arXiv:2302.02860v1 [math.NA] 6 Feb 2023

使用 NNLCI 求解二维麦克斯韦方程

Harris Cobb、Hwi Lee、Yingjie Liu

摘要

本文将最初在 [11], 中开发的局部收敛输入神经网络（NNLCI）应用于求解理想电导体（PEC）周围的二维麦克斯韦方程。网络输入由在两个粗网格上计算得到的低成本方程数值解局部区域构成，输出则是局部区域中心处更精确的解。我们采用近期开发的二阶有限差分法 [16] 生成输入和训练数据，以捕捉电磁波在给定终止时间时从完美电导体表面散射的情况。NNLCI 的优势在于，训练完成后，它能为高成本的高分辨率传统数值方法提供一种高效替代方案；数值实验表明，按时空网格点数量计算，计算复杂度可降低 8^3 倍。与现有直接应用神经网络求解偏微分方程的研究不同，我们的方法利用了输入解局部区域中的麦克斯韦方程局部依赖域，因此更加简单，同时仍然稳健。我们证明，可以使用一些完美电导体的数据训练神经网络，从而预测几何形状迥异、且未出现在任何训练样例中的其他完美电导体的精确解。

1 引言

近年来，随着图形处理器（GPU）等计算能力的提升，以及可获取数据的不断丰富，人工神经网络的应用已渗透到计算科学的广阔领域。众多现有研究中的一些具体例子包括生物学应用 [24], 图像处理 [15], 不确定性量化 [35]。神经网络（NN）的实用性可归因于其通用逼近性质这一经典结论 [5, 10], ；我们目前的工作则是在数值求解偏微分方程（PDE）的背景下，对这一结论的又一次验证。更具体地说，我们关注的是计算数值解这一所谓的正问题，而非识别其背后偏微分方程的反问题，尽管后者在科学计算文献中同样受到广泛关注 [20, 14, 9]。

一种使用神经网络求解偏微分方程的方法，是用深度神经网络逼近从所有已知信息（例如初值、边界值等）到未知解的映射，并利用许多已有解进行训练，参见例如 [17]。另一种方法是用深度神经网络逼近从某个时空位置到该处解的映射，并将损失函数定义为偏微分方程残差误差的某种形式，

再加上用于强制满足初始条件和边界条件等物理数据的惩罚项。深度伽辽金方法 [34] 引入了一种损失函数，其中包含偏微分方程有限差分近似的残差误差。深度 Ritz 方法 [7] 引入了一种损失函数，其中包含偏微分方程有限元近似的 Ritz 能量。物理信息神经网络 (PINN) [31] 利用精确的自动微分[1]来计算损失函数，该函数旨在确保与控制偏微分方程保持一致。这些方法利用神经网络的逼近性质，将其作为偏微分方程解的试探解。除了学习解之外，研究人员还探索了训练神经网络学习解算子（即偏微分方程参数的函数）的可能性 [39]。PINN 的成功应用领域十分广泛，包括但不限于流体流动、热传递和光学 [19, 2, 3]。持续开展的研究工作促成了 PINN 本身的一些改进，例如 [27], 在损失函数中纳入来自低保真度和高保真度的部分已知解的信息 [21]；此外，还出现了相关方法，例如 [38]中使用的物理信息卷积神经网络。关于 PINN 和更经典的基于神经网络的方法的概述，请参阅 [4] 及其中的参考文献。我们还指出了一些替代方法，例如基于高斯过程的方法 [28], 以及由神经网络增强的时间步进策略 [33]。

现有文献已展示神经网络带来的精度提升 [29], ，越来越多的研究致力于将神经网络与传统数值方法相结合的降复杂度混合方法 [18, 23]。本文采用不同的神经网络方法，使用近期开发的局部收敛输入神经网络（NNLCIs）架构 [11, 12]。NNLCIs 已成功应用于一维和二维空间中的气体动力学非线性欧拉方程，作为黑箱工具，利用两个收敛的、低成本、低保真度的数值解，生成包含激波与接触间断复杂相互作用的高保真解。本文将 NNLCIs 用作计算节省工具，探索其另一种应用，而非研究其高表达能力及复杂的内部工作机制；这些机制尚未得到充分且严谨的理解。我们将重点放在神经网络能否获得提升准确度的预测能力上：用户应谨慎设计网络输入，而不是专注于网络架构，例如激活函数的选择。

我们以求解带角点的弯曲理想电导体周围的麦克斯韦方程组为例，展示 NNLCIs 的实用性。电磁波的散射具有重要的实际意义，并应用于天线设计等工业领域 [22], ，在这些应用中，可能需要针对理想电导体目标的各种形状进行重复计算。理想电导体边界几何形状可能存在的高度复杂变化，正是我们的工作区别于 NNLCIs 早期应用之处。我们说明，只需针对某些 PEC 形状对 NNLCIs 进行局部训练，就能够从不同形状的完美电导体所对应的两个粗网格解中提取出更准确的解。预计完美电导体局部几何形状的参数空间比全局几何的参数空间更易处理；毕竟，麦克斯韦方程组的解析解，因而其数值解，都具有局部依赖域。我们充分利用了这种局部性来近似底层未知的多元映射，避免采用更传统的方法，即将整个计算域中的所有已知数据作为单一输入。

我们提出的基于 NNLCI 的方法，很大程度上得益于近期开发的数值格式 [12] ，该格式用于计算输入网络的数据。该格式的

吸引力在于，它能以简单、系统的方式处理一般曲面 PEC 形状的边界条件，即使这些形状带有角点也不例外。具体来说，该格式基于水平集框架 [25], 、偏微分方程扩展技术 [30, 8]以及所谓的客体值，自动构造幽灵值。该格式的另一项优点是具有二阶精度，这是广受欢迎的 Yee格式 [37] 在自由空间中、没有任何完美电导体时能够达到的精度。我们还要指出，我们所采用的数值格式基于均匀矩形网格；这类网格尤其适合 NNLCIs，因为其输入是在两种不同分辨率下的有限差分模板，需要在相同的空间和时间位置上对齐。

本文其余部分安排如下。第 2 节介绍散射问题，以及我们用于生成训练数据和测试数据的数值格式。随后，我们介绍 NNLCI，重点说明其输入的格式。第 3 节给出数值实验结果，以展示我们方法的有效性。最后，我们在第 4 节总结全文。

2 问题表述

2.1 控制偏微分方程与基础数值方法

经典麦克斯韦方程组描述了电磁场在介质中的演化；本文假设介质是各向同性且均匀的。具体而言，我们考虑电磁波在自由空间中遇到完美电导体时的散射，即

$$\epsilon_r \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \nabla \times \mathbf{H}$$
$$\mu_r \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E}$$

满足某些初始条件和理想导体界面边界条件，具体如下：

$$\mathbf{E} \times \mathbf{n} = \mathbf{0} \text{ and } \mathbf{H} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0}.$$

