

Exemplo – UDE (dinâmica toda)

Laura Costa Pereira Miranda – lauram@lncc.br

31 de maio de 2021

A EDO

Queremos treinar uma rede neural afim de aproximar a solução do seguinte tipo de equação diferencial ordinária:

$$\begin{cases} u'(t) = f(u(t), t), & \forall t \in (t_0, T] \\ u(t_0) = u_0 \end{cases}$$

A EDO

- Redes neurais são conhecidas como aproximadores universais.
- Se $NN(u, t) \approx u'(u, t)$, então $NN(u, t) \approx f(u(t), t)$.

A EDO

- Podemos definir a seguinte função custo para o problema de otimização envolvendo a rede neural:

$$L = \left(\sum_i^n (NN(u(t_i), t_i) - f(u(t_i), t_i))^2 + \right. \\ \left. + (g(NN(u(t_i), t_1)) - u(t_i))^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

- com $g(t)$, sendo a solução para $NN(u(t_i), t_i)$ utilizando o método de Runge-Kutta de 4ª ordem.

Exemplo

O problema é o mesmo mostrado anteriormente:

$$\begin{cases} u'(t) = f(u(t), t) = 2t, & \forall t \in (0, 1] \\ u(t_0) = 1 \end{cases}$$

cuja solução analítica é dada por:

$$u(t) = \int f(t)dt + C,$$

de forma que $u(t) = t^2 + 1$.

Parâmetros utilizados

- Taxa de aprendizado (gradiente descendente estocástico): $1 \cdot 10^{-2}$.
- Passos de aprendizado (épocas): 100 / 200.
- Neurônios de entrada: 1.
- Neurônios de saída: 1.
- Métodos de otimização: Gradiente Descendente Estocástico / ADAM.

Parâmetros utilizados

- Funções de ativação: tangente hiperbólica / sigmóide / relu.
- Número de camadas ocultas: 2 / 1.
- Neurônios por camada oculta: 32 / 64.
- Pontos de treinamento: 10 / 20.

As redes neurais

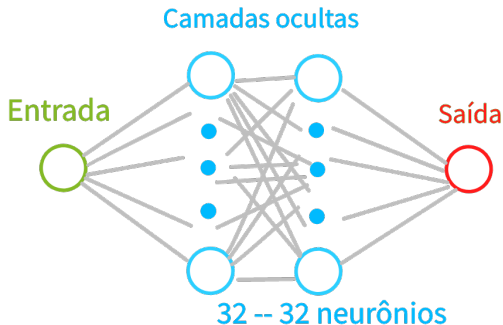


Figura: Ilustração da rede de 2 camadas e 32 neurônios utilizada nos experimentos

As redes neurais

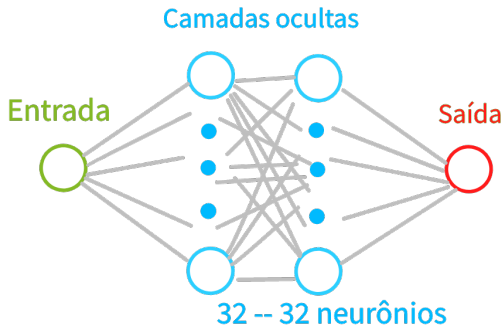


Figura: Ilustração da rede de 1 camada e 32 neurônios utilizada nos experimentos

As redes neurais

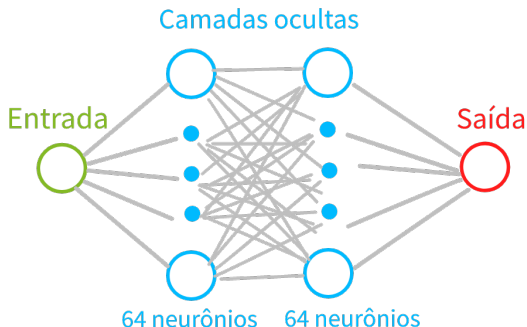


Figura: Ilustração da rede de 2 camadas e 64 neurônios utilizada nos experimentos

Funções de ativação utilizadas

$f(x) = \tanh(x)$	- Tangente Hiperbólica
$f(x) = \frac{1}{1 + e^{(-x)}}$	- Sigmóide

