Deep Galerkin Method

Resolvendo EDPs Numericamente com Redes Neurais

Caio Lins

FGV - EMAp

Novembro 2021



Sumário

- 1 Equações Diferenciais Parciais
- 2 Redes Neurais e EDPs

3 Deep Galerkin Method – DGM

Sumário

- 1 Equações Diferenciais Parciais
- 2 Redes Neurais e EDPs

3 Deep Galerkin Method – DGM

Formulação do problema

EDP com condições iniciais e de fronteira

Dados

- lacksquare $\Omega\subseteq\mathbb{R}^d$ e T>0 domínio
- $u_0:\Omega\to\mathbb{R}$ condição inicial
- $g:[0,T]\times\partial\Omega\to\mathbb{R}$ condição de fronteira,

Formulação do problema

EDP com condições iniciais e de fronteira

Dados

- lacksquare $\Omega\subseteq\mathbb{R}^d$ e T>0 domínio
- $u_0:\Omega \to \mathbb{R}$ condição inicial
- $g:[0,T] imes\partial\Omega o\mathbb{R}$ condição de fronteira,

queremos encontrar $u:[0,T]\times\Omega\to\mathbb{R}$ tal que

$$\begin{cases} \partial_t u(t, \boldsymbol{x}) + \mathcal{L}u(t, \boldsymbol{x}) = 0, & (t, \boldsymbol{x}) \in [0, T] \times \Omega \\ u(0, \boldsymbol{x}) = u_0(\boldsymbol{x}), & \boldsymbol{x} \in \Omega \\ u(t, \boldsymbol{x}) = g(t, \boldsymbol{x}), & (t, \boldsymbol{x}) \in [0, T] \times \partial \Omega \end{cases}$$

Formulação do problema

Aqui \mathcal{L} é um operador diferencial como, por exemplo, o laplaciano ∇^2 :

$$\nabla^2 u = \frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} + \dots + \frac{\partial^2 u}{\partial x_d^2}.$$

▶ A solução numérica de EDPs é um desafio substancial.

- ▶ A solução numérica de EDPs é um desafio substancial.
- Métodos numéricos non-network:

- ▶ A solução numérica de EDPs é um desafio substancial.
- Métodos numéricos non-network:
 - \diamond Métodos de diferenças finitas Aproxima os valores da solução u(t, x) em um grid utilizando uma equação de recorrência.

- ▶ A solução numérica de EDPs é um desafio substancial.
- Métodos numéricos non-network:
 - Métodos de diferenças finitas

Aproxima os valores da solução $u(t, \boldsymbol{x})$ em um grid utilizando uma equação de recorrência.

Por exemplo, para a equação do calor $\partial_t u = \partial_{xx} u$:

$$u(t+\Delta t, x) \approx u(t, x) + \mu[u(t, x+\Delta x) - 2u(t, x) + u(t, x-\Delta x)].$$

- A solução numérica de EDPs é um desafio substancial.
- Métodos numéricos non-network:
 - Métodos de diferenças finitas

Aproxima os valores da solução $u(t, \boldsymbol{x})$ em um grid utilizando uma equação de recorrência.

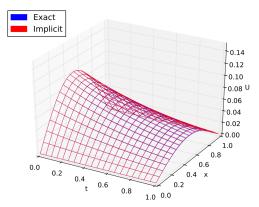
Por exemplo, para a equação do calor $\partial_t u = \partial_{xx} u$:

$$u(t+\Delta t, x) \approx u(t, x) + \mu [u(t, x+\Delta x) - 2u(t, x) + u(t, x-\Delta x)].$$

Métodos de elementos finitos

Utiliza um espaço de funções de dimensão finita para aproximar a solução. Por exemplo, funções lineares ou polinomiais por partes.

Também faz uso de um grid.



Exemplo de grid aplicado no método de diferenças finitas.

▶ Principal problema: a necessidade do grid.

- Principal problema: a necessidade do grid.
- Número de pontos no grid cresce exponencialmente com o número de dimensões espaciais.

- Principal problema: a necessidade do grid.
- Número de pontos no grid cresce exponencialmente com o número de dimensões espaciais.
- Métodos envolvendo Deep Learning passaram a contornar esse problema.