此处， ϵ_r 和 μ_r 分别表示相对介电常数和磁导率，$\mathbf{n}$ 表示理想导体界面的外单位法向量。不失一般性，令$\epsilon_r = \mu_r = 1$，并为简化起见，假设波沿z–方向呈横磁极化，由此得到以下二维系统方程

$$\begin{aligned} \frac{\partial H_x}{\partial t} &= -\frac{\partial E_z}{\partial y} \\ \frac{\partial H_y}{\partial t} &= \frac{\partial E_z}{\partial x} \\ \frac{\partial E_z}{\partial t} &= \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y}. \end{aligned} \tag{1}$$

为了对自由空间中的动力学（1）进行数值模拟，我们首先选取单位正方形$[0,1]^2$ 作为计算域。在该计算域上叠加均匀矩形

网格 $\{(x_i, y_j)\}$，其中 $\Delta x = \Delta y$。我们采用 [32] 中的完美匹配层实现方式来施加远场吸收边界条件，从而避免 PEC 上的反射波重新进入计算域。为此，我们按照总场/散射场公式 [13] 处理，并指定入射波。

我们应用有限差分法 [16] 计算式（2）的数值解，这些数值解将作为NNLCI的训练和测试数据。该方法主要由三个要素组成，其中第一个是一级格式

$$U_{i,j}^{n+1} = \left(\frac{1}{5}\mathcal{C} + \frac{4}{5}\mathcal{F}\right) U_{i,j}^{n}. \tag{2}$$

其中$U_{i,\ j}^{n}$表示时间层级 $t = n\Delta t$ 和空间位置（x_i，y_j）处的数值格式。此处，$\mathcal{C}$ 表示时间前向、空间中心的数值格式，而 $\mathcal{F}$表示经典的Lax-Friedrichs格式。我们选择格式（2），因为该格式已在 [16, 40] 中用于模拟电磁波关于完美电导体的散射，但也可以考虑更一般的格式（$\theta\mathcal{C} +$ （$1 - \theta$）$\mathcal{F}$），其中 $0 \leq \theta \leq 1$ [36]。第二个要素是通过基于水平集的偏微分方程延拓技术构造完美电导体内部的幽灵值，以及引入客体值。所构造的幽灵值应具有局部二阶精度，以确保格式（2）的一阶精度。最后一个要素是前后误差补偿与校正（BFECC）方法 [6]，该方法通常能够使奇数阶格式的精度提高一阶[26]。因此，在当前设置下，我们计算得到的数值解具有二阶精度。此外，BFECC通过允许使用更大的CFL数来提高数值稳定性，因此我们选择 $\Delta t = \Delta x$，而这一取值在其他情况下是不允许的。计算所得数值解的一个示例如图1所示，其中仅包含总场区域。

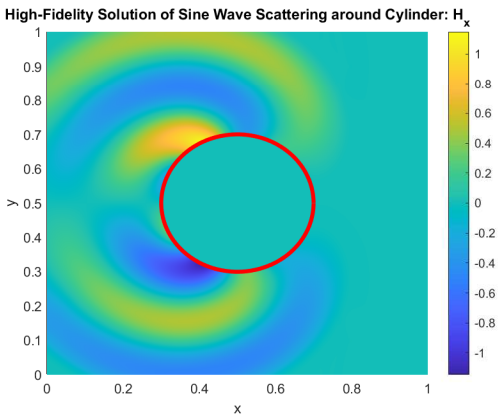


图1：　H_x 0.8秒后圆柱体周围的散射。

我们关注的问题是：神经网络是否能够根据在两个粗网格上计算得到的数值解，生成高保真数值解。至少在我们展示的案例中，答案是肯定的，而这得益于我们将在下文介绍的 NNLCI。

2.2 NNLCIs 的应用

我们采用了 [11, 12] 中所使用的神经网络架构。该网络是一个简单的全连接前馈网络，在每次迭代中使用多步 Adams优化器，并以最后一步 L-BFGS 取代随机梯度下降。我们修改了其工作中所使用的优化器超参数，将 L-BFGS 的学习率设为 3e-6，将 Adams 的学习率设为 1e-5。我们的网络由 4 个网络层组成，每层包含 50 个神经元，因此可以轻松进行训练；然而，在数值实验中，我们观察到该网络具有很强的预测能力。

我们将上述数值格式迭代至固定的终止时间 $T = 0.8$（除非另有说明，在大多数实验中均如此），并采用三种不同的数值分辨率：两种低保真分辨率和一种高保真分辨率。具体而言，对于两种低保真解，我们取 $\Delta x = 1/40, 1/80$ ；对于高保真解，我们取 $\Delta x = 1/640$ ，并将其视为“精确”的参考解。与早期工作[11]中采用的两个不同时间层不同，我们只在终止时间存储所有数值解。这是因为麦克斯韦方程组 (1) 具有时间可逆性，因此前一时间步的解由当前时间步的解唯一确定，所以我们省略所有表示时间的符号。

根据存储的数值解，我们按如下方式为网络准备输入数据。记 (i', j')、(i'', j'') 和 (i, j) 分别表示最粗网格、较细网格和参考网格上的同一空间位置。我们考虑最粗网格中一个以 (i', j') 为中心的 3×3 窗口。本文仅讨论中心点 (i', j') 及其全部 8 个相邻网格点均位于完美电导体 (PEC) 外部的全场区域内的情形。今后，我们将考虑放宽这一限制。对于最粗网格，我们将 H_x、H_y、E_z 各自对应的 3×3窗口重塑为 1×9 向量

$$\{(H_x)_{i'-1,j'-1}, (H_x)_{i',j'-1}, (H_x)_{i'+1,j'-1}, \ldots, (H_x)_{i'-1,j'+1}, (H_x)_{i',j'+1}, (H_x)_{i'+1,j'+1}\}$$

$$\{(H_y)_{i'-1,j'-1}, \ldots, (H_y)_{i'+1,j'+1}\}, \{(E_z)_{i'-1,j'-1}, \ldots, (E_z)_{i'+1,j'+1}\}$$

并将全部 27 个值拼接成一个向量。同样，我们从较细网格中取值

$$\{(H_x)_{i''-2,j''-2}, (H_x)_{i'',j''-2}, (H_x)_{i''+2,j''-2}, \ldots, (H_x)_{i''-2,j''+2}, (H_x)_{i'',j''+2}, (H_x)_{i''+2,j''+2}\}$$

$$\{(H_y)_{i''-2,j''-2}, \ldots, (H_y)_{i''+2,j''+2}\}, \{(E_z)_{i''-2,j''-2}, \ldots, (E_z)_{i''+2,j''+2}\}$$

