb{R}$，由线性变换和非线性变换复合而成。

$$N(x;\theta) = W^{[L]}\sigma(\cdots W^{[2]}\sigma(W^{[1]}x+b^{[1]})+b^{[2]}\cdots)+b^{[L]}$$

其中$\sigma:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$叫做“激活函数”，它作用在向量上相当于作用于每个分量。L叫做“层数”，$W^{[l]},b^{[l]}$是待定的参数。

其中$n^{[l]}$叫做每一层的“宽度”，满足$n^{[1]}=d, n^{[L+1]}=1$

$$W^{[l]}\in\mathbb{R}^{n^{[l]}\times n^{[l+1]}},\quad b^{[l]}\in\mathbb{R}^{n^{[l+1]}}$$

Mscale网络结构

网络结构[3]如图1。具体代码实现见下文。

代码实现细节

代码文件说明：

- **ritzN.py**：用一般的Normal网络求解椭圆方程。
- **ritzM.py**：用Mscale网络求解椭圆方程。
- **plot_result.py**：展示网络结果，画图。

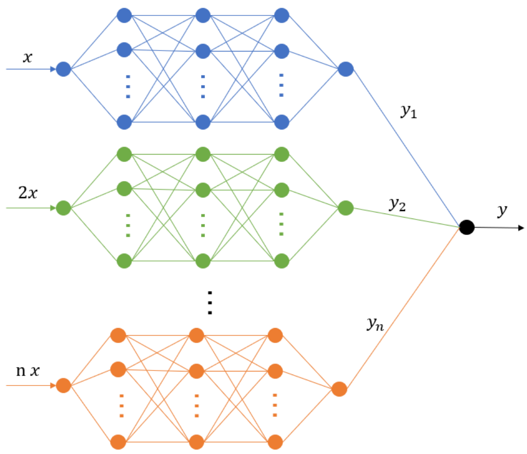


图 1: Mscale网络结构

- **my_act.py**：文件中定义了可能用到的激活函数，如果要用到新的激活函数可以在这里添加。**act_dict**变量下标是激活函数的“名字”，它的值是名字对应的函数句柄。

运行环境：python 3.6 + tensorflow 1.16

参数设定

在代码中，首先我们要设定所有的参数，以便修改。所有的参数和运行结果都记录在变量**R**中。

```
R = {}

R["seed"] = 0

R["size_it"] = 1000
R["size_bd"] = 100

R["penalty"] = 1e3

R["act_name"] = ("sin",) * 3
R["hidden_units"] = (180,) * 3
R["learning_rate"] = 1e-4
R["lr_decay"] = 5e-7

R["varcoe"] = 0.5
```

```
R["total_step"] = 5000
R["resamp_epoch"] = 1
R["plot_epoch"] = 500

R["record_path"] = os.path.join("..", "exp", "sin_N")
```

参数意义如下：

- **seed**：随机数种子。保证两次运行代码的结果完全一样。（在必要的时候，这个也是可调的参数之一）
- **size_it**：区域Ω内部随机生成的点的个数，也就是$|S_1|$。
- **size_bd**：区域边界$\partial\Omega$上随机生成的点的个数，也就是$|S_2|$。
- **penalty**：惩罚系数，就是公式中的β。
- **scale**：Mscale网络中的变换系数。（Normal网络中没有这个参数）
- **act_name**：长度为N的列表，代表每一层的激活函数。
- **hidden_units**：长度为N的列表，代表每一层的宽度。
- **learning_rate**：学习率。（一般不能太大）
- **lr_decay**：学习率下降速度。
- **varcoe**：初始化参数。
- **total_step**：训练总步数。
- **resamp_epoch**：采样间隔。每隔X步重新随机生成S_1, S_2中的点。X=1代表每计算一步都重新随机生成点。X大于总步数时，代表训练用的样本不变。
- **plot_epoch**：从第0步开始，每隔X步记录下数值解图像。同时输出当前状态。
- **record_path**：保存记录的文件夹路径。在运行结束的时候，源代码文件会被复制到文件夹下的**code.py**文件中，以便重复实验。数据结果和参数会保存在文件夹下的**data.pkl**文件中，以便画图和展示。