Modificações no código

```
dNN = self._multilayer_perceptron(x)

dNN = self._multilayer_perceptron(x) * (self._g(x + self.lnf_s) - self._g(x)) / self.lnf_s
summation.append((dNN-self.fx_vec[i])**2.0 + (self._g(x) - self.sx_vec[i])**2.0)

# Fixed Seed?
if self.seed is not None:
    tf.random.set_seed(self.seed)

self.sx_vec = self._true_solution(self.x_vec)

result.append(self._g(val).numpy()[0][0][0][0][0][0][0][0][0][0][0][0])
```

Figura: Modificações com respeito à rede, função custo, semente e dados de treinamento e resultado, respectivamente

Modificações no código

```
def _g(self, x):
    u0 = self._f0()
    if(x==0.0):
        u0 = tf.constant([[[[[[[[[[[[u0]]]]]]]]]]], dtype='float32')
        return u0
    else:
        dx = 1e-2
        k = 0.0
        while(k<x):
            #print("while",x,k,u0)
            k1 = self._multilayer_perceptron(u0)
            k2 = self._multilayer_perceptron(u0+dx*k1*0.5)
            k3 = self._multilayer_perceptron(u0+dx*k2*0.5)
            k4 = self._multilayer_perceptron(u0+dx*k3)
            u1 = u0+(dx/6.0)*(k1+2.0*k2+2.0*k3+k4)
            u0 = float(u1)
            k = k+dx
            #print("while2",k,u0)
        return u1
```

Figura: Modificações com respeito à g

Resultados

```
Loss: 4.356977
Loss: 4.348377
Loss: 4.342218
Loss: 4.337337
Loss: 4.333134
Loss: 4.329278
Loss: 4.325560
Loss: 4.321833
Loss: 4.317992
Loss: 4.313946
```

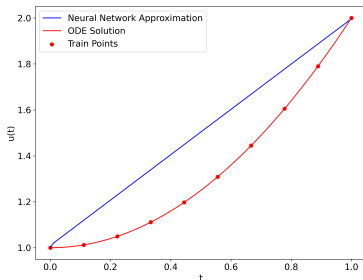


Figura:

Resultados

```
Loss: 4.384075  
Loss: 4.383959  
Loss: 4.383840  
Loss: 4.383717  
Loss: 4.383590  
Loss: 4.383461  
Loss: 4.383325  
Loss: 4.383186  
Loss: 4.383040  
Loss: 4.382892
```

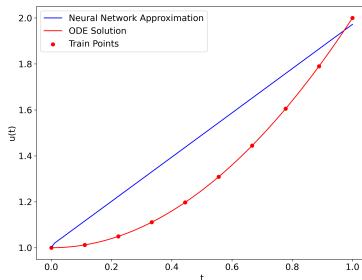


Figura:

Resultados

```
Loss: 4.387540  
Loss: 4.387503  
Loss: 4.387463  
Loss: 4.387420  
Loss: 4.387378  
Loss: 4.387333  
Loss: 4.387286  
Loss: 4.387232  
Loss: 4.387177  
Loss: 4.387118
```

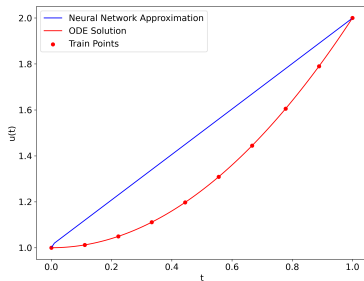


Figura:

Resultados

```
Loss: 4.053600  
Loss: 2.458205  
Loss: 2.402673  
Loss: 2.390347  
Loss: 2.388959  
Loss: 2.385156  
Loss: 2.382922  
Loss: 2.381095  
Loss: 2.379286  
Loss: 2.378026
```

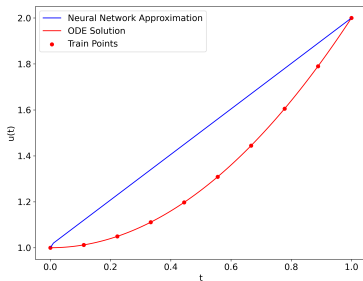


Figura:

Resultados

```
Loss: 4.385365  
Loss: 4.387084  
Loss: 4.388432  
Loss: 4.388618  
Loss: 4.388557  
Loss: 4.388268  
Loss: 4.388208  
Loss: 4.388102  
Loss: 4.387927  
Loss: 4.387635
```

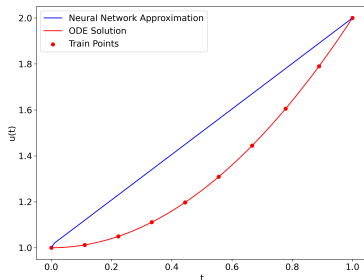


Figura:

Resultados

```
Loss: 4.791467  
Loss: 4.287236  
Loss: 4.217453  
Loss: 4.102586  
Loss: 3.896848  
Loss: 3.670439  
Loss: 3.480662  
Loss: 3.326790  
Loss: 3.202768  
Loss: 3.102197
```

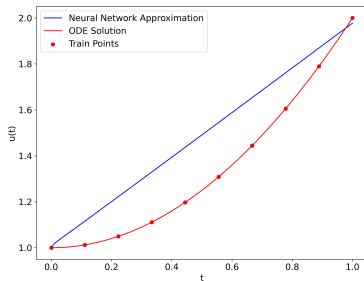


Figura:

Resultados

```
Loss: 4.385365
Loss: 4.387084
Loss: 4.388432
Loss: 4.388618
Loss: 4.388557
Loss: 4.388268
Loss: 4.388208
Loss: 4.388102
Loss: 4.387927
Loss: 4.387635
```

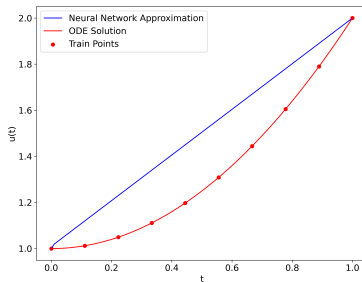


Figura:

Resultados

```
Loss: 15.783347  
Loss: 2.628838  
Loss: 2.496405  
Loss: 2.371274  
Loss: 2.368569  
Loss: 2.361486  
Loss: 2.357104  
Loss: 2.354649  
Loss: 2.354022  
Loss: 2.353876
```

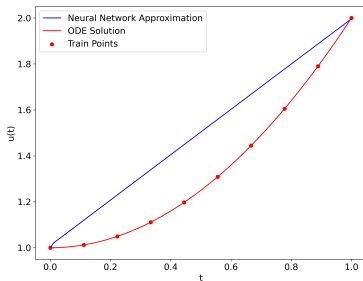


Figura:

Resultados

```
Loss: 4.124134  
Loss: 3.555867  
Loss: 3.371418  
Loss: 3.229070  
Loss: 3.118232  
Loss: 3.029756  
Loss: 2.957544  
Loss: 2.897538  
Loss: 2.846958  
Loss: 2.803833
```

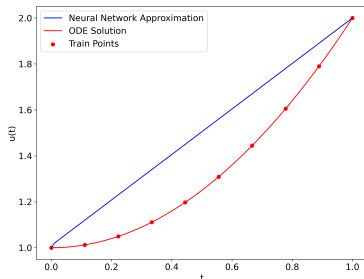


Figura:

Resultados

```
Loss: 6.998922
Loss: 5.852427
Loss: 5.349732
Loss: 5.074384
Loss: 4.905894
Loss: 4.795350
Loss: 4.718608
Loss: 4.662805
Loss: 4.620706
Loss: 4.588020
```

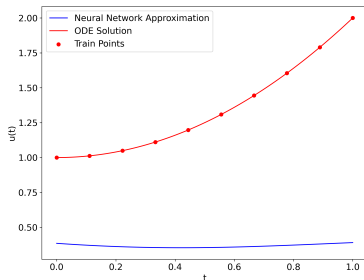


Figura:

Resultados

```
Loss: 7.164088  
Loss: 7.792144  
Loss: 4.609600  
Loss: 4.456823  
Loss: 4.425244  
Loss: 4.409607  
Loss: 4.404374  
Loss: 4.401253  
Loss: 4.398622  
Loss: 4.396182
```

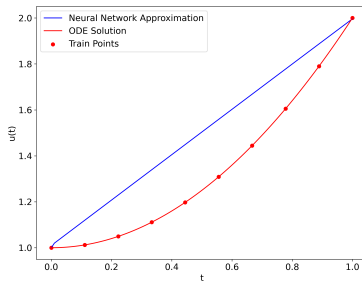




Figura:

Referências

-  Lagaris, I. E.; Likas, A.; FOTIADIS, D. I.; **Artificial Neural Networks for Solving Ordinary and Partial Differential Equations**. Berlin: Springer, 2010.
-  RESENDE, A. C. M.; **Neural Networks and Deep Learning for Dynamical Systems**.