Sumário

- 1 Equações Diferenciais Parciais
- 2 Redes Neurais e EDPs

3 Deep Galerkin Method – DGM

Vamos tentar aproximar a solução da EDP em $[0,T] \times \Omega$ com uma rede neural $f(t, {\bf x}, \theta)$

- ▶ Vamos tentar aproximar a solução da EDP em $[0,T] \times \Omega$ com uma rede neural $f(t, x, \theta)$
 - Essa ideia faz sentido, pois redes neurais são aproximadores universais de funções contínuas [Hor91].

- Vamos tentar aproximar a solução da EDP em $[0,T] \times \Omega$ com uma rede neural $f(t, x, \theta)$
 - Essa ideia faz sentido, pois redes neurais são aproximadores universais de funções contínuas [Hor91].
- ► Função de perda teórica, com três partes:

$$J(f) = \int_{[0,T]\times\Omega} \|\partial_t f(t, \boldsymbol{x}, \theta) + \mathcal{L}f(t, \boldsymbol{x}, \theta)\|^2 d\nu_1$$
$$+ \int_{[0,T]\times\partial\Omega} \|f(t, \boldsymbol{x}, \theta) - g(t, \boldsymbol{x})\|^2 d\nu_2$$
$$+ \int_{\Omega} \|f(0, \boldsymbol{x}, \theta) - u_0(\boldsymbol{x})\|^2 d\nu_3,$$

onde ν_1, ν_2, ν_3 são medidas finitas.



Na prática, para calcular a perda em um conjunto de pontos

$$\begin{cases} (t_i, \boldsymbol{x}_i) \subset [0, T] \times \Omega, \\ (\tau_i, \boldsymbol{y}_i) \subset [0, T] \times \partial \Omega, \\ \boldsymbol{w}_i \subset \Omega, \end{cases}$$

 $i = 1, \ldots, n$, utilizamos o MSE:

$$G(f) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |\partial_t f(t_i, \boldsymbol{x}_i, \theta) + \mathcal{L}f(t_i, \boldsymbol{x}_i, \theta)|^2$$
$$+ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |f(\tau_i, \boldsymbol{y}_i, \theta) - g(\tau_i, \boldsymbol{y}_i)|^2$$
$$+ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |f(0, \boldsymbol{w}_i, \theta) - u_0(\boldsymbol{w}_i)|^2.$$

NEURAL-NETWORK-BASED APPROXIMATIONS FOR SOLVING PARTIAL DIFFERENTIAL EQUATIONS

M. W. M. G. DISSANAYAKE AND N. PHAN-THIEN

Department of Mechanical Engineering, The University of Sydney, Sydney, N.S.W. 2006, Australia

SUMMARY

A numerical method, based on neural-network-based functions, for solving partial differential equations is reported in the paper. Using a 'universal approximator' based on a neural network and poin collocation, the numerical problem of solving the partial differential equation is transformed to an unconstrained minimization problem. The method is extremely easy to implement and is suitable for obtaining an approximate solution in a short period of time. The technique is illustrated with the aid of two numerical examples.

[DP94] utiliza essa ideia para solucionar equações bidimensionais definidas em $\Omega=[0,1]^2.$

Características principais:

▶ Uso de NNs do tipo feedforward como aproximadores.

Características principais:

- ▶ Uso de NNs do tipo feedforward como aproximadores.
- Otimização feita utilizando um método quasi-Newton.

Características principais:

- ▶ Uso de NNs do tipo feedforward como aproximadores.
- Otimização feita utilizando um método quasi-Newton.
- Gradientes aproximados utilizando diferenças finitas.

Características principais:

- ▶ Uso de NNs do tipo feedforward como aproximadores.
- Otimização feita utilizando um método quasi-Newton.
- Gradientes aproximados utilizando diferenças finitas.
- Pontos de treino são tomados de um grid no domínio.

