

透過 PINN 實現高維度偏微分方程之嚴格誤差上界

Strict Error Bounds for High-dimensional PDEs via PINNs

Student: 謝秉廷 Advisor: 謝孫源

Department of Computer Science and Information Engineering, National Cheng Kung University

1. Motivation

傳統的有限元素法 (FEM) 在解決高維度偏微分方程時，由於依幾何網格切割，會遭遇**維度災難 (Curse of Dimensionality)**並造成記憶體與運算需求呈指數增長。相對地，傳統物理資訊神經網路 (PINN) 雖利用無網格架構與深度學習逼近求解，然而其高度依賴 **Soft Constraint** 來優化偏微分方程殘差，導致預測結果缺乏嚴格的數學保證與真實誤差上界。

2. Hypercircle Method

本研究引入泛函分析中的 Hypercircle Method，將神經網路的強行硬約束在兩個正交的子空間中：

運動學容許空間 ($\mathcal{K}$)：Primal 模型被強制要求嚴格滿足幾何邊界條件與連續性。

靜力學容許空間 ($\mathcal{S}$)：Dual 模型被強制要求滿足物理平衡與守恆律。

根據廣義畢氏定理，兩模型預測值之間的能量距離 (Hypotenuse Loss)，必然構成真實物理解與模型間真實誤差的絕對上限：

$$\|p - q\|_E^2 \geq \|\text{True Error}\|_E^2$$

3. 高維度 Poisson 問題

1. 廣義 Poisson 問題 (Problem Formulation)

$$\begin{cases} -\Delta u = f, & \text{in } \Omega \\ u = g, & \text{on } \partial\Omega \end{cases}$$

2. 容許空間定義 (Admissible Spaces)

$$\mathcal{K} := \{p \mid p = \nabla u, u|_{\partial\Omega} = g\}$$

$$\mathcal{S} := \{q \mid -\nabla \cdot q = f\}$$

3. Primal 模型 ($\mathcal{K}$ 空間構造)

令 $\mathcal{N}_u(\mathbf{x})$ 為神經網路，特解 $g(\mathbf{x})$ 滿足邊界條件。

$$u_\theta(\mathbf{x}) := D(\mathbf{x})\mathcal{N}_u(\mathbf{x}) + g(\mathbf{x}), \quad p_\theta := \nabla u_\theta$$

$$D(\mathbf{x})|_{\partial\Omega} \equiv 0 \implies u_\theta|_{\partial\Omega} = g \implies p_\theta \in \mathcal{K}$$

4. $D(\mathbf{x})$ 的構造

將實體幾何 (CSG) 之布林運算 ($\cap, \cup, \setminus$) 透過 R-functions 映射為全空間可微且於邊界嚴格歸零之距離遮罩函數 $D(\mathbf{x})$ 。

5. Dual 模型 ($\mathcal{S}$ 空間構造)

引入反對稱神經網路矩陣 $\Psi \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ，其中 $\Psi_{ij} = -\Psi_{ji}$ 。

$$q(\mathbf{x}) := \nabla \cdot \Psi(\mathbf{x}) + q_{part}(\mathbf{x}), \quad \text{where } -\nabla \cdot q_{part} = f$$

Proof of Exact Conservation:

$$\nabla \cdot (\nabla \cdot \Psi) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \underbrace{\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j}}_{\text{Symmetric}} \underbrace{\Psi_{ij}}_{\text{Anti-sym}} \equiv 0$$

$$-\nabla \cdot q = -(\nabla \cdot \nabla \cdot \Psi) - \nabla \cdot q_{part} = f \implies q \in \mathcal{S}$$

4. 高維度 Elasticity (彈性力學)

1. 廣義彈性力學系統

$$\begin{cases} -\nabla \cdot \sigma = \mathbf{f}, & \text{in } \Omega \\ \mathbf{u} = \mathbf{g}, & \text{on } \partial\Omega \end{cases} \quad \text{where } \sigma = \mathbf{C} : \varepsilon(\mathbf{u})$$

