

Report Final: Una Comparación entre FEniCS y PINN

Santiago Uribe Pastás
Pontificia Universidad Javeriana Cali
Cali, Colombia
suribe06@javerianacali.edu.co

May 2023

1 Introducción

En la actualidad existen varias herramientas que permiten solucionar numéricamente ecuaciones diferenciales parciales (EDP). Entre estas herramientas se encuentra FEniCS que es una software de código abierto que permite a los usuarios traducir rápidamente modelos científicos en un eficiente código de elementos finitos con las interfaces de alto nivel Python y C++. Sin embargo, como cualquier herramienta computacional, tiene ciertas limitaciones. FEniCS está diseñado para resolver una amplia gama de EDPs, pero ciertas ecuaciones muy complejas pueden ser difíciles de implementar o pueden requerir un conocimiento más avanzado del software. Esto se debe a que algunas ecuaciones pueden requerir técnicas numéricas o algoritmos especializados que no están directamente disponibles en FEniCS. De igual forma, si se desean resolver problemas que involucren acoplamiento de diferentes fenómenos físicos, como flujo de fluidos y transferencia de calor, puede requerirse un trabajo adicional para implementar el acoplamiento entre diferentes ecuaciones. Esto se debe a que FEniCS está diseñado principalmente para resolver una única EDP a la vez, por lo que puede requerir una implementación personalizada para casos de acoplamiento complejos.

1.1 Problemática

Debido a las limitaciones inherentes en herramientas como FEniCS para resolver EDPs, han surgido técnicas innovadoras que combinan la potencia del aprendizaje profundo con la modelización física, como las redes neuronales con información física (Physics-Informed Neural Networks o PINNs, por sus siglas en inglés) [1]. Estas técnicas aprovechan la capacidad de las redes neuronales para aprender patrones complejos a partir de datos, al tiempo que incorporan conocimientos físicos en su estructura. Al entrenar las PINNs con datos observados y ecuaciones físicas, estas redes pueden capturar tanto la información

experimental como las restricciones físicas, permitiendo así resolver EDPs de manera eficiente y precisa, incluso en casos en los que las técnicas tradicionales presentan dificultades. Las PINNs han demostrado ser prometedoras en una amplia gama de aplicaciones, desde la mecánica de fluidos hasta la física cuántica, abriendo nuevas posibilidades en la resolución de problemas complejos de ingeniería y ciencia.

1.2 Ecuación a Resolver

Consideremos un dominio acotado Ω en 2D, definido como $\Omega = [a, b] \times [c, d]$, donde a, b, c, y d son los límites del dominio. La ecuación de Poisson viene dada por:

$$\begin{aligned}\Delta u(x, y) &= f(x, y) \text{ for } (x, y) \in \Omega \\ u(x, y) &= g(x, y) \text{ for } (x, y) \in \partial\Omega\end{aligned}\tag{1}$$

En este caso:

$$\begin{aligned}f(x, y) &= -\sin(\pi x) \sin(\pi y) \\ g(x, y) &= 0 \\ \Omega &= [0, 1] \times [0, 1]\end{aligned}$$

Note que la solución a esta EDP esta dada por:

$$u(x, y) = \frac{\sin(\pi x) \sin(\pi y)}{2\pi^2}$$

2 Solución Numérica Usando FEniCS

Para resolver este problema en FEniCS, primero debemos encontrar la formula variacional de la EDP. Considere los siguientes espacios:

$$\begin{aligned}V &= \{v \in H^1(\Omega) : v|_{\partial\Omega} = g\} \\ \hat{V} &= \{v \in H_0^1(\Omega) : v|_{\partial\Omega} = 0\}\end{aligned}$$

Debido a que $g(x, y) = 0$, entonces $V = \hat{V}$. Sean $u, v \in V$, integrando sobre el dominio Ω :

$$\int_{\Omega} \Delta uv \, dx = \int_{\Omega} fv \, dx$$

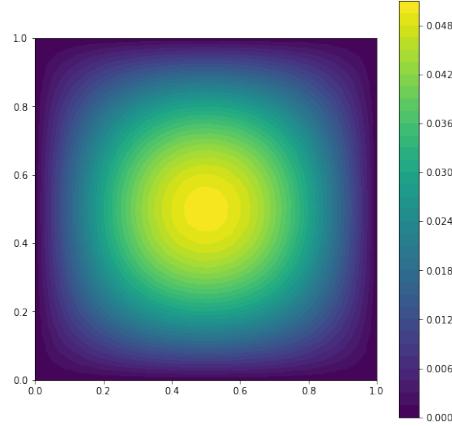
Aplicando el teorema de Green en el lado izquierdo, obtenemos que:

$$\int_{\Omega} \Delta uv \, dx = \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u}{\partial \eta} v \, dS - \int_{\Omega} \nabla u \nabla v \, dx$$

Como $v|_{\partial\Omega} = 0$, la integral de superficie es 0. Por tanto la fórmula variacional viene dada por:

$$-\int_{\Omega} \nabla u \nabla v \, dx = \int_{\Omega} fv \, dx$$

Solucionando el problema variacional se obtiene que:



3 Solución Numérica Usando PINNs

3.1 Funcional de Perdida y Residual

El método construye una aproximación $u_\theta(x, y) \approx u(x, y)$ de la solución de (1), donde $u_\theta : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ denota una función realizada por una red neuronal con parámetros θ . La solución de la EDP (1) se basa en el residuo de una aproximación dada de la red neuronal $u_\theta(x, y)$.

$$r_\theta := \Delta u(x, y) - f(x, y) \quad (2)$$

El enfoque PINN para la solución de la EDP (1) procede ahora por minimización del funcional de pérdida:

$$\phi_\theta(X) := \phi_\theta^r(X^r) + \phi_\theta^b(X^b) \quad (3)$$

donde X denota la colección de datos de entrenamiento y la función de pérdida ϕ_θ contiene los siguientes términos:

- la media cuadrática de los residuos:

$$\phi_\theta^r(X^r) := \frac{1}{N_r} \sum_{i=1}^{N_r} |r_\theta(x_i^r, y_i^r)|^2$$

en una serie de puntos de colocación $X^r := \{(x_i^r, y_i^r)\}_{i=1}^{N_r} \subset \Omega$ y r_θ es la red neuronal informada por la física.

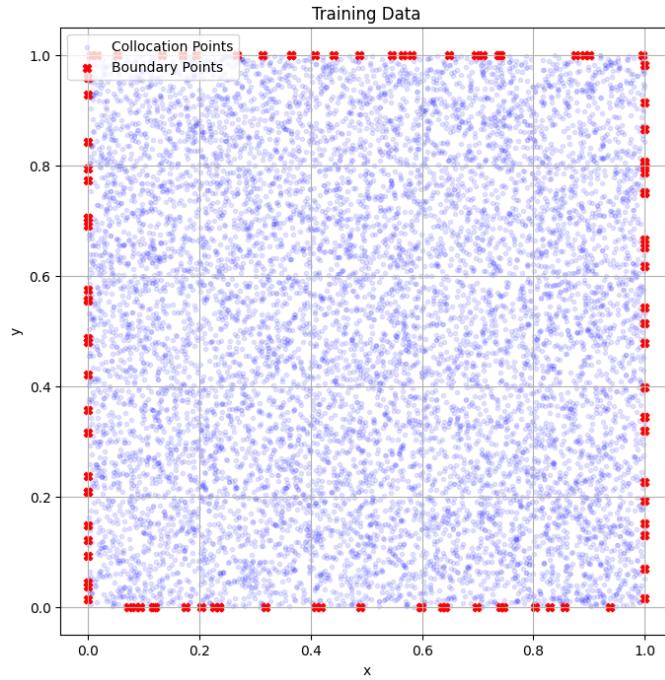
- el desajuste cuadrático medio con respecto a las condiciones de frontera:

$$\phi_\theta^b(X^b) := \frac{1}{N_b} \sum_{i=1}^{N_b} |u_\theta(x_i^b, y_i^b) - u_b(x_i^b, y_i^b)|^2$$

en una serie de puntos de la frontera $X^b := \{(x_i^b, y_i^b)\}_{i=1}^{N_b} \subset \partial\Omega$.

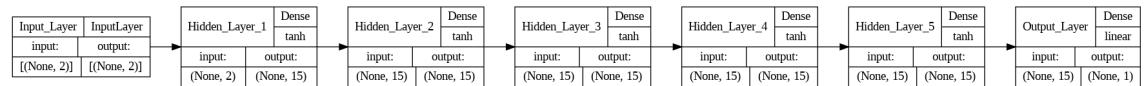
3.2 Datos de Entrenamiento

Para los datos de entrenamiento se utilizaron 10,000 puntos de colocación y 200 puntos de frontera, como se muestra a continuación:



3.3 Arquitectura de la Red Neuronal

La red neuronal profunda tiene la siguiente estructura: la capa de entrada, seguida de 5 capas totalmente conectadas, cada una de ellas con 15 neuronas y cada una seguida de una función de activación tangente hiperbólica y una capa de salida. Esta configuración da como resultado una red que contiene 1021 parámetros entrenables (primera capa oculta: $2 \cdot 15 + 15 = 45$; 4 capas intermedias: cada una $15 \cdot 15 + 15 = 240$; capa de salida: $15 \cdot 1 + 1 = 16$).