IEEE TRANSACTIONS ON NEURAL NETWORKS, VOL. 9, NO. 5, SEPTEMBER 1998

087

Artificial Neural Networks for Solving Ordinary and Partial Differential Equations

Isaac Elias Lagaris, Aristidis Likas, Member, IEEE, and Dimitrios I. Fotiadis

Abstract-We present a method to solve initial and boundary value problems using artificial neural networks. A trial solution of the differential equation is written as a sum of two parts. The first part satisfies the initial/boundary conditions and contains no adjustable parameters. The second part is constructed so as not to affect the initial/boundary conditions. This part involves a feedforward neural network containing adjustable parameters (the weights). Hence by construction the initial/boundary conditions are satisfied and the network is trained to satisfy the differential equation. The applicability of this approach ranges from single ordinary differential equations (ODE's), to systems of coupled ODE's and also to partial differential equations (PDE's). In this article, we illustrate the method by solving a variety of model problems and present comparisons with solutions obtained using the Galekrkin finite element method for several cases of partial differential equations. With the advent of neuroprocessors and digital signal processors the method becomes particularly interesting due to the expected essential gains in the execution speed.

of a feedforward neural network by replacing each spline with the sum of piecewise linear activation functions that correspond to the hidden units. This method considers local basis-functions and in general requires many splines (and consequently network parameters) in order to yield accurate solutions. Furthermore, it is not easy to extend these techniques to multidimensional domains.

In this article we view the problem from a different angle. We present a method for solving both ordinary differential equations (ODE's) and partial differential equations (PDE's) (defined on orthogonal box domains) that relies on the function approximation capabilities of feedforward neural networks and results in the construction of a solution written in a differentiable, locade analytic form. This form employs a feedforward neural network as the basic approximation element, whose parameters (weights and biases) are adultsed to

[LLF98] emprega esse método para solucionar EDOs, bem como EDPs definidas em cubos unitários.

◆ロト ◆御 ト ◆ 恵 ト ◆ 恵 ・ 夕 ○ ○

Principais diferenças:

Solução não é exclusivamente uma rede neural. Se Ψ_{θ} é a solução aproximada parametrizada por θ , temos

$$\Psi_{\theta}(\vec{x}) = A(\vec{x}) + F(\vec{x}, f(\vec{x}, \theta)),$$

onde $f(\vec{x}, \theta)$ é a rede neural.

Principais diferenças:

Solução não é exclusivamente uma rede neural. Se Ψ_{θ} é a solução aproximada parametrizada por θ , temos

$$\Psi_{\theta}(\vec{x}) = A(\vec{x}) + F(\vec{x}, f(\vec{x}, \theta)),$$

onde $f(\vec{x}, \theta)$ é a rede neural.

A ideia é que $A(\vec{x})$ não tenha parâmetros e satisfaça condições de fronteira. O termo $F(\vec{x}, f(\vec{x}, \theta))$ é encarregado fazer Ψ_{θ} obeder a EDP/EDO.

Principais diferenças:

▶ Por exemplo, considerando a EDO:

$$u'(x) = g(x, u),$$

com condição inicial $\Psi(0)=A$, a solução é escrita como

$$\Psi_{\theta}(x) = A + x f(x, \theta).$$

Principais diferenças:

▶ Por exemplo, considerando a EDO:

$$u'(x) = g(x, u),$$

com condição inicial $\Psi(0)=A$, a solução é escrita como

$$\Psi_{\theta}(x) = A + x f(x, \theta).$$

▶ Além disso, passa a utilizar diferenciação automática.

Entretanto:

▶ Rede utilizada ainda é uma MLP.

Entretanto:

- Rede utilizada ainda é uma MLP.
- Otimização continua quasi-Newton.

Entretanto:

- ▶ Rede utilizada ainda é uma MLP.
- Otimização continua quasi-Newton.
- ▶ *Grid* de treinamento se mantém.

Desenvolvimentos Mais Recentes

Physics Informed Deep Learning (Part I): Data-driven Solutions of Nonlinear Partial Differential Equations

Maziar Raissi¹, Paris Perdikaris², and George Em Karniadakis¹

¹Division of Applied Mathematics, Brown University,
Providence, RI, 02912, USA

²Department of Mechanical Engineering and Applied Mechanics,
University of Pennsylvania,
Philadelphia, PA, 19104, USA

[RPK17] cunham o termo *Physics Informed Neural Network* – *PINN*

Nov 2017

Desenvolvimentos Mais Recentes

▶ Uma PINN não necessariamente está relacionada a uma EDP.

