Redes Neurais Fisicamente Guiadas (PINNs) na Aproximação de Soluções para a Equação de Benjamin-Bona-Mahony

Samuel Kutz Paranhos *
samuelkutzparanhos1@gmail.com [1]
Roberto Ribeiro (Orientador)
robertoribeiro@ufpr.br [2]
[1]Universidade Federal do Paraná

Palavras-chave: Equações Diferenciais, Deep Learning, Physics-Informed Neural Networks, Equação de BBM

Resumo:

As equações diferenciais parciais (EDPs) desempenham um papel fundamental na modelagem de diversos fenômenos físicos, como a propagação de ondas, a condução de calor e em áreas de estudo como mecânica quântica e dinâmica de fluídos [1]. Tradicionalmente, a solução dessas equações é obtida por métodos numéricos, como diferenças finitas e elementos finitos, que oferecem soluções discretas e podem ser computacionalmente custosos conforme as dimensões do problema aumentam. Neste trabalho, apresentamos uma abordagem moderna para a aproximação de soluções: as redes neurais fisicamente guiadas (Physics-Informed Neural Networks, PINNs). As PINNs permitem encontrar uma solução aproximada contínua para o problema ao treinar uma rede neural para minimizar o resíduo da EDP juntamente com a sua função perda, tirando proveito de todo ferramental disponível para *Deep Learning*, como Diferenciação Automática (AD) [2].

Especificamente, o objetivo deste trabalho é investigar a técnica de PINNs, apresentada em [2], na aproximação da solução da equação de Benjamin-Bona-Mahony (BBM) na forma:

$$\begin{aligned} u_t + u_x + u\,u_x - u_{xxt} &= 0, && (x,t) \in (-10,20) \times (0,4) \\ u(x,0) &= u_0(x), && x \in (-10,20), \\ u(-10,t) &= g_1(t), && \\ u(20,t) &= g_2(t) && t \in (0,4), \end{aligned} \tag{1}$$

onde $u_0(x)$ é a **condição inicial** e g_1, g_2 são **condições de contorno** que nos dizem como u se comporta nas bordas do domínio de x.

*Voluntário do Programa de Iniciação Científica no programa PIBIC/2024

A equação de BBM foi deduzida por Benjamin, Bona e Mahony como uma alternativa mais estável numericamente do que o modelo de KdV, o qual é aplicado na modelagem da dinâmica de ondas aquáticas assim como em diversas outras situações práticas [3].

A equação (1) possui solução viajante

$$u(x,t) = A\,\mathrm{sech}^2(k(x-ct)), \tag{2}$$

onde dado A, $k = \sqrt{\dfrac{A}{12+4A}}$ e $c = 1 + \dfrac{A}{3}$.

Fisicamente, uma solução viajante de uma EDP pode ser entendida como uma onda que se propaga com velocidade constante sem mudar de forma. Neste contexto, a solução (2) pode ser entendida como uma onda de amplitude A que se propaga com velocidade c.

Uma vez que conhecemos uma solução exata para a equação (1), vamos utilizá-la como referência para investigar a acurácia do procedimeno numérico proposto (PINNs). Isto posto, considere as funções g_1 e g_2 como a própria solução exata, aplicada nos extremos de x, respectivamente. Assim, a EDP que queremos resolver via PINNs se resume em:

$$\begin{aligned}
u_t + u_x + u\,u_x - u_{xxt} &= 0, && (x,t) \in (-10,20)\times(0,4)\\
u(x,0) &= A\,\mathrm{sech}^2(kx), && x \in (-10,20),\\
u(-10,t) &= A\,\mathrm{sech}^2(k(-10-ct)) && \\
u(20,t) &= A\,\mathrm{sech}^2(k(20-ct)) && t \in (0,4).
\end{aligned} \tag{3}$$

A técnica de PINNs consiste em treinar a rede com uma função perda que incorpora os seguintes problemas de otimização dos resíduos da EDP:

1. $$\min |\mathcal{D}(x,t)| \quad \text{s.a.} \quad (x,t) \in (-10,20)\times(0,4),$$
   onde
   $$\mathcal{D} := u_t + u_x + u\,u_x - u_{xxt}$$

2. $$min|u(x,0) - u_0(x)| \quad \text{s.a.} \quad x \in (-10,20).$$

3. $$\min |u(-10,t) - g_1(t)| + |u(20,t) - g_2(t)| \quad \text{s.a.} \quad t \in (0,4).$$

