Solução de um Problema de Equação de Burgers de Viscosidade Unidimensional Usando Rede Neural Informada por Física (PINN) e Método da Quadratura Gaussiana (GQM)

Eduardo Furlan

CAP-421 Aprendizado Profundo

2022-12-16

Por que PINN?

- Nova abordagem de ML para solução de PDE
- É possível obter modelos substitutos aproximadores
- Pode ser uma alternativa a métodos numéricos
- Pode aumentar a eficiência de modelos existentes
- Avaliar a aplicação em modelos meteorológicos (ex: módulo de radiação ecRad do MONAN)

1

Introdução

Objetivos deste trabalho

- Implementação de um caso de teste (equação de viscosidade 1D de Burgers)
- Uso de 2 abordagens, PINN (aprendizado de máquina) e GQM (método numérico)
- Comparar as eficiências das 2 abordagens

2

Abordagens e recursos

Apenas alguns recursos

- TensorFlow: biblioteca de código aberto para ML e IA
- Fortran 90: usado no método numérico GQM
- OpenMP: biblioteca de paralelização por Threads
- JupyterLab: ambiente interativo e para a web
- SDumont: supercomputador do LNCC

3

Caso de teste:

Viscosidade 1D de Burgers

Caso de teste

- **Problema da equação de viscosidade 1D de Burgers**

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} = \nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

- **Implantação 2 modelos matemáticos:**
  - **Rede Neural Informada por Física (PINN)**
  - **Método da Quadratura Gaussiana (GQM)**

Rede Neural Informada por Física (PINN)

- **PINN embute PDE como parte da ANN**
- **Pode ser considerado um tipo de RL (reforço) que usa o gradiente como uma *função política*, e a PDE tem o papel de RL baseado em modelo**
- **Também pode ser considerada supervisionada, no caso de usar dados experimentais e PDEs que funcionam como supervisão**

A PDE foi embutida na função de perda

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} = \nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

$$u_t + uu_x - (0.01/\pi)u_{xx} = 0$$

Condições iniciais (IC) e de contorno (BC):

$$u(0, x) = -sen(\pi x),$$

$$u(t, -1) = u(t, 1) = 0.$$

Exemplo simplificado de implementação

$$u_t + uu_x - (0.01/\pi)u_{xx} = 0$$

```
def net_u(self, x, t):
    u = self.neural_net(tf.concat([x, t], 1), self.weights, self.biases)
    return u

def net_f(self, x, t):
    u = self.net_u(x, t)
    u_t = tf.gradients(u, t)[0]
    u_x = tf.gradients(u, x)[0]
    u_xx = tf.gradients(u_x, x)[0]
    f = u_t + u * u_x - self.nu * u_xx
    return f
```

TensorFlow

O treinamento minimiza a perda do MSE

Erro Médio Quadrático

$$MSE = MSE_u + MSE_f,$$

$$MSE_u = \frac{1}{N_u} \sum_{i=1}^{N_u} |u(t_u^i, x_u^i) - u^i|^2,$$

Condição Inicial (IC) e de contorno (BC)

$$MSE_f = \frac{1}{N_f} \sum_{i=1}^{N_f} |f(t_f^i, x_f^i)|^2.$$

Pontos de Colocação (CP) aleatórios no domínio da PDE

Parâmetros

- Treinamento: 100 pontos IC+BC, e 10000 CP
  - Aleatórios, dentro do domínio da PDE
- Rede MLP com 10 camadas, sendo que 8 são escondidas com 20 neurônios cada
- Função de otimização: L-BFGS
- Função de ativação: tangente hiperbólica

Podem ser usadas outras arquiteturas

- Apesar de ter sido usado MLP nesta implementação, na literatura também se encontra outras, como:
  - CNN (Convolucionais)
  - RNN (Recorrente)
  - AE (Auto-encoder)
  - DBN (Deep belief)
  - GAN (Generative adversarial)
  - BDL (Bayesian)

Método numérico implementado

- Método da Quadratura Gaussiana (GQM)
- Método numérico iterativo de aproximação
- Usa uma grade de 100 pontos tempo X 256 de espaço
- O resultado do GQM é usado para comparar com o resultado da PINN