定义求解区域

这一部分定义了求解区域Ω。**如果要求解复杂区域上的方程，就要修改这部分代码。**

```
R["dimension"] = dim = 2
R["area_it"] = 4
R["area_bd"] = 8

# interior data
def rand_it(size):
    x_it = np.random.rand(size, dim) * 2 - 1
    return x_it.astype(np.float32)

# boundary data
def rand_bd(size):

    x_bd = np.random.rand(size, dim) * 2 - 1
    ind = np.random.randint(dim, size=size)
    x01 = np.random.randint(2, size=size) * 2 - 1
    for ii in range(size):
        x_bd[ii, ind[ii]] = x01[ii]
    return x_bd.astype(np.float32)
```

这里**dim**是方程的空间维数，**area_it**表示Ω的面积。**area_bd**表示$\partial\Omega$的面积。

rand_it函数，生成Ω内**均匀分布**的随机点，输入需要的随机点个数**size**，返回一个大小为$size \times dim$的数组。

rand_bd函数，生成边界$\partial\Omega$上**均匀分布**的随机点，输入输出同上。

这样就定义了求解区域。这里对应的求解区域是$[-1, 1]^2$。想要在其它区域上求解，只要重新实现一遍这个函数。

定义方程

这一部分定义了方程中的已知函数$a(x), c(x), f(x)$，和精确解（边界条件）$u(x)$。如果精确解未知，$u(x)$就代表边界条件。**如果要求解其它方程，就要修改这部分代码。**

```
# PDE problem
# - (a(x) u'(x))' + c(x) u(x) = f(x)
R["mu"] = mu = 6 * np.pi

def u(x):
```

```
    u = np.sin(mu * x)
    return u.astype(np.float32).reshape((-1, 1))

def a(x):
    a = np.ones((x.shape[0], 1))
    return a.astype(np.float32).reshape((-1, 1))

def c(x):
    c = np.zeros((x.shape[0], 1))
    return c.astype(np.float32).reshape((-1, 1))

def f(x):
    f = mu * mu * np.sin(mu * x)
    return f.astype(np.float32).reshape((-1, 1))
```

需要注意的是：这些函数，输入都是一个大小为$size \times dim$的数组，每一行代表一个采样点。返回的是大小为$size \times 1$的数组。（这里的维度不一致会报错）

保存参数

把源代码文件复制到文件夹下的**code.py**文件中，以便重复实验。设定随机数种子。

```
# save parameters

# prepare folder
if not os.path.isdir(R["record_path"]):
    os.mkdir(R["record_path"])

# save current code
save_file = os.path.join(R["record_path"], "code.py")
shutil.copyfile(__file__, save_file)

# set seed
tf.set_random_seed(R["seed"])
tf.random.set_random_seed(R["seed"])
np.random.seed(R["seed"])
```

用于画图和计算误差的采样点

这里的**x_test**是用于计算误差的采样点，**u_test_true**是这些点上的精确解的值。计算

数值解和精确解误差的时候就在这些点上计算。

x_samp是用于画图的采样点。**u_samp_true**是这些点上的精确解的值。

如果我们不知道精确解，而是通过差分方法或者其它方法生成的参考解。这里的u_test_true就要从文件里面读取出来。

```
# get test points
x_test = np.linspace(-1, 1, 200 +1).reshape((-1, 1))

R["x_test"] = x_test.astype(np.float32)
R["u_test_true"] = u(R["x_test"])

# get sample points
x_samp = np.linspace(-1, 1, 200 +1).reshape((-1, 1))

R["x_samp"] = x_samp.astype(np.float32)
R["u_samp_true"] = u(R["x_samp"])
```

需要注意的是：这里的**x_test**和**x_samp**都是$size \times dim$的数组，每一行代表一个采样点。这里的**u_test_true**和**u_samp_true**都是$size \times 1$的数组。在画图时要另外调整。