并将所有值拼接起来。因此，输入向量由 54 个输入值组成

$$\{(H_x)_{i'-1,j'-1}, \ldots, (E_z)_{i''+2,j''+2}\},$$

然后将其输入我们的网络，以生成输出向量

$$\{(H_x)_{i,j}, (H_y)_{i,j}, (E_z)_{i,j}\}.$$

图 2 展示了输入数据的准备方式，其中 U 表示包含全部三个分量 H_x, H_y, E_z 的向量。

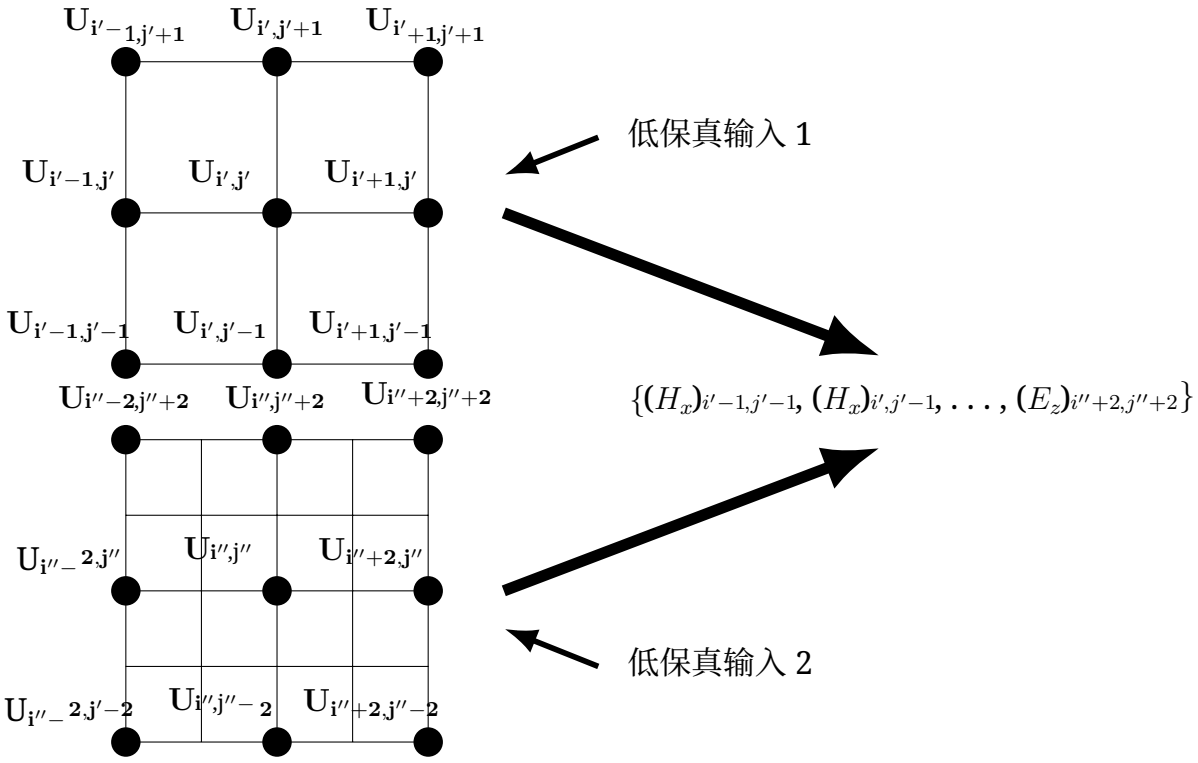


图2：为 2CGNN 准备输入的流程。

只要在所有 3×3窗口中保持一致，输入数据的排列顺序并不重要。按照 [12], 中的方法，可以将时间步长 Δt 作为输入数据的一部分。不过，在本研究中，我们选择的较简单输入格式已足以生成准确的解。

我们对网络进行训练，直到训练误差达到 1e-5。训练和测试数据由以下入射波的扰动组成：

$$\begin{aligned} H_x(x,y,t) &= 0 \\ H_y(x,y,t) &= -\sin(\omega(x-t)))\chi(t-x) \\ E_z(x,y,t) &= \sin(\omega(x-t))\chi(t-x) \end{aligned} \tag{3}$$

其中， $\omega = 2\pi/0.3$ 为角频率， $\chi(z)$表示 Heaviside 阶跃函数。我们还考虑了不同形状的完美电导体，以说明网络的鲁棒性。网络训练完成后，我们通过比较预测数值解与较细网格输入解在总场区域内的相对误差来评估其性能。

3 数值实验

3.1 不同源波

我们首先展示网络在预测高保真解方面的性能，其中对式 (3) 中入射波的振幅或角频率进行扰动。除非另有说明，我们固定完美电导体的几何形状为圆形 PEC。

该圆形 PEC 的中心位于 (0.5, 0.5)，半径为 0.2。此外，训练和测试所用的输入向量均取自整个计算域中的所有 3×3 可容许输入窗口。

3.1.1 改变振幅

我们考虑入射波振幅最高达 10% 的扰动。更具体地说，我们计算在 0、 ± 2、 ± 3、 ± 4、 ± 5、 ± 6、 ± 7、 ± 8、 ± 10% 扰动下的两个粗网格解和参考解，这些扰动对应于振幅从 0.9 到 1.1 的 17 个数据集。随后，将计算得到的数据分为训练集或测试集。第一个实验在偶数扰动上进行训练，在奇数扰动上进行测试。第二个实验在 0、 ± 10% 扰动上进行训练，并在其余扰动上进行测试。最后，我们在 0、 ± 5% 扰动上进行训练，并在其余扰动上进行测试。在本文所考虑的所有情况下，我们都将网络训练损失降低至相同的值 $2.5e-5$。我们计算预测解和较细网格输入解相对于参考解的 l_2 范数相对误差。表（1）展示了相对于测试数据中扰动数量的平均误差。

圆形 PEC：修改振幅					
偶数扰动		$0\%, \pm 10\%$		$0\%, \pm 5\%$	
更精细的输入误差	0.1634	更精细的输入误差	0.1634	更精细的输入误差	0.1634
预测误差	0.0031	预测误差	0.0029	预测误差	0.0042

表 1: 圆形完美电导体在振幅变化时的预测解准确度 s.