4

Resultados: análise de desempenho

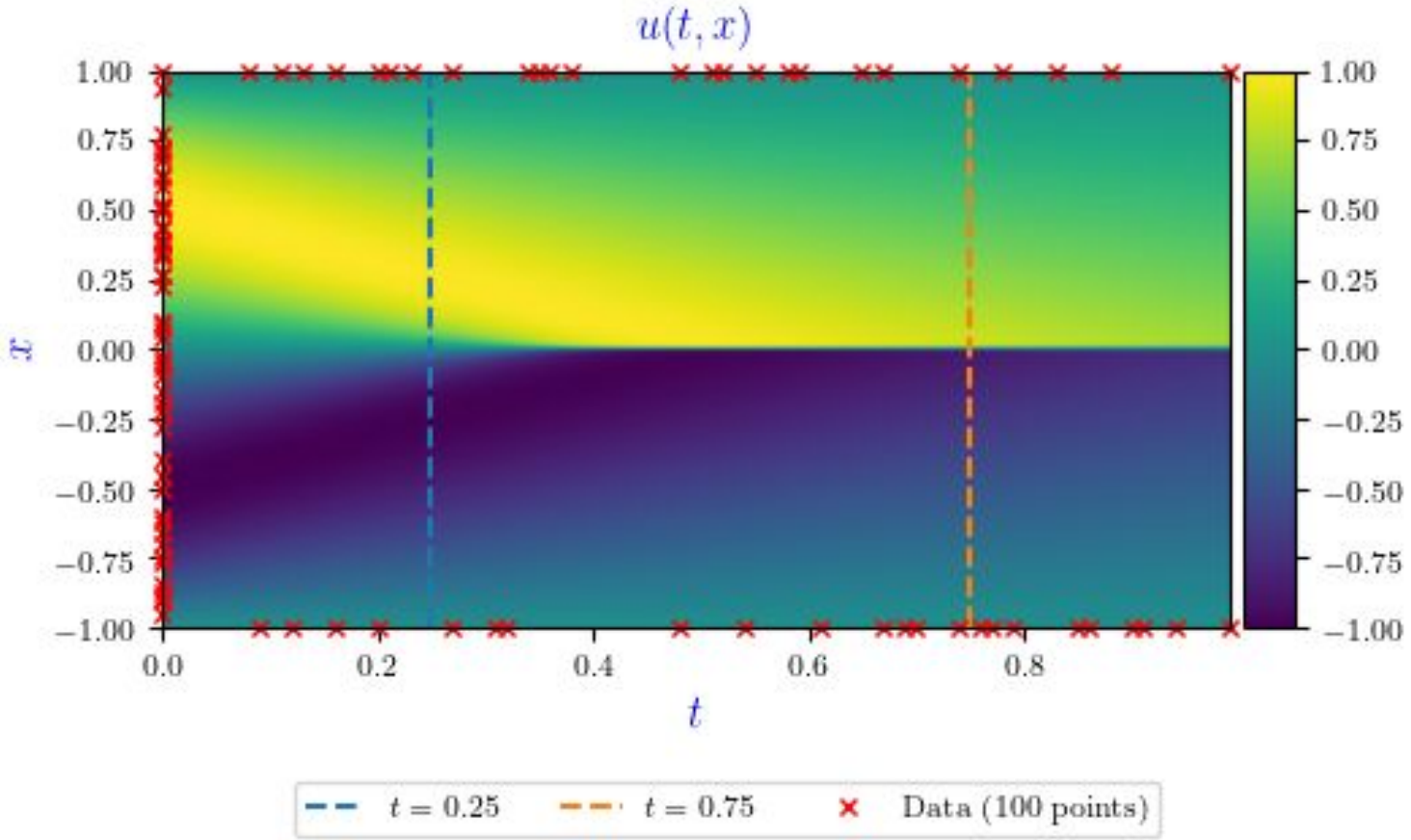
Ambiente (Santos Dumont LNCC)

- Nó B710: 2x Xeon E5-2695v2 12-core
- Nó B715: 2x Xeon E5-2695v2 12-core + 2x Tesla K40
- Nó Sequana X: 2x Xeon 6152 22-core + 4x Volta V100
- GNU Fortran 4.8.5, OpenMP 3.1, Python 3.7, TensorFlow 1.15, e outros
- Execução paralela (PINN e GQM) usando Threads