Desenvolvimentos Mais Recentes

- ▶ Uma PINN não necessariamente está relacionada a uma EDP.
- A ideia é incorporar informações vindas da física no processo de treinamento e, assim, fazer um uso mais eficiente dos dados disponíveis.
 - Em sistemas físicos reais, o custo da aquisição de dados muitas vezes é demasiadamente elevado.

- ▶ Uma PINN não necessariamente está relacionada a uma EDP.
- A ideia é incorporar informações vindas da física no processo de treinamento e, assim, fazer um uso mais eficiente dos dados disponíveis.
 - Em sistemas físicos reais, o custo da aquisição de dados muitas vezes é demasiadamente elevado.
- ▶ Entretanto, nos exemplos desse artigo especificamente, a ideia é incorporar a EDP na função de perda, como já descrevemos.

- Poucos pontos são tomados nas condições iniciais.
 - ⋄ 100 pontos, por exemplo.

- Poucos pontos são tomados nas condições iniciais.
 - ⋄ 100 pontos, por exemplo.
- A maior parte do conjunto de treino é tomada no interior de $[0,T] \times \Omega$.
 - ♦ E.g. 10000 pontos distribuídos aleatoriamente.

- Poucos pontos são tomados nas condições iniciais.
 - ⋄ 100 pontos, por exemplo.
- A maior parte do conjunto de treino é tomada no interior de $[0,T] \times \Omega$.
 - ⋄ E.g. 10000 pontos distribuídos aleatoriamente.
- Ou seja, não há mais um grid. Os pontos no interior do domínio são amostrados uma única vez antes de começar o treinamento.

 Rede utilizada ainda é uma MLP, porém agora com mais camadas.

- Rede utilizada ainda é uma MLP, porém agora com mais camadas.
- ▶ Fizeram uso da diferenciação automática do Tensorflow.

- Rede utilizada ainda é uma MLP, porém agora com mais camadas.
- Fizeram uso da diferenciação automática do Tensorflow.
- ▶ O algoritmo de otimização ainda é quasi-Newton.

Sumário

- 1 Equações Diferenciais Parciais
- 2 Redes Neurais e EDPs

3 Deep Galerkin Method – DGM

Principais Características

DGM: A deep learning algorithm for solving partial differential equations

Justin Sirignano* and Konstantinos Spiliopoulos^{†‡§}

September 7, 2018

Abstract

High-dimensional PDEs have been a longstanding computational challenge. We propose to solve high-dimensional PDEs by approximating the solution with a deep neural network which is trained to satisfy the differential operator, initial condition, and boundary conditions. Our algorithm is meshfree, which is key since meshes become infeasible in higher dimensions. Instead of forming a mesh, the neural network is trained on batches of randomly sampled time and space points. The algorithm is tested on a class of high-dimensional fere boundary PDEs, which we are able to accurately solve in up to 200 dimensions. The algorithm is also tested on a high-dimensional Hamilton-Jacobi-Bellman PDE and Burgers' equation. The deep learning algorithm approximates the general solution to the Burgers' equation for a continuous of different boundary conditions and physical conditions (which can be viewed as a high-dimensional space). We call the algorithm a "Deep Galerkin Method (DGM)" since it is similar in spirit to Galerkin despendent of the algorithm as "Deep Galerkin Method (DGM)" since it is similar in spirit to Galerkin of the algorithm as "Deep Galerkin Method (DGM)" since it is similar in spirit to Galerkin class of nussilinear parabolic PDEs.

[SS18] Criaram um algoritmo que reúne as ideias até então apresentadas e faz algumas adições. Também provaram resultados teóricos sobre solucionar EDPs com redes neurais.

Principais Características

 Arquitetura da rede:
 A arquitetura utiliza um mecanismo de gating inspirado em redes do tipo LSTM/Highway [HS97] [SGS15].

Principais Características

- Arquitetura da rede:
 A arquitetura utiliza um mecanismo de gating inspirado em redes do tipo LSTM/Highway [HS97] [SGS15].
- Conjunto de treino:
 Para realizar cada update nos parâmetros são amostrados novos pontos no domínio da EDP (1000, por exemplo).
 O treino passa a ser contado em termos de sampling stages e não de épocas.