由于麦克斯韦方程组 (1) 具有尺度不变性，因此，对于扰动振幅，可以使用训练间隔相当大的少量训练数据。我们注意到，在前两个实验（使用偶数扰动进行训练，以及 0% ± 10%）中，所有测试向量都属于训练数据的凸包，因此相应的输出是根据训练数据线性插值得到的。然而，最后一种情况涉及一些测试向量，其期望输出需要通过线性外推得到，这表明了我们方法的一项稳健特性，而这一特性在早期工作中并未被考虑[11]。

3.1.2 变化频率

接下来，我们考虑改变入射波的角频率。我们希望展示当扰动频率对相应解的影响呈非线性时，网络的性能。我们按照振幅案例生成训练数据和测试数据，最高达到 ± 10%。结果见图3和图4。从表2可以看出，当训练间隔较小时，准确度提升显著，涵盖了所有偶数扰动。然而，当训练间隔扩大到 ± 10%且预期网络对训练数据进行二次插值时，准确度并未得到明显提升。另一方面，在不增加训练数据数量的情况下，仅将训练间隔缩小至 ± 5% 的扰动范围，我们也没有观察到准确度有更大提升。为排除准确度提升有限是由外推造成的可能性，

我们将测试数据限制在 $\pm 7\%$和 $\pm 8\%$，并设置了两种训练案例：第一种为0% $\pm 10\%$，第二种为0% $\pm 5\%$。从表5可以看出，训练数据的数量比训练间隔更为关键，因为它限制了神经网络近似的复杂度。

请注意，在以下及后续图表中，H_x 场在 PEC 的边界内部似乎不为零。这仅仅是 MatLab 生成表面图时存在的局限所致：每个单元格的颜色由其左上角的值决定，因此并未违反 PEC 内部的条件。此外，由于我们目前仅使用完全包含在总场内的 3×3 窗口作为输入，因此尚不能预测位于 PEC Δx 内部的值。为使图形更加清晰，我们采用了高保真解中 PEC 周围那些无法预测的值。不过，在未来的工作中，我们将尝试一直预测到 PEC 的边界，甚至包括边界上的值；这将通过修改数值格式来实现，从而以更高阶的方式恢复幽灵值。

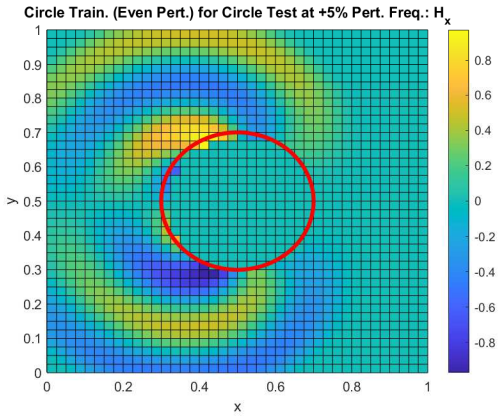


图3：网络在所有偶数扰动上训练后，0.8秒时平面内频率扰动为 $+5\%$ 的情况下，H_x 从圆上散射的预测值。

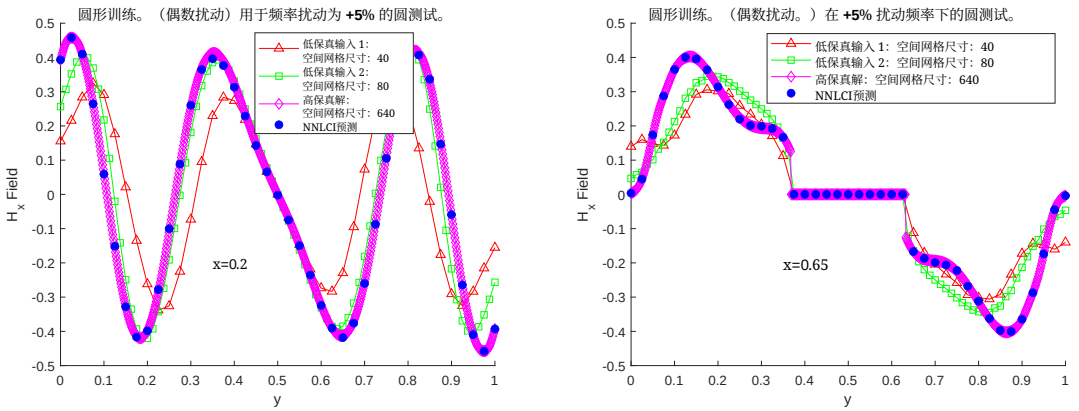


图4：在不同 y 值下计算得到的 H_x 横截面。

圆形 PEC：修改频率					
偶数扰动		$0\%, \pm 10\%$		$0\%, \pm 5\%$	
更精细的输入误差 预测误差	0.1663 0.0087	更精细的输入误差 预测误差	0.1664 0.0430	更精细的输入误差 预测误差	0.1672 0.0651

表2　　：不同频率下圆形 PEC 的预测解准确度　　.

圆形 PEC：调整频率			
$0\%, \pm 10\%$		$0\%, \pm 5\%$	
更精细的输入误差 预测误差	0.1690 0.0427	更精细的输入误差 预测误差	0.1690 0.0734

图 5：有限测试数据下，圆形 PEC 在不同频率下的预测解准确度。

接下来，我们将圆形 PEC 改为以 (0.5, 0.5) 为中心、边长为 0.4 的正方形。我们证明，尽管解析解存在角点奇异性，网络仍然能够预测高保真解。我们使用了与圆形情形相同的扰动频率训练数据和测试数据。结果显示于图 6 和图 7 中。我们从表 8 可以观察到，结果与圆形情形相似，尽管每个训练间隔对应的误差更加明显。

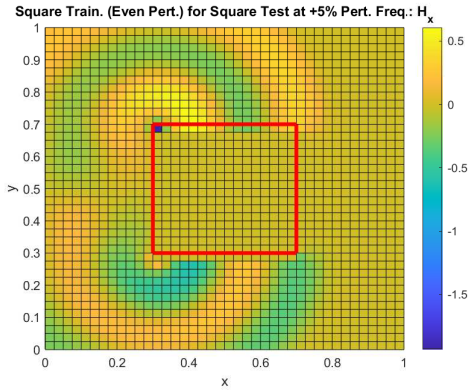


图 6：在所有偶数（频率）扰动上训练模型后，H_x 在平面中对正方形的散射在 $+5\%$ 扰动频率下、0.8秒时的预测值。

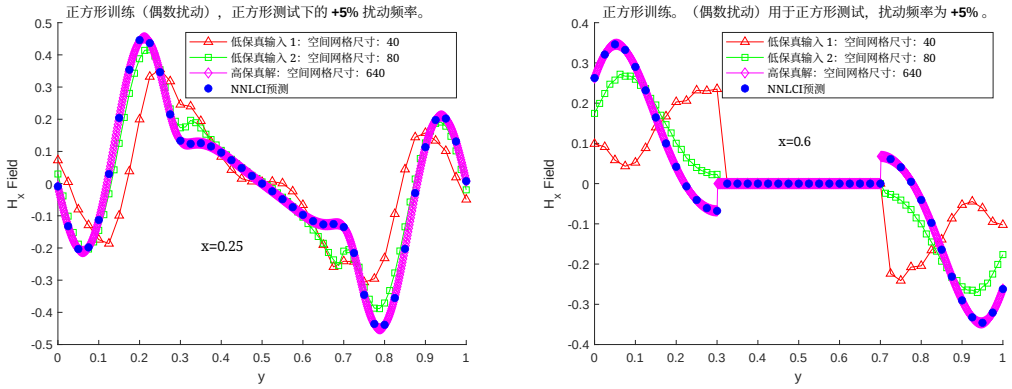


图 7：不同 y 值下计算得到的 H_x 横截面。

方形PEC：修改频率					
偶数扰动		$0\%, \pm 10\%$		$0\%, \pm 5\%$	
更精细的输入误差	0.1500	更精细的输入误差	0.1501	更精细的输入误差	0.1505
预测误差	0.0095	预测误差	0.1006	预测误差	0.0761

图 8：不同频率下方形PEC预测解的准确度 .