3.4 Aproximación de la ecuación de Poisson mediante PINNs

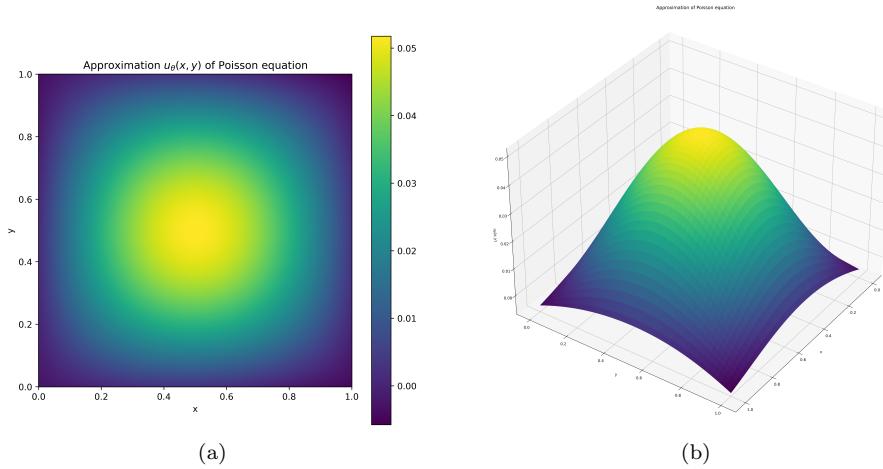
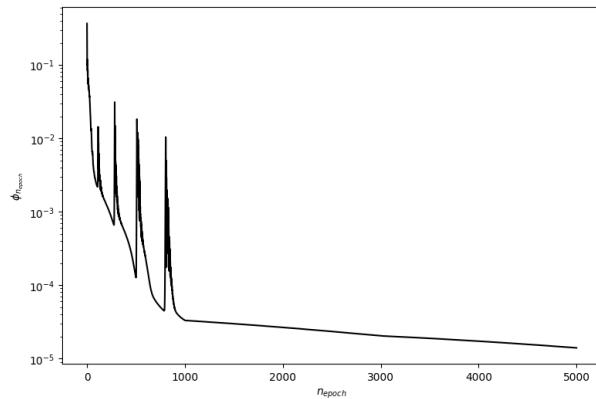


Figure 1: Análisis de la Variable Objetivo

3.5 Funcional de Perdida

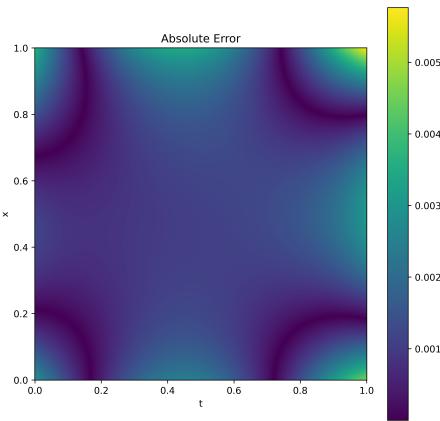


Una observación relevante sobre la gráfica del funcional de pérdida del modelo de deep learning es que se puede apreciar una disminución constante a lo largo de las 5000 épocas. Esto indica que el modelo está aprendiendo de manera efectiva a medida que se entrena y se ajusta a los datos. La disminución continua de la función de pérdida sugiere que el modelo está mejorando su capacidad para hacer predicciones precisas y ajustarse a los patrones presentes en los datos de entrenamiento. Esta tendencia descendente en la función de pérdida es un indicador positivo, ya que muestra que el modelo está convergiendo hacia

una solución óptima y está logrando una mejor representación de los datos a medida que se progresó en las épocas de entrenamiento.

4 Error de la Aproximación PINN

Dado que FEniCS es un software consolidado y ampliamente utilizado, vamos a contrastar la aproximación obtenida mediante el uso de PINNs con la solución analítica de la EDP (1). Al analizar la gráfica del error absoluto, podemos observar que este se encuentra en el rango de 10^{-3} , siendo el error más alto cercano a las coordenadas $(1, 1)$, mientras que en la frontera el error varía entre 0.003 y 0.001.



5 Conclusiones

Las PINNs presentan un enfoque prometedor para la resolución de EDPs, ya que combinan la capacidad de las redes neuronales para aprender patrones complejos con la incorporación de conocimientos físicos en su estructura. Esto permite obtener soluciones precisas y eficientes incluso en casos donde las técnicas tradicionales presentan limitaciones o dificultades.

Las PINNs ofrecen ventajas adicionales en términos de flexibilidad y versatilidad en la resolución de problemas acoplados o complejos, donde diferentes fenómenos físicos interactúan entre sí. A diferencia de FEniCS, que puede requerir implementaciones personalizadas para casos de acoplamiento complejos, las PINNs pueden adaptarse de manera más fácil y directa a la resolución de problemas con acoplamientos físicos.

La comparación entre la aproximación mediante PINNs y la solución analítica, revela que las PINNs pueden alcanzar una precisión aceptable en la resolución de la EDP. Aunque existen discrepancias notables en ciertas áreas del dominio,

el error absoluto se mantiene en el rango de 10^{-3} , lo que indica una buena aproximación en general.

Es importante tener en cuenta que, si bien las PINNs muestran resultados prometedores, su desempeño puede depender en gran medida de la elección adecuada de la arquitectura de la red neuronal, la selección de puntos de entrenamiento y frontera, y la configuración de los hiperparámetros. Un análisis exhaustivo de estas consideraciones puede ayudar a mejorar aún más la precisión y eficiencia de la aproximación mediante PINNs.

References

- [1] J. Blechschmidt and O. G. Ernst, “Three ways to solve partial differential equations with neural networks — a review,” 2021.