O Algoritmo

No *n*-ésimo sampling stage:

▶ Gerar um conjunto de pontos s_n pertencentes às três regiões de interesse: $[0,T] \times \Omega, [0,T] \times \partial \Omega$ e Ω .

O Algoritmo

No *n*-ésimo sampling stage:

- ▶ Gerar um conjunto de pontos s_n pertencentes às três regiões de interesse: $[0,T] \times \Omega, [0,T] \times \partial \Omega$ e Ω .
- ▶ Calcular o MSE: $G(\theta_n, s_n)$

O Algoritmo

No *n*-ésimo sampling stage:

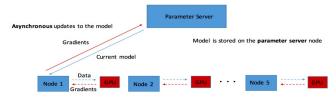
- ▶ Gerar um conjunto de pontos s_n pertencentes às três regiões de interesse: $[0,T] \times \Omega, [0,T] \times \partial \Omega$ e Ω .
- ▶ Calcular o MSE: $G(\theta_n, s_n)$
- Atualizar os parâmetros com o gradiente da perda:

$$\theta_{n+1} = \theta_n - \alpha_n \nabla_{\theta} G(\theta_n, s_n)$$

(na realidade, utilizamos o algoritmo ADAM).

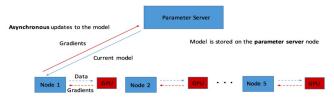
Outras Adições

Treino altamente paralelizado: Realizado em 6 GPUs usando asynchronous stochastic gradient descent [Dea+12].



Outras Adições

Treino altamente paralelizado: Realizado em 6 GPUs usando asynchronous stochastic gradient descent [Dea+12].



▶ Algoritmo Monte-Carlo para cálculo de segundas derivadas. Se torna mais rápido que diferenciação automática em muitas dimensões.

▶ Camada inicial densa, seguida por L camadas do tipo Highway/LSTM-like, terminando com uma transformação afim (aqui, $\vec{x} = (t, x)$):

$$\begin{split} S^1 &= \sigma(W^1\vec{\boldsymbol{x}} + b^1) \\ Z^\ell &= \sigma\left(U^{z,\ell}\vec{\boldsymbol{x}} + W^{z,\ell}S^\ell + b^{z,\ell}\right), \ell = 1, \dots, L, \\ G^\ell &= \sigma\left(U^{g,\ell}\vec{\boldsymbol{x}} + W^{g,\ell}S^\ell + b^{g,\ell}\right), \ell = 1, \dots, L, \\ R^\ell &= \sigma\left(U^{r,\ell}\vec{\boldsymbol{x}} + W^{r,\ell}S^\ell + b^{r,\ell}\right), \ell = 1, \dots, L, \\ H^\ell &= \sigma\left(U^{h,\ell}\vec{\boldsymbol{x}} + W^{h,\ell}\left(S^\ell \odot R^\ell\right) + b^{h,\ell}\right), \ell = 1, \dots, L, \\ S^{\ell+1} &= \left(\mathbf{1} - G^\ell\right) \odot H^\ell + Z^\ell \odot S^\ell \\ f(t, \boldsymbol{x}, \theta) &= WS^{L+1} + b \end{split}$$

ightharpoonup Temos L+1 camadas ocultas, cada uma com M nós.

- ▶ Temos L+1 camadas ocultas, cada uma com M nós.
- A função $\sigma:\mathbb{R}^M \to \mathbb{R}^M$ é uma não-linearidade elemento a elemento:

$$\sigma(\boldsymbol{z}) = (\varphi(z_1), \varphi(z_2), \dots, \varphi(z_M)),$$

onde $\varphi:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ é uma função de ativação não linear.

- ▶ Temos L+1 camadas ocultas, cada uma com M nós.
- A função $\sigma:\mathbb{R}^M \to \mathbb{R}^M$ é uma não-linearidade elemento a elemento:

$$\sigma(\mathbf{z}) = (\varphi(z_1), \varphi(z_2), \dots, \varphi(z_M)),$$

onde $\varphi:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ é uma função de ativação não linear.