3.1.3 旋转

众所周知，麦克斯韦方程组 (1) 具有旋转不变性。如果PEC物体也具有旋转对称性（如圆形物体），那么当平面入射波旋转时，解也只需相应旋转即可。然而，我们发现，当网络使用一种入射波方向进行训练、再在另一种配置下测试时，准确度提升有限。这可以解释为训练完全是局部的，因此网络无法识别训练数据和测试数据的整体旋转不变性。另一方面，我们可以轻松地将旋转后的数值解加入训练数据集，而无需重新计算。此外，许多实际应用涉及形状各异的PEC，其解的旋转对称性不存在或无法预先确定。因此，神经网络训练预计需要包含从不同入射角进入计算域的入射波，无论训练本身是局部的还是全局的。

3.2 变化的完美电导体边界

现在，我们考虑训练数据和测试数据包含不同形状的完美电导体时，神经网络的应用。与受扰动的入射波相比，相关几何参数空间的复杂性更高。预计网络的局部训练将在针对完美电导体局部边界几何形状的变化实现模型降阶方面发挥关键作用。除非另有说明，入射波均为式 (3) 中规定的未受扰动入射波。

3.2.1 圆形 PEC 的修改

我们首先考虑改变圆形 PEC 的半径。与之前考虑的情况一样，我们针对未扰动半径 0.2 生成了对应的数据，扰动值为 0、$\pm 2\%$ $\pm 3\%$ $\pm 4\%$、$\pm 5\%$ $\pm 6\%$ $\pm 7\%$ $\pm 8\%$ $\pm 10\%$。与改变振幅的情况类似，我们将生成的数据分为训练数据和测试数据。我们观察到，即使训练数据数量相当少，准确度也显著提高。

圆形 PEC：修改半径					
偶数扰动		$0\%, \pm 10\%$		$0\%, \pm 5\%$	
更精细的输入误差	0.1625	更精细的输入误差	0.1624	更精细的输入误差	0.1623
预测误差	0.0086	预测误差	0.0176	预测误差	0.0163

表3：半径变化时预测解的准确度

接下来，我们将圆形 PEC 截断为张角各不相同的圆形扇区（见图 9 和图 10）。起初，我们生成了张角从 30 度到 360 度、以 30 度为增量的解。然而，我们发现，无论训练集和测试集如何划分，由于训练间隔过大，神经网络都无法给出准确的预测。另一方面，当张角的增量为 5 度时，我们的网络能够提高低保真解的准确度。具体而言，我们以张角增量为 10 度的数据进行训练，即 $45°$、$55°$、.....、$125°$、$135°$，然后在偶数扰动 $50°$、$60°$、.....、$120°$、$130°$ 上进行测试，见图 11 和图 12。随后，我们考虑将训练间隔扩大到 $15°$ 个增量，因为在某些实际应用中，强制采用较小的训练间隔可能并不理想。也就是说，我们使用 $45°$、$60°$、.....、$120°$、$135°$ 进行训练，并在其余扰动上进行测试，从而获得与增量为 $5°$ 时相似的准确度提升，见表4。