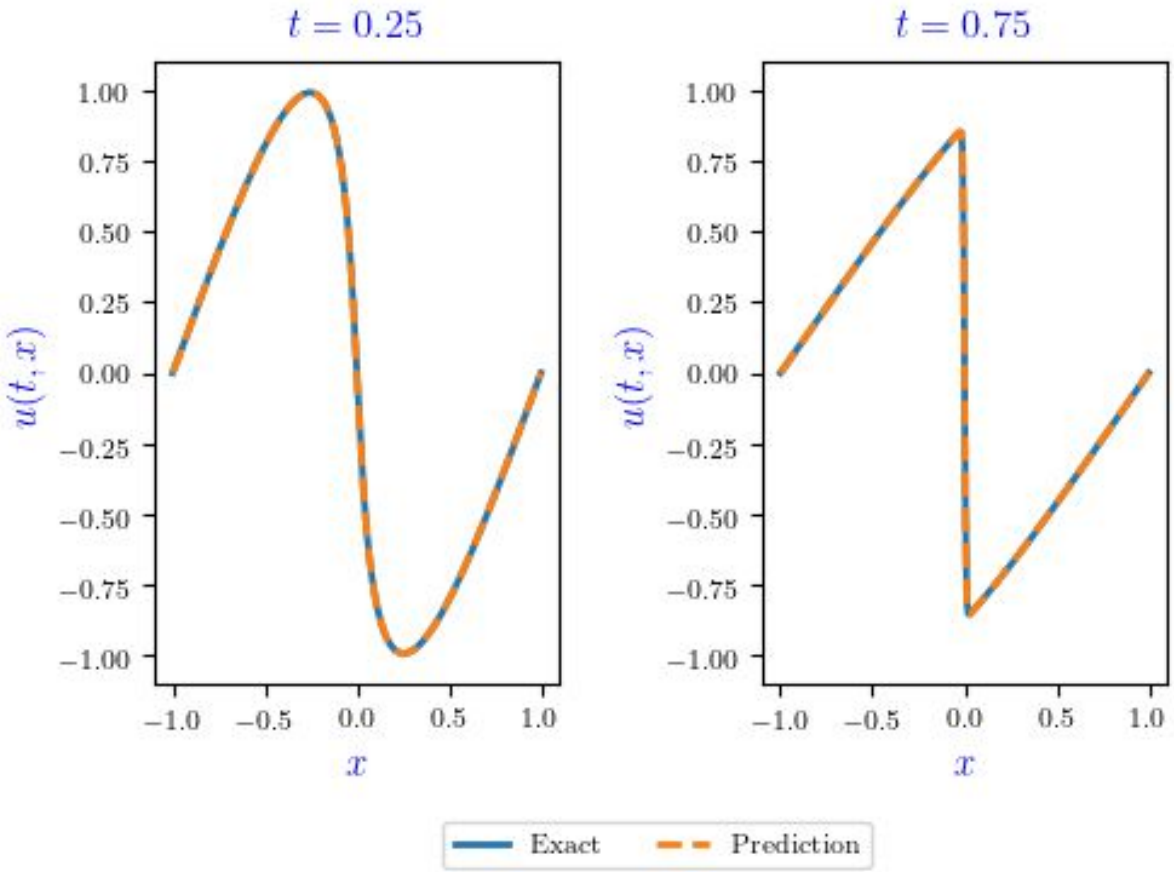
Medição

- **GQM:**
  - **Como o tempo de execução é pequeno, a medição considera 1000 execuções**
- **PINN:**
  - **Predição: também 1000 execuções**
  - **Treinamento: executado 1 única vez**