之后在训练的过程中，还会有**u_test_X**和**u_samp_X**变量，代表训练到第X步的数值解。

神经网络

用tensorflow实现深度学习的网络结构。

如果要换网络结构或者参数初始化，就要改这段代码。

下面这段代码实现了一个普通的网络（Normal），**init_W**和**init_b**是变量的初始值。

```
units = (dim,) + R["hidden_units"] + (1,)

def neural_net(x):
    with tf.variable_scope("vscope", reuse=tf.AUTO_REUSE):

        y = x

        for i in range(len(units) - 2):
            init_W = np.random.randn(units[i], units[i + 1]).astype(np.float32)
            init_W = init_W * (2 / (units[i] + units[i + 1]) ** R["varcoe"])
```

```
            init_b = np.random.randn(units[i + 1]).astype(np.float32)
            init_b = init_b * (2 / (units[i] + units[i + 1]) ** R["varcoe"])

            W = tf.get_variable(name="W" + str(i), initializer=init_W)
            b = tf.get_variable(name="b" + str(i), initializer=init_b)

            y = act_dict[R["act_name"][i]](tf.matmul(y, W) + b)

        init_W = np.random.randn(units[-2], units[-1]).astype(np.float32)
        init_W = init_W * (2 / (units[i] + units[i + 1]) ** R["varcoe"])
        init_b = np.random.randn(units[-1]).astype(np.float32)
        init_b = init_b * (2 / (units[i] + units[i + 1]) ** R["varcoe"])

        W = tf.get_variable(name="W" + str(len(units) - 1), initializer=init_W)
        b = tf.get_variable(name="b" + str(len(units) - 1), initializer=init_b)

        y = tf.matmul(y, W) + b

    return y
```

下面这段代码实现了Mscale网络，原理类似。

```
units = (dim,) + R["hidden_units"] + (1,)

def neural_net(x):
    with tf.variable_scope("vscope", reuse=tf.AUTO_REUSE):

        all_y = []
        for k in range(len(R["scale"])):
            scale_y = R["scale"][k] * x

            for i in range(len(units) - 2):
                init_W = np.random.randn(units[i], units[i + 1]).astype(np.float32)
                init_W = init_W * (2 / (units[i] + units[i + 1]) ** R["varcoe"])
                init_b = np.random.randn(units[i + 1]).astype(np.float32)
                init_b = init_b * (2 / (units[i] + units[i + 1]) ** R["varcoe"])

                W = tf.get_variable(name="W" + str(i) + str(k),
                    initializer=init_W)
                b = tf.get_variable(name="b" + str(i) + str(k),
                    initializer=init_b)

                scale_y = act_dict[R["act_name"][i]](tf.matmul(scale_y, W) + b)
```

```
            init_W = np.random.randn(units[-2], units[-1]).astype(np.float32)
            init_W = init_W * (2 / (units[i] + units[i + 1]) ** R["varcoe"])
            init_b = np.random.randn(units[-1]).astype(np.float32)
            init_b = init_b * (2 / (units[i] + units[i + 1]) ** R["varcoe"])

            W = tf.get_variable(name="W" + str(len(units) - 1) + str(k),
                initializer=init_W)
            b = tf.get_variable(name="b" + str(len(units) - 1) + str(k),
                initializer=init_b)

            scale_y = tf.matmul(scale_y, W) + b

            all_y.append(scale_y)

        y = sum(all_y)

    return y
```

损失函数

定义损失函数。这里变量前面的“V”代表它的类型是tensorflow中的Variable，变量前面的“N”表示它保存变量当前的取值。

如果求解的不是椭圆方程，或者损失函数的形式有变化，就要改这段代码。

```
# loss and optimizer ("V" for variable)
with tf.variable_scope("vscope", reuse=tf.AUTO_REUSE):

    Vx_it = tf.placeholder(tf.float32, shape=(None, dim))
    Vx_bd = tf.placeholder(tf.float32, shape=(None, dim))

    Va_it = tf.placeholder(tf.float32, shape=(None, 1))
    Vc_it = tf.placeholder(tf.float32, shape=(None, 1))
    Vf_it = tf.placeholder(tf.float32, shape=(None, 1))

    Vu_true_bd = tf.placeholder(tf.float32, shape=(None, 1))

    Vu_it = neural_net(Vx_it)
    Vu_bd = neural_net(Vx_bd)

    Vdu_it = tf.gradients(Vu_it, Vx_it)[0]
```

```python
    Vloss_it = R["area_it"] * tf.reduce_mean(
        1 / 2 * Va_it * tf.reduce_sum(tf.square(Vdu_it), axis=1, keepdims=True)
      + 1 / 2 * Vc_it * tf.square(Vu_it)
      - Vf_it * Vu_it
    )
    Vloss_bd = R["area_bd"] * tf.reduce_mean(tf.square(Vu_bd - Vu_true_bd))

    Vloss = Vloss_it + R["penalty"] * Vloss_bd

    learning_rate = tf.placeholder_with_default(input=1e-3, shape=[], name="lr")
    optimizer = tf.train.AdamOptimizer(learning_rate)
    train_op = optimizer.minimize(Vloss)
```

