

Physics-Informed Neural Networks: A Deep Learning Framework for Solving Forward and Inverse Problems Involving Nonlinear Partial Differential Equations

M. Raissi, P. Perdikaris, G.E. Karniadakis



FACULTAD DE
INGENIERÍA

175
AÑOS



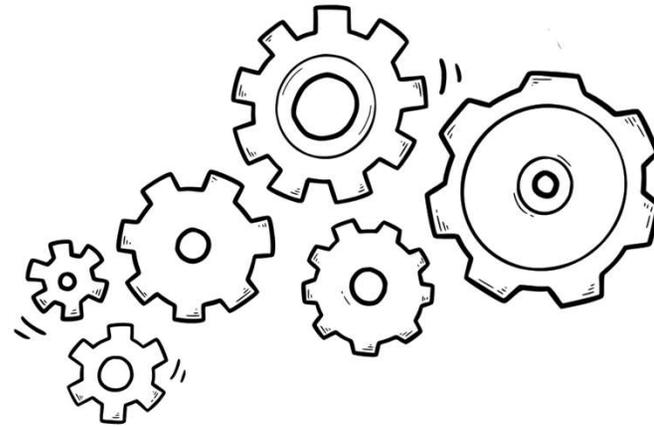
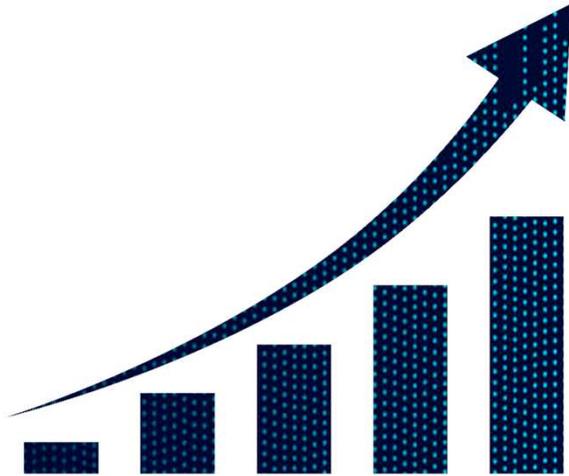
UNIVERSIDAD
DE LA REPÚBLICA
URUGUAY

Contenido

- Introducción
- Planteo del problema
- Solución a EDP en tiempo continuo
- Solución a EDP en tiempo discreto
- Descubrimiento de parámetros de EDP en tiempo continuo

Introducción

Redes neuronales impulsadas por el crecimiento de la cantidad de datos disponibles y la capacidad computacional.

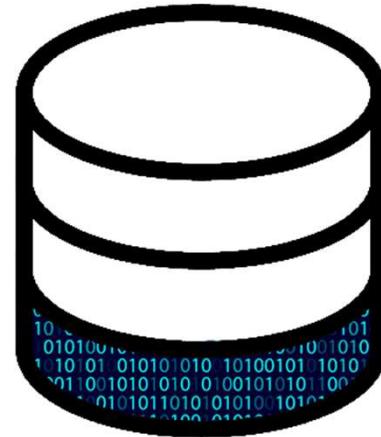


Introducción

Muchos datos de entrenamiento en varios campos excepto en física e ingeniería.