2. 容許空間定義 (Admissible Spaces)

$$\mathcal{K} := \{\sigma \mid \exists \mathbf{u}, \sigma = \mathbf{C} : \varepsilon(\mathbf{u}), \mathbf{u}|_{\partial\Omega} = \mathbf{g}\}$$

$$\mathcal{S} := \{\tau \mid -\nabla \cdot \tau = \mathbf{f}, \tau = \tau^T\}$$

3. Primal 模型 ($\mathcal{K}$ 空間構造)

$$\mathbf{u}_\theta(\mathbf{x}) := D(\mathbf{x})\mathcal{N}_u(\mathbf{x}) + \mathbf{g}(\mathbf{x}) \implies \mathbf{u}_\theta|_{\partial\Omega} = \mathbf{g} \implies \sigma_\theta \in \mathcal{K}$$

4. Dual 模型 ($\mathcal{S}$ 空間構造)

對稱矩陣 $\Psi \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ，透過 Beltrami 算子 $\mathcal{B}(\cdot)$ 構造平衡應力場：

$$\tau_\theta(\mathbf{x}) := \mathcal{B}(\Psi) + \tau_{part}, \quad \text{s.t. } -\nabla \cdot \tau_{part} = \mathbf{f}$$

Proof of Exact Equilibrium:

Beltrami 內部之三階混合偏導項依據 Schwarz 定理相消

$$\nabla \cdot \mathcal{B}(\Psi) \equiv \mathbf{0} \implies -\nabla \cdot \tau_\theta = \mathbf{f} \implies \tau_\theta \in \mathcal{S}$$

5. 高維度 Stokes (蠕動流體力學)

1. 斯托克斯流問題 (Problem Formulation)

$$\begin{cases} -\nabla \cdot \sigma = \mathbf{f}, & \text{in } \Omega \\ \nabla \cdot \mathbf{v} = 0, & \text{in } \Omega \\ \mathbf{v} = \mathbf{0}, & \text{on } \partial\Omega \text{ (No-slip)} \end{cases} \quad \text{where } \sigma = -p\mathbf{I} + 2\mu\dot{\varepsilon}(\mathbf{v})$$

2. 容許空間定義 (Admissible Spaces)

$$\mathcal{K} := \{\mathbf{v} \mid \nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \mathbf{v}|_{\partial\Omega} = \mathbf{0}\}$$

$$\mathcal{S} := \{\tau \mid -\nabla \cdot \tau = \mathbf{f}\}$$

3. Primal 模型 ($\mathcal{K}$ 空間構造)

$$\mathbf{v}_\theta(\mathbf{x}) := \nabla \times (D(\mathbf{x})^2 \mathcal{N}_\psi(\mathbf{x}))$$

Proof of Exact Kinematics:

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_\theta = \underbrace{\nabla \cdot (\nabla \times (\dots))}_{\text{Div of Curl}} \equiv \mathbf{0}$$

$$\mathbf{v}_\theta = \underbrace{2D(\nabla D) \times \mathcal{N}_\psi}_{\text{Eliminates Slip}} + \underbrace{D^2(\nabla \times \mathcal{N}_\psi)}_{\text{Eliminates Penetration}}$$

$$D|_{\partial\Omega} \equiv 0 \implies \mathbf{v}_\theta|_{\partial\Omega} = \mathbf{0} \implies \mathbf{v}_\theta \in \mathcal{K}$$

4. Dual 模型 ($\mathcal{S}$ 空間構造)

繼承彈性力學構造，利用對稱矩陣 Ψ 與 Beltrami 算子 $\mathcal{B}(\cdot)$ 保證應力平衡

Future Work: Topological Limitations & Homology

本框架大量運用高階旋度與微分算子構造 Divergence-free fields。然而，根據 **Poincaré Lemma**，此空間對偶性僅在 **Simply Connected Domains** 嚴格成立。若定義域具備孔洞，將產生拓樸缺陷。未來可能引入 **Homology Groups**，透過於神經網路中疊加拓樸特解，以完善泛用幾何之數學保證。