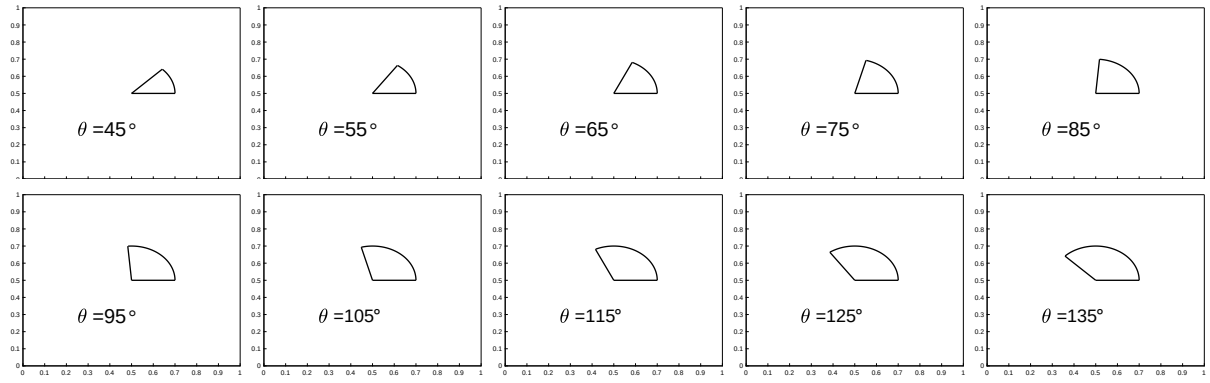


图 9：训练样例的形状

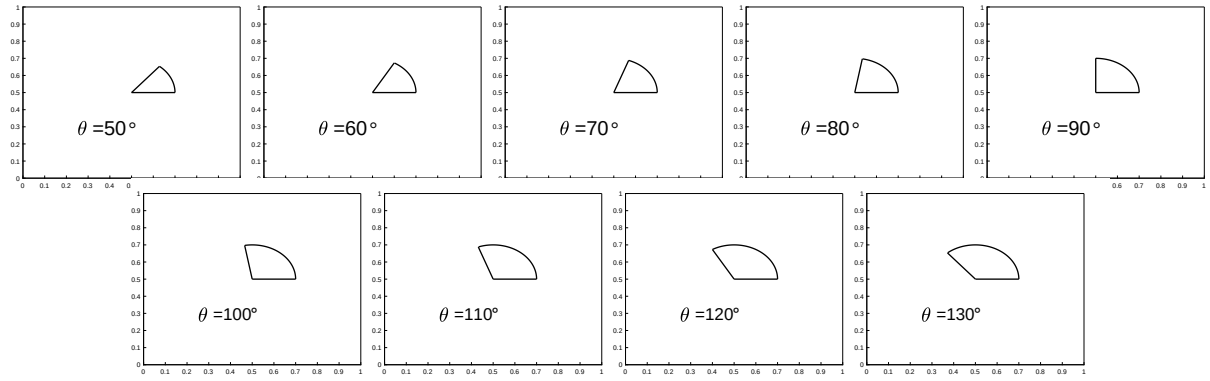


图10：测试示例的形状

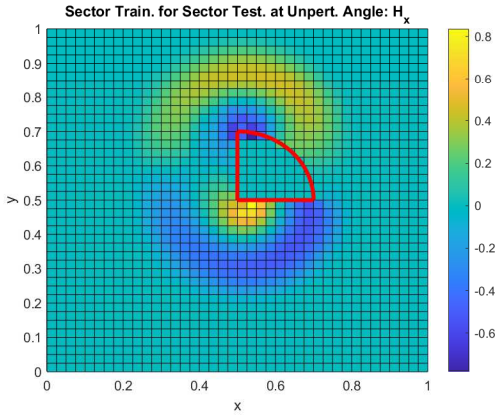


图11：模型在经过 10° 角度增量训练后，于0.8秒时 H_x 在平面上从 90° 扇区散射的预测值。

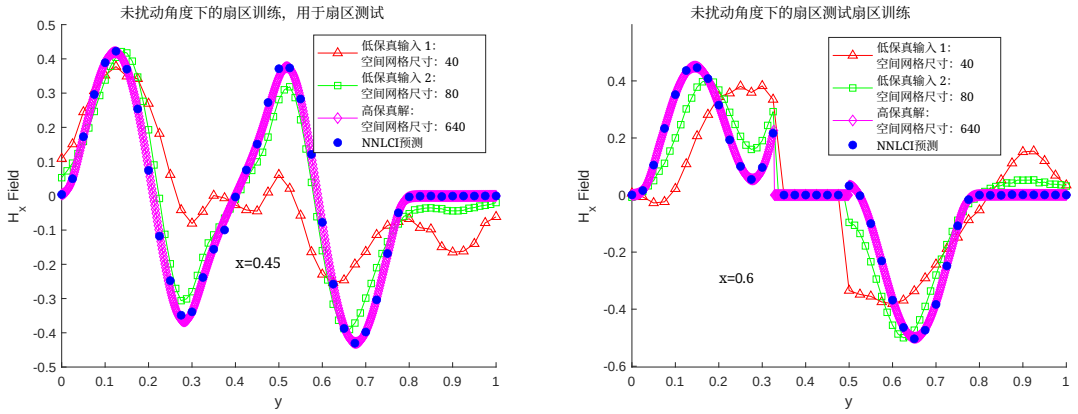


图12：上述案例在不同 y 值下的横截面，对比预测值与输入值和参考值。

从45度到135度的扇区，增量为5度			
10° 训练中的增量		15° 训练中的增量	
更精细的输入误差	0.1987	更精细的输入误差	0.1991
预测误差	0.0344	预测误差	0.0459

表4：不同角度完美电导体扇区的预测解准确度

3.2.2 圆形与方形完美电导体之间

我们同时考虑小节3.1.2中的圆形 PEC 和方形PEC。这两个 PEC 在拓扑上是等价的，但据我们所知，在每种情况下，都需要分别计算相应的解。为展示基于 NNLCI 的方法的有效性，我们针对上述每个参数分别生成三组不同的训练数据，即对圆形 PEC 的频率、振幅和半径进行所有（最高达 $\pm 10\%$）的扰动。对于每组训练数据，我们使用方形 PEC 的未扰动情形作为测试情形。从表5可以看出，频率和半径情形的表现都同样良好，而振幅数据由于训练数据的退化而表现不佳。结果表明，我们的局部训练方法能够应对

矩形 PEC 角点周围散射的定性差异。

反过来，我们在频率和矩形边长均受到各种扰动的方形PEC上进行训练。随后，我们在圆形 PEC 的未扰动情形下进行测试，发现准确度提升有限（表 6）。一种可能的解释是，方形PEC的训练数据涵盖的入射波与PEC相互作用的角度范围较小，因此可能不足以使模型具备预测圆形 PEC 在更广角度范围下表现的能力。相关地，我们将探索如何仅凭少量相对简单的训练数据，准确预测任意 PEC 形状对应情形的可能性留待未来工作。



图 13：在圆形的所有偶频扰动上训练模型后，0.8秒时平面上正方形的 H_x 散射的不同形状预测

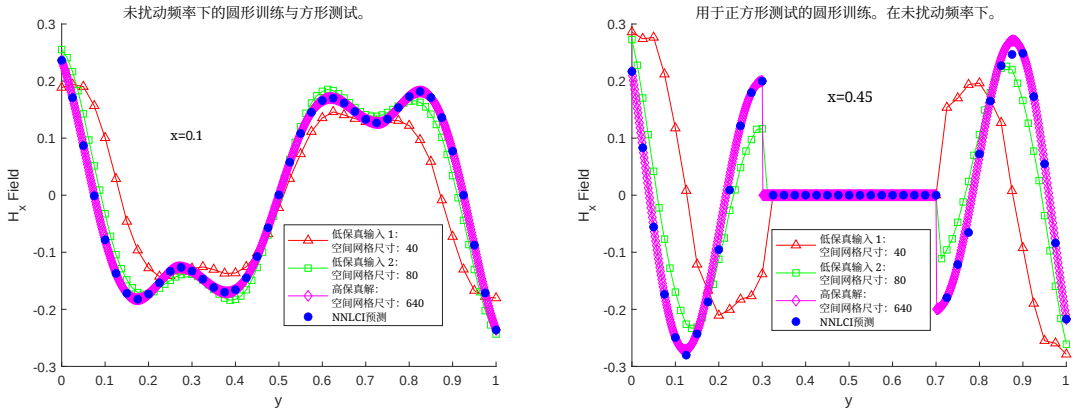


图1 4：上述案例在不同 y 值下的横截面，对比预测值、输入值和参考值

从圆形 PEC预测方形PEC					
圆形频率		圆形振幅		圆形半径	
更精细的输入误差	0.1484	更精细的输入误差	0.1668	更精细的输入误差	0.1480
预测误差	0.0917	预测误差	0.2190	预测误差	0.0937

表5：通过针对圆形 PEC 的训练得到的方形PEC预测解的准确度



图15：在对正方形的所有偶频扰动进行模型训练后，0.8秒时平面上 H_x 从圆处散射的不同形状预测

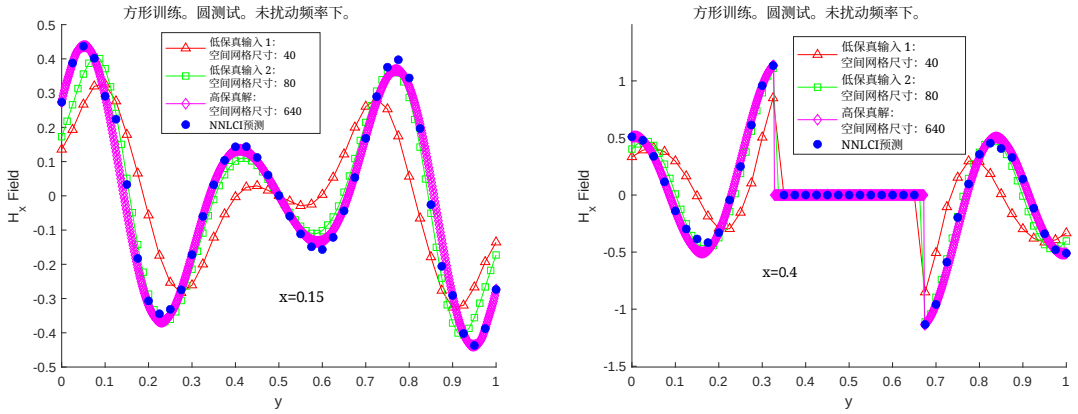


图16：上述情况在不同 y 值下的横截面，比较预测值与输入值和参考值

根据方形PEC预测圆形 PEC			
方形频率		方形边长	
更精细的输入误差	0.1634	更精细的输入误差	0.1634
预测误差	0.1442	预测误差	0.1274