开始训练

这里的代码一般不用大改，但是如果前面有改动，这里的要和之前的匹配。

随机生成定义域里的点，计算这些点上的函数值。

```python
# generate new data ("N" for number)
if epoch % R["resamp_epoch"] == 0:
    Nx_it = rand_it(R["size_it"])
    Nx_bd = rand_bd(R["size_bd"])
    Na_it = a(Nx_it)
    Nc_it = c(Nx_it)
    Nf_it = f(Nx_it)
    Nu_bd = u(Nx_bd)
```

把生成的数据喂给网络，训练一步。

```python
_, Nloss, Nloss_bd = sess.run(
    [train_op, Vloss, Vloss_bd],
    feed_dict={
        Vx_it: Nx_it,
        Vx_bd: Nx_bd,
        Va_it: Na_it,
        Vc_it: Nc_it,
        Vf_it: Nf_it,
        Vu_true_bd: Nu_bd,
        learning_rate: lr,
    },
)
```

代入采样点，计算数值解和真实解之间的误差

```
R["u_test"] = sess.run(Vu_it, feed_dict={Vx_it: R["x_test"]})
Nerror = R["area_it"] * np.mean((R["u_test"] - R["u_test_true"]) ** 2)
```

每过**plot_epoch**步，记录下当时的数值解，同时输出当前误差。

```
if epoch % R["plot_epoch"] == 0:
    print("epoch %d, time %.3f" % (epoch, time.time() - t0))
    print("total loss %f, boundary loss %f" % (Nloss, Nloss_bd))
    print("interior error %f" % (Nerror))

    u_samp = sess.run(Vu_it, feed_dict={Vx_it: R["x_samp"]})
    R["u_samp_" + str(epoch)] = u_samp
```

最后保存所有参数

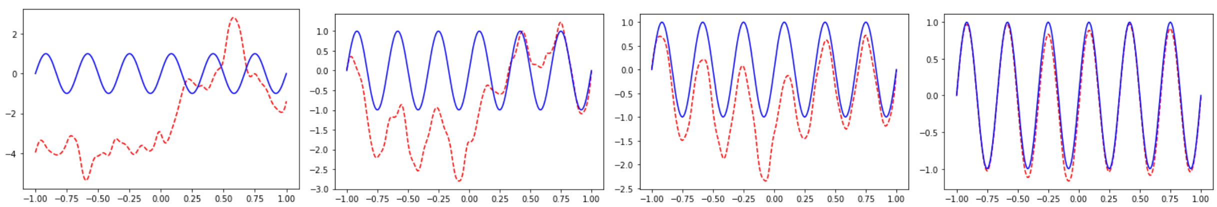
```
# save data
data_dir = os.path.join(R["record_path"], "data.pkl")
with open(data_dir, "wb") as file:
    pickle.dump(R, file)
```

测试用例

具体参数如上，分别用规模为(180,180,180)的普通全连接网络(Normal)和系数为(1,2,4,8,16,32)的6个规模为(30,30,30)的网络(Mscale)求解方程。激活函数为sin(x).

方程的精确解为$u = \sin 6\pi x$。

(mscale1-32)求解过程中，数值解随训练的变化如图2。蓝色实线是精确解，红色虚线是数值解。



(a) 0步 (b) 500步 (c) 1000步 (d) 5000步

图 2: 求解过程

两种方法error下降对比如图3。横轴是训练步数，纵轴是测试误差。

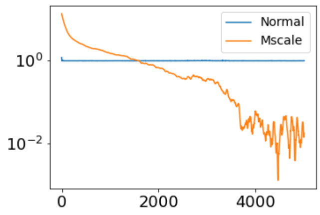


图 3: 误差下降曲线

参考文献

[1] Zhi-Qin John Xu, Yaoyu Zhang, Tao Luo, Yanyang Xiao, and Zheng Ma. Frequency principle: Fourier analysis sheds light on deep neural networks. Communications in Computational Physics, 2020, arXiv: 1901.06523.

[2] Weinan E ,Yu B. The Deep Ritz method: A deep learning-based numerical algorithm for solving variational problems[J]. Communications in Mathematics & Stats, 2018, 6(1):1-12.

[3] Ziqi Liu，Wei Cai，Zhi-Qin John Xu. Multi-scale Deep Neural Network (MscaleDNN) for Solving Poisson-Boltzmann Equation in Complex Domains[J]. Communications in Computational Physics, 2020. arXiv:2007.11207.