Parâmetros:

$$\theta = \left\{ W^{1}, b^{1}, \left(U^{z,\ell}, W^{z,\ell}, b^{z,\ell} \right)_{\ell=1}^{L}, \left(U^{g,\ell}, W^{g,\ell}, b^{g,\ell} \right)_{\ell=1}^{L}, \left(U^{r,\ell}, W^{r,\ell}, b^{r,\ell} \right)_{\ell=1}^{L}, \left(U^{h,\ell}, W^{h,\ell}, b^{h,\ell} \right)_{\ell=1}^{L}, W, b \right\}.$$

Sugestões dos autores:

- ▶ L = 3.
- M = 50.
- $\varphi = \tanh.$

▶ Autores reportaram alta precisão na solução de equações com até 200 dimensões — ausência de *grid*.

- ► Autores reportaram alta precisão na solução de equações com até 200 dimensões – ausência de grid.
- Provaram um Teorema demonstrando a possibilidade de aproximar as soluções de uma classe de EDPs parabólicas quasilineares usando redes neurais.

Lembremos da função de perda teórica para uma rede $f(t, \boldsymbol{x}, \theta)$:

$$J(f) = \int_{[0,T]\times\Omega} \|\partial_t f(t, \boldsymbol{x}, \theta) + \mathcal{L}f(t, \boldsymbol{x}, \theta)\|^2 d\nu_1$$
$$+ \int_{[0,T]\times\partial\Omega} \|f(t, \boldsymbol{x}, \theta) - g(t, \boldsymbol{x})\|^2 d\nu_2$$
$$+ \int_{\Omega} \|f(0, \boldsymbol{x}, \theta) - u_0(\boldsymbol{x})\|^2 d\nu_3.$$

<u>Te</u>orema

Seja \mathfrak{C}^n a classe de redes neurais com uma camada oculta e n nós. Seja $f^n \in \mathfrak{C}^n$ tal que $J(f^n)$ é mínimo em \mathfrak{C}^n . Sob certas condições, existe $f^n \in \mathfrak{C}^n$ tal que

$$J(f^n) \to 0$$
 quando $n \to \infty$

e

$$f^n \to u$$
 quando $n \to \infty$.

em $L^{\rho}([0,T]\times\Omega)$, com $\rho<2$.

Principais questões pendentes:

▶ Dificuldade de implementação.

Principais questões pendentes:

- ▶ Dificuldade de implementação.
- ► Falta de garantias teóricas.

Referências I

- [Hor91] K. Hornik. «Approximation Capabilities of Multilayer Feedforward Networks». Em: *Neural Networks* 4 (1991), pp. 251–257.
- [DP94] M. W. M. G. Dissanayake e N. Phan-Thien. «Neural-Network-Based Approximations for Solving Partial Differential Equations». Em: Communications in Numerical Methods in Engineering 10 (1994), pp. 195–201.
- [HS97] S. Hochreiter e J. Schmidhuber. «Long Short-Term Memory». Em: Neural Computation 9 (1997), pp. 1735–1780.

Referências II

- [LLF98] I. E. Lagaris, A. Likas e D. I. Fotiadis. «Artificial Neural Networks for Solving Ordinary and Partial Differential Equations». Em: *IEEE Transactions on Neural Networks* 9 (1998), pp. 987–1000.
- [Dea+12] J. Dean et al. «Large Scale Distributed Deep Networks». Em: Advances in Neural Information Processing Systems (2012), pp. 1223–1231.
- [SGS15] R. K. Srivastava, K. Greff e J. Schmidhuber. «Highway Networks». Em: arXiv preprint arXiv:1505.00387v2 (2015).

Referências III

- [RPK17] Maziar Raissi, Paris Perdikaris e George Em Karniadakis. «Physics Informed Deep Learning (Part I): Data-driven Solutions of Nonlinear Partial Differential Equations». Em: arXiv preprint arXiv:1711.10561 (2017).
- [SS18] J. Sirignano e K. Spiliopoulos. «DGM: A Deep Learning Algorithm for Solving Partial Differential Equations». Em: arXiv preprint arXiv:1708.07469v5 (2018).