表 6：通过针对方形 PEC 的训练，预测解对圆形 PEC 的准确度

3.2.3 四分之一圆预测正方形

在最后这个测试用例中，我们旨在利用四分之一圆PEC的未扰动（频率和振幅均未受扰动）数据，预测方形PEC的未扰动情形。起初，我们考虑使用原始四分之一圆以及关于 $y = 0.5$ 反射后的四分之一圆的未扰动解作为训练数据，并让它们都受到终止时间为 $T = 0.8$ 时的入射波 (1) 作用。将反射PEC纳入训练数据，是为了更好地捕捉方形PEC的角点；然而，我们发现 NNLCI 无法给出准确的预测。

作为补救措施，我们按如下方式修改训练数据：将原始和反射的四分之一圆PEC均沿负 x 轴方向平移 0.2，使得入射

波在首次到达正方形和四分之一圆PEC时（对于三种网格尺寸中的每一种）处于相同相位。然后，我们进一步丰富训练数据，为圆形 PEC 加入三个额外的训练数据，即频率扰动情形 0 和 $\pm 2\%$。我们这样做是因为两个训练样例（无论在此处还是一般情况下）不足以给出准确预测。由此得到的结果见图17和图18以及表7。我们指出，平移后的四分之一圆PEC可以替换为未平移的四分之一圆，并调整终止时间，以匹配高保真解中入射波的相位。不过，由于我们的数值格式存在色散误差 [16]，波的传播速度会因网格尺寸而异，因此我们必须确保训练数据涵盖全部三种相位。未来，我们希望仔细考察数值误差在本数值格式中的传播，以及它对 NNLCI 实现的影响。

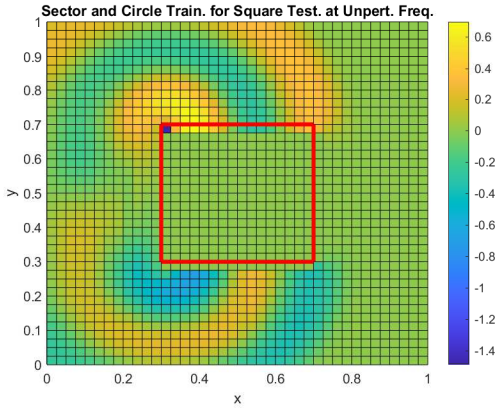


图17：在使用 90° 扇区和圆形结构频率扰动数据的组合对模型进行训练后，于0.8秒时平面上 H_x 散射到正方形所产生的不同形状预测。

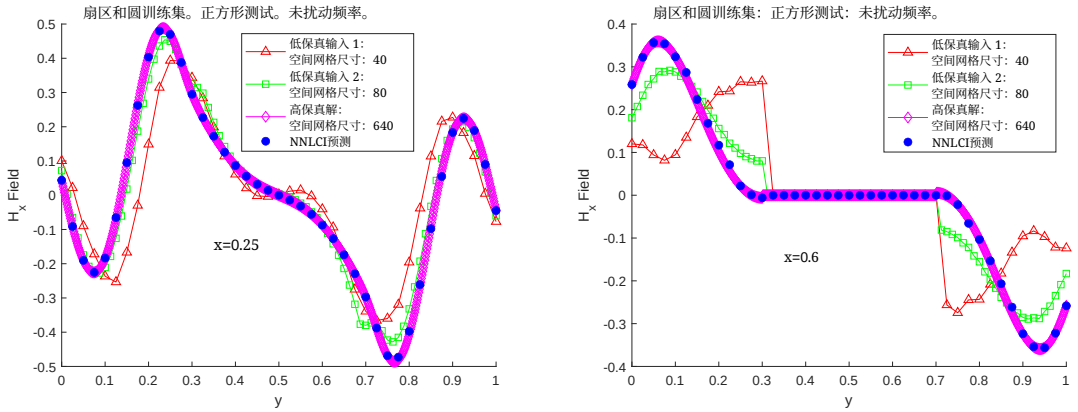


图18：上述案例在不同 y 值处的横截面，对比预测值、输入值和参考值。

根据四分之一圆预测正方形	
更精细的输入误差	0.1484
预测误差	0.0381

表7：通过在平移四分之一圆PEC和圆形 PEC上进行训练得到的方形PEC预测解的准确度

4 结论

在本研究中，我们应用 NNLCI 预测电磁波在完美电导体周围散射的精确解。网络训练完成后，以两个成本低廉但具有二阶精度、构成收敛序列的数值解作为输入，从而生成针对不同形状完美电导体的高保真度数值解。我们的方法之所以稳健，关键在于网络的局部训练，即使存在完美电导体，局部训练仍然有效。我们希望对 NNLCI 进行理论分析，从而深入了解如何为网络输入选择合适的网格尺寸，以及如何修改网络架构以提升性能。

5 致谢

作者感谢 Haoxiang Huang 在神经网络编码方面提供的帮助。

参考文献

[1]Atilim Gunes Baydin、Barak A Pearlmutter、Alexey Andreyevich Radul 和 J ef- frey Mark Siskind。机器学习中的自动微分：综述。《机器学习研究杂志》，18:1–43，2018年。[2] Shengze Cai、Zhicheng Wang、Sifan Wang、Paris Perdikaris 和 George Em Karni- adakis。用于热传递问题的物理信息神经网络。《传热学杂志》，143(6)，2021年。[3] Yuyao Chen、Lu Lu、George Em Karniadakis 和 Luca Dal Negro。用于纳米光学和超材料逆问题的物理信息神经网络。《Optics Express》，28(8):11618–11633，2020年。[4] Salvatore Cuomo、Vincenzo Schiano Di Cola、Fabio Giampaolo、Gianluigi Rozza、Maizar Raissi 和 Francesco Piccialli。通过物理信息神经网络实现科学机器学习：现状与未来方向。arXiv 预印本 arXiv:2201.05624，2022年。[5] George Cybenko。通过 S 形函数的叠加进行逼近。《控制、信号与系统数学》，2(4):303–314，1989年。[6] Todd F Dupont 和 Yingjie Liu。用于消除水平集函数梯度不均匀所引发误差的前后误差补偿与校正方法。《计算物理学杂志》，190(1):311–324，2003年。[7] Weinan E 和 B. Yu。深度 Ritz 方法：一种用于求解变分问题的深度学习数值算法。《数学与统计通讯》，第6卷：1–12，2018年。