Resultado PINN



Instantâneos de tempo

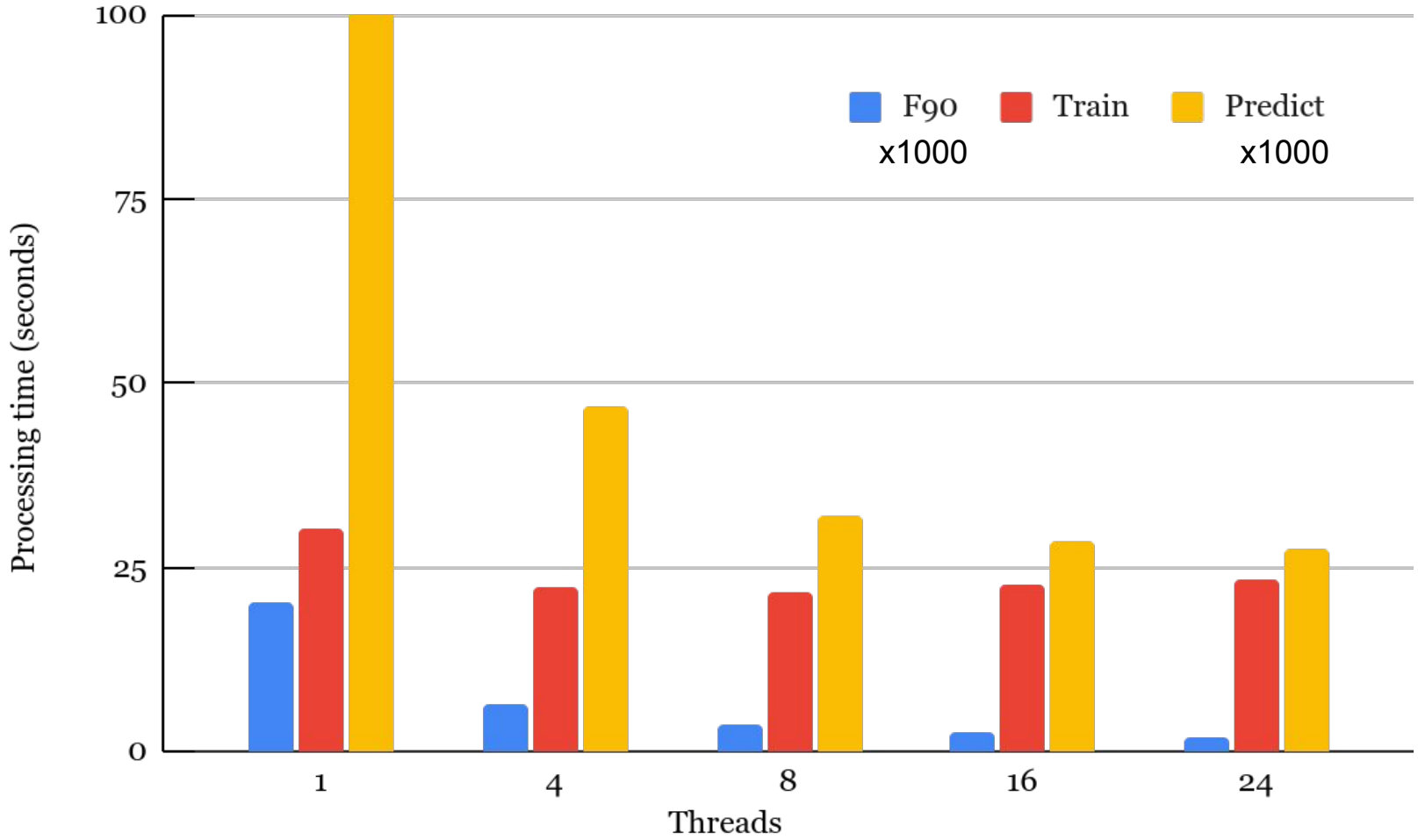


Tempos de processam.[s]/Speedup/Eficiência

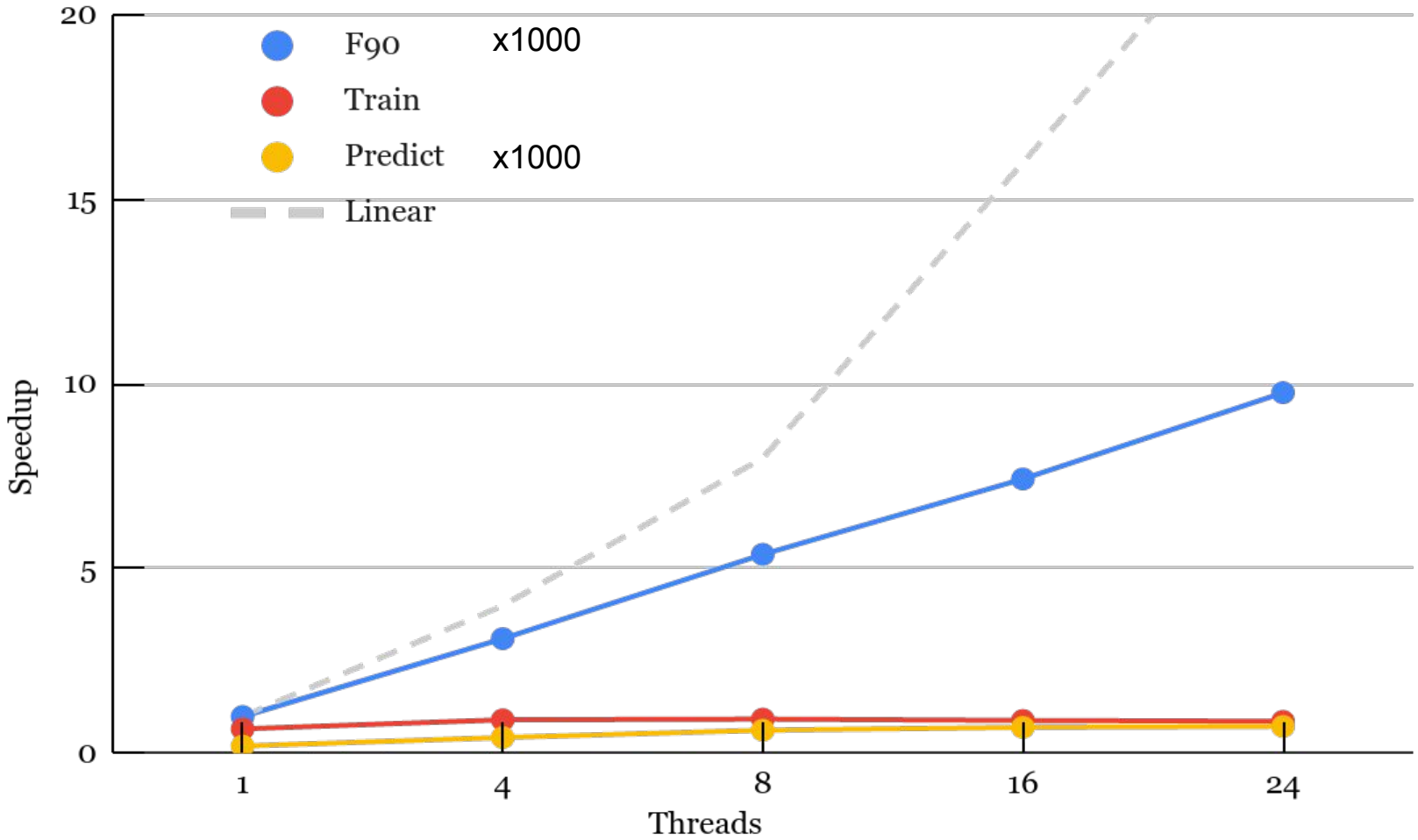
nós B710

Profiling	Number of OpenMP threads 1	4	8	16	24
Processing time (seconds)					
F90	20.16	6.49	3.74	2.71	2.06
Train	30.33	22.14	21.69	22.56	23.21
Predict	100.64	46.77	32.06	28.52	27.57
Speedup					
F90	1.00	3.11	5.39	7.43	9.77
Train	0.66	0.91	0.93	0.89	0.87
Predict	0.20	0.43	0.63	0.71	0.73
Parallel efficiency					
F90	1.00	0.78	0.67	0.46	0.41
Train	0.66	0.23	0.12	0.06	0.04
Predict	0.20	0.11	0.08	0.04	0.03