Podemos utilizar o Erro Quadrático Médio associado a cada resíduo:

$$\text{EMQ} = \text{EMQ}_{\mathcal{D}} + \text{EMQ}_0 + \text{EMQ}_b$$

com

$$\text{EMQ}_{\mathcal{D}} = \frac{1}{N_{\mathcal{D}}}\sum_{i=1}^{N_{\mathcal{D}}} |f(x_i,t_i)|^2,$$

- (x_i, t_i), $i = 1, \cdots, N_{\mathcal{D}}$, $N_{\mathcal{D}}$ representa pontos de colocação escolhidos aleatoriamente em $(-10,20)\times(0,4)$

$$\text{EMQ}_0 = \frac{1}{N_0}\sum_{i=1}^{N_0} |u(x_i,0) - u_0(x_i)|^2,$$

- x_i, $i = 1, \cdots, N_0$ representa N_0 pontos de colocação no intervalo $(-10, 20)$

$$\text{EMQ}_b = \frac{1}{N_b}\sum_{i=1}^{N_b} |u(x_i,t_i)|^2,$$

- (x_i, t_i), $i = 1, \cdots, N_b$, pontos de colocação no intervalo em $(-10, 20) \times (0, 4)$

Este procedimento numérico foi implementado em Python por meio da biblioteca DeepXDE [4]. A figura 1 ilustra a solução aproximada pela rede no tempo $t = 2$. O erro relativo é da ordem de 10^{-3}, o que mostra que o método é eficaz. Os próximos passos serão testar a eficiência das PINNs na equação de BBM com diferentes condições de contorno, assim como investigar se a PINN é capaz de capturar algumas propriedades físicas das ondas viajantes como por exemplo, colisões de ondas.

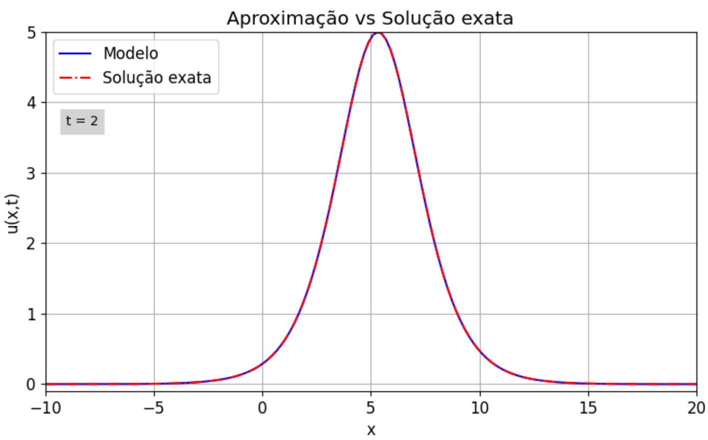

Figura 1: Aproximação para a equação de BBM usando PINNs em $t = 2$. Pontos de colocação: $N_f = 15000$, $N_b = 100$, $N_0 = 100$. Arquitetura da rede: 50 neurônios em cada camada, 3 camadas. Função ativação: $\tanh$, Número de iterações: 15.000.

Referências

[1] ALSHMARY, R. M. H. Applications of Partial Differential Equations. *Journal of Physics: Conference Series*, v. 1591, p. 012105, 2020. Disponível em: `https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/1591/1/012105`. Acesso em: 6 set. 2024.

[2] RAISSI, M.; PERDIKARIS, P.; KARNIADAKIS, G. E. Physics Informed Deep Learning (Part I): Data-driven Solutions of Nonlinear Partial Differential Equations. *arXiv preprint arXiv:1711.10561*, 2017. Disponível em: `https://arxiv.org/abs/1711.10561`. Acesso em: 6 set. 2024.

[3] CRIGHTON, D. G. Applications of KdV. *Acta Applicandae Mathematicae*, v. 39, p. 39-49, 1995.

[4] LU, L.; MENG, X.; MAO, Z.; KARNIADAKIS, G. E. DeepXDE: A deep learning library for solving differential equations. *arXiv preprint arXiv:1907.04502*, 2020. Disponível em: `https://arxiv.org/abs/1907.04502`. Acesso em: 6 set. 2024.