[8] R. P. Fedkiw、T. Aslam、B. Merriman 和 S. Osher。一种针对多材料流界面的非振荡欧拉方法（幽灵流体法）。《计算物理学杂志》，152:457–492，1999年。[9] Yuchen He、Sung Ha Kang、Wenjing Liao、Hao Liu 和 Yingjie Liu。基于含噪数据的稳健偏微分方程识别。arXiv 预印本 arXiv:2006.06557，2020年。[10] Kurt Hornik、Maxwell Stinchcombe 和 Halbert White。利用多层前馈网络对未知映射及其导数进行通用逼近。《神经网络》，3(5):551–560，1990年。[11] Haoxiang Huang、Yingjie Liu 和 Vigor Yang。基于依赖域输入和收敛序列的神经网络求解守恒律，第一部分：一维黎曼问题。arXiv 预印本 arXiv:2109.09316，2021年。[12] Haoxiang Huang、Yingjie Liu 和 Vigor Yang。用于求解守恒律的局部收敛输入神经网络（NNLCI），第二部分：二维问题。arXiv 预印本 arXiv:2204.10424，2022年。[13] Umran S Inan 和 Robert A Marshall。《计算电磁学：时域有限差分法》。剑桥大学出版社，2011年。[14] Sung Ha Kang、Wenjing Liao 和 Yingjie Liu。Ident：通过数值时间演化识别微分方程。《科学计算杂志》，87(1):1–27，2021年。[15] Alex Krizhevsky、Ilya Sutskever 和 Geoffrey E Hinton。利用深度卷积神经网络实现 ImageNet 分类。《ACM 通讯》，60(6):84–90，2017年。[16] Hwi Lee 和 Yingjie Liu。一种基于幽灵点的二阶精度有限差分法：在均匀正交网格上求解 PEC 周围的电磁散射。arXiv 预印本 arXiv:2209.00740，2022年。[17] Zongyi Li、Nikola Kovachki、Kamyar Azizzadenesheli、Burigede Liu、Kaushik Bhattacharya、Andrew Stuart 和 Anima Anandkumar。用于参数化偏微分方程的傅里叶神经算子。arXiv 预印本 arXiv:2010.08895，2020年。[18] Dehao Liu 和 Yan Wang。多保真度物理约束神经网络及其在材料建模中的应用。《机械设计杂志》，141(12)，2019年。[19] Zhiping Mao、Ameya D Jagtap 和 George Em Karniadakis。用于高速流的物理信息神经网络。《计算力学与工程中的计算方法》，360:112789，2020年。[20] Kazem Meidani 和 Amir Barati Farimani。利用提取的物理特征进行二维偏微分方程的数据驱动识别。《计算力学与工程中的计算方法》，381:113831，2021年。[21] Xuhui Meng 和 George Em Karniadakis。一种从多保真度数据中学习的复合神经网络：在函数逼近和逆偏微分方程问题中的应用。《计算物理学杂志》，401:109020，2020年。

[22] Haksu Moon、Gil-Young Lee、Chi-Chih Chen 和 John L Volakis。极低剖面铁氧体加载宽带甚高频天线设计。IEEE天线与无线传播通讯，11:322–325，2012年。[23] Hieu Nguyen 和 Richard Tsai。深度学习辅助的数值波传播。arXiv预印本 arXiv:2107.13184，2021年。[24] Frank No´e、Gianni De Fabritiis 和 Cecilia Clementi。用于蛋白质折叠与动力学的机器学习。《结构生物学当前观点》，60:77–84，2020年。[25] S. Osher 和 J. Sethian。以曲率相关速度传播的前沿：基于Hamilton-Jacobi方程的算法。《计算物理学杂志》，79:12–49，1988年。[26] Houman Owhadi 和 Gene Ryan Yoo。核流：从数据中学习核到深渊。《计算物理学杂志》，389:22–47，2019年。[27] Guofei Pang、Lu Lu 和 George Em Karniadakis。fpinns：分数阶物理信息神经网络。《SIAM科学计算杂志》，41(4):A2603–A2626，2019年。[28] Guofei Pang、Liu Yang 和 George Em Karniadakis。神经网络诱导的高斯过程回归：用于函数逼近和偏微分方程求解。《计算物理学杂志》，384:270–288，2019年。[29] F Lopez Pena、V D´ıaz Cas´as、A Gosset 和 RJ Duro。基于人工神经网络增强低保真计算流体动力学近似的代理方法。《计算机与流体》，58:112–119，2012年。[30] D. Peng、B. Merriman、S. Osher、H. Zhao 和 M. Kang。基于偏微分方程的快速局部水平集方法。《计算物理学杂志》，155(2):410–438，1999年。[31] Maziar Raissi、Paris Perdikaris 和 George E Karniadakis。物理信息神经网络：用于求解涉及非线性偏微分方程的正问题和逆问题的深度学习框架。《计算物理学杂志》，378:686–707，2019年。[32] John B Schneider。理解时域有限差分方法。华盛顿州立大学电气工程与计算机科学学院，28，2010年。[33]A Siahkoohi、M Louboutin 和 FJ Herrmann。神经网络增强的波动方程模拟。arXiv:1910.00925，2019年。[34] Justin Sirignano 和 Konstantinos Spiliopoulos。DGM：用于求解偏微分方程的深度学习算法。《计算物理学杂志》，375:1339–1364，2018年。[35] Rohit K Tripathy 和 Ilias Bilionis。深度不确定性量化：学习用于高维不确定性量化的深度神经网络代理模型。《计算物理学杂志》，375:565–588，2018年。

[36] Xin Wang 和 Yingjie Liu。线性双曲系统的往返误差补偿与校正方法及其在麦克斯韦方程组中的应用。《计算物理学杂志：X》，1:100014，2019年。[37] Kane Yee。各向同性介质中涉及麦克斯韦方程组的初始边值问题的数值解。《IEEE天线与传播汇刊》，14(3):302–307，1966年。[38] Xiaoyu Zhao、Zhiqiang Gong、Yunyang Zhang、Wen Yao 和 Xiaoqian Chen。无标注数据条件下用于热源布局温度场预测的物理信息卷积神经网络。《人工智能工程应用》，117:105516，2023年。[39] Yinhao Zhu、Nicholas Zabaras、Phaedon-Stelios Koutsourelakis 和 Paris Perdikaris。无标注数据条件下用于高维代理建模与不确定性量化的物理约束深度学习。《计算物理学杂志》，394:56–81，2019年。[40] Haiyu Zou 和 Yingjie Liu。采用局部二阶虚点延拓的非规则网格有限差分法，用于求解曲面理想电导体物体周围的麦克斯韦方程组。《计算物理学杂志》，463:111273，2022年。