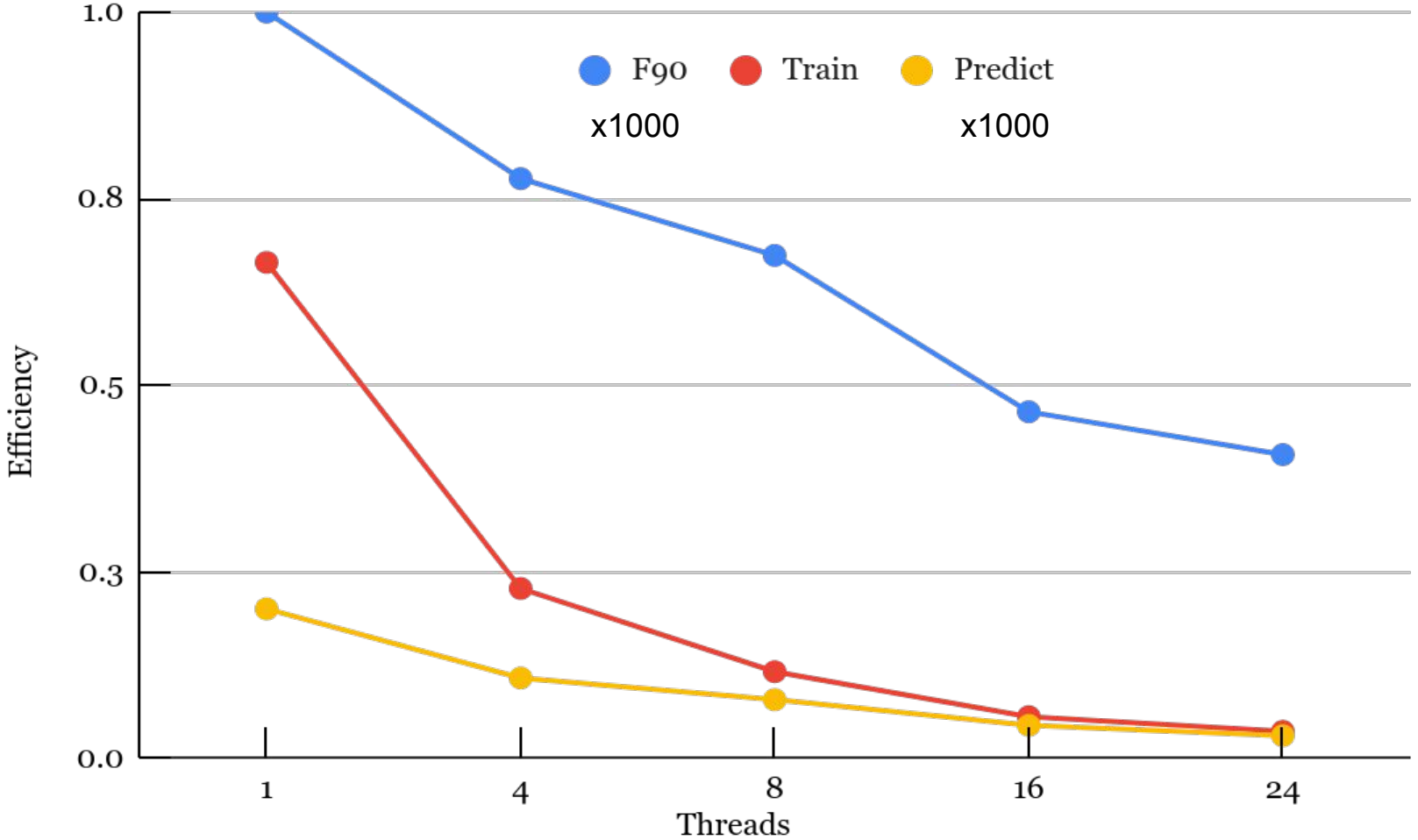
Tempos de processamento[s]



Speedup


20
15
10
5
0
Speedup
F90
x1000
Train
Predict
x1000
Linear
1
4
8
16
24
Threads

Eficiência paralela



5

Considerações Finais

Considerações finais

- No trabalho foram usadas 2 abordagens, PINN e GQM
- O caso de teste foi executado no SDumont
- TensorFlow/Python e F90 com OpenMP
- A abordagem numérica teve melhor desempenho
- Trabalhos futuros
  - Avaliar o uso de outras arquiteturas ANN
  - Variar hiperparâmetros
  - Usar GPU

Obrigado!

Código fonte: https://github.com/efurlanm/421/project