Otros campos



Física e ingeniería

Introducción

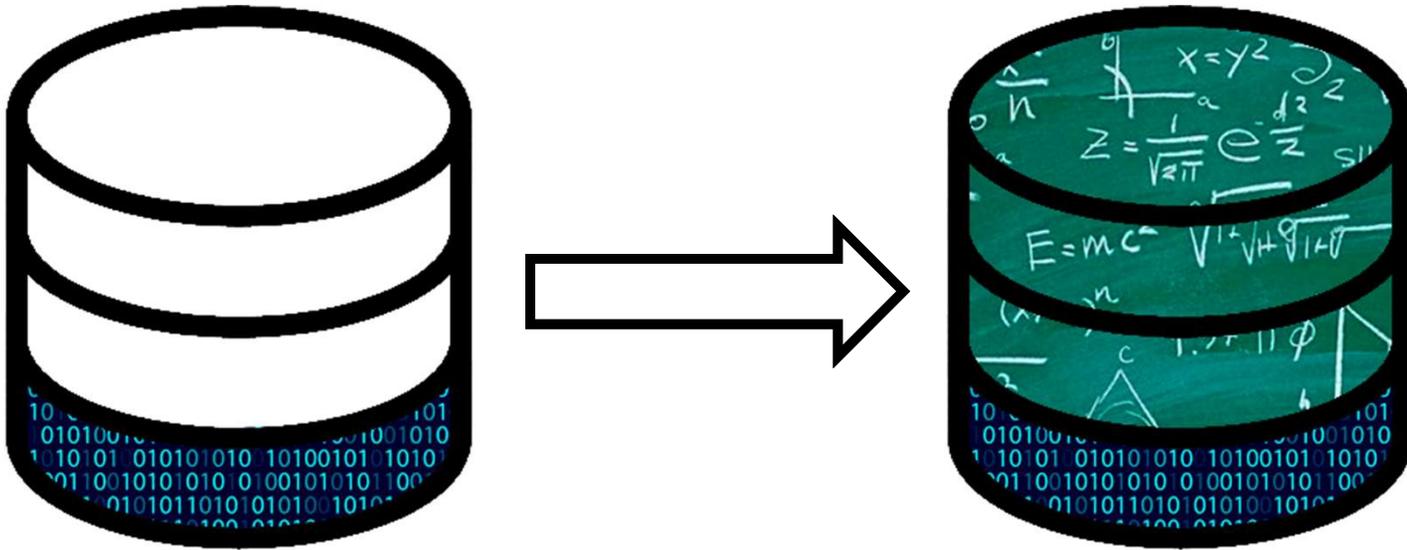
- Las soluciones estaban basadas en pocos datos y no se aprovechaba todo el conocimiento teórico adquirido hasta el momento.
- Al no utilizar esta información las soluciones pueden converger en algo que podría violar las leyes físicas.

Introducción



“...en esta casa obedecemos las leyes de la termodinámica.”

Introducción



Introducción

- La física actúa como una regularización que limita el espacio de soluciones admisibles.
- Este nuevo paradigma se conoce como Redes Neuronales Informadas por Física.

Planteo del problema

Redes Neuronales Informadas por Física:

1. Solución a ecuaciones diferenciales en derivadas parciales basadas en datos.
2. Descubrimiento de parámetros de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales basadas en datos.

Planteo del problema

Redes Neuronales Informadas por Física:

1. - $u_t + \mathcal{N}[u] = 0, \quad x \in \Omega, \quad t \in [0, T],$

2. - $u_t + \mathcal{N}[u; \lambda] = 0, \quad x \in \Omega, \quad t \in [0, T],$

Planteo del problema

Redes Neuronales Informadas por Física:

1. -
$$u_t - 0.0001u_{xx} + 5u^3 - 5u = 0$$

2. -
$$u_t + \lambda_1 uu_x + \lambda_2 u_{xxx} = 0$$

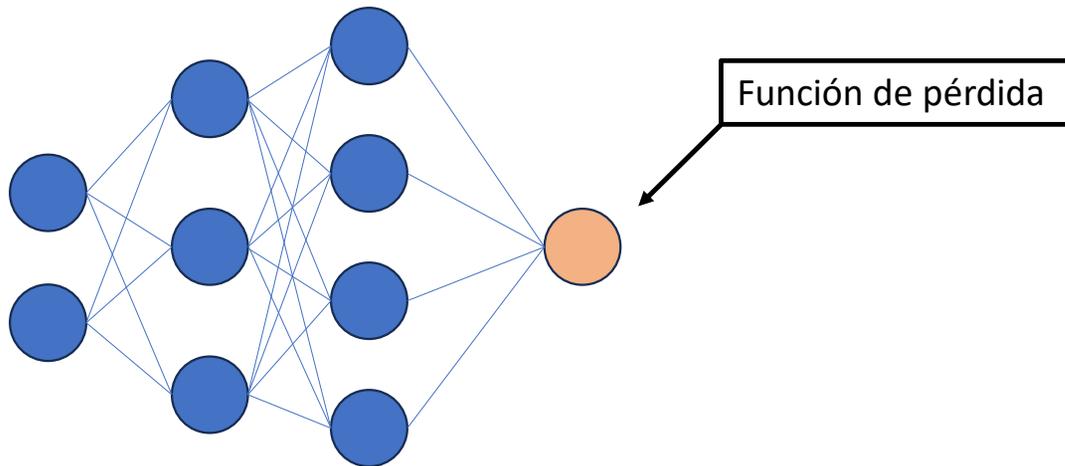
Solución a EDP en tiempo continuo

Ecuación diferencial en derivadas parciales:

$$u_t + \mathcal{N}[u] = 0, \quad x \in \Omega, \quad t \in [0, T],$$

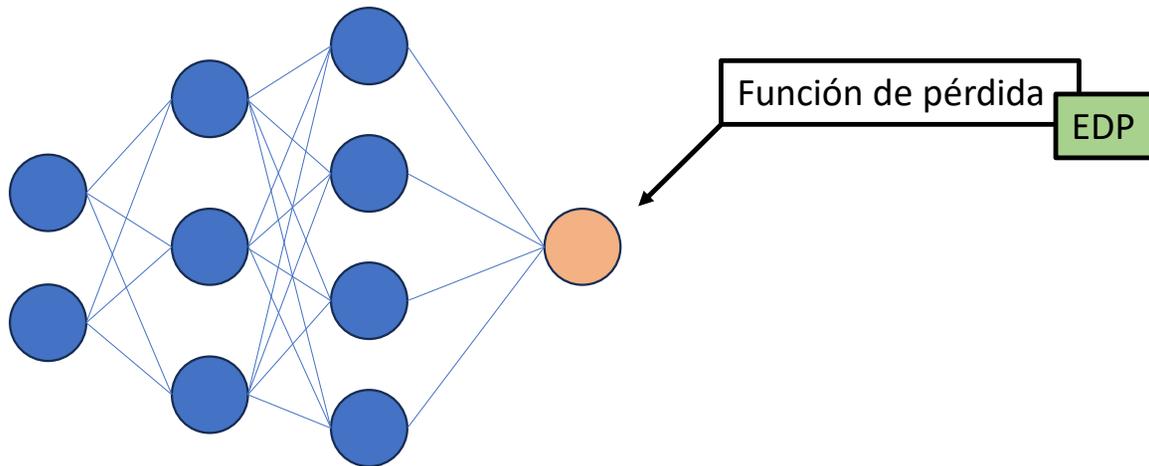
Solución a EDP en tiempo continuo

Red neuronal profunda:



Solución a EDP en tiempo continuo

Red neuronal profunda:



Solución a EDP en tiempo continuo

Ecuación diferencial en derivadas parciales:

$$f := u_t + \mathcal{N}[u],$$

Solución a EDP en tiempo continuo

Función de pérdida:

$$MSE = MSE_u + MSE_f,$$

Solución a EDP en tiempo continuo

Función de pérdida:

$$MSE = MSE_u + MSE_f,$$

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

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

Solución a EDP en tiempo continuo

Ejemplo:

Ecuación de Burgers con las condiciones de borde de Dirichlet

$$\begin{aligned}u_t + uu_x - (0.01/\pi)u_{xx} &= 0, & x \in [-1, 1], & t \in [0, 1], \\u(0, x) &= -\sin(\pi x), \\u(t, -1) &= u(t, 1) = 0.\end{aligned}$$

Solución a EDP en tiempo continuo

Ejemplo:

Ecuación de Burgers con las condiciones de borde de Dirichlet

$$MSE = MSE_u + MSE_f,$$

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

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

Solución a EDP en tiempo continuo

Ejemplo:

Ecuación de Burgers con las condiciones de borde de Dirichlet

$$MSE = MSE_u + MSE_f,$$

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

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

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

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

Solución a EDP en tiempo continuo

Ejemplo:

Ecuación de Burgers con las condiciones de borde de Dirichlet

$$MSE = MSE_u + MSE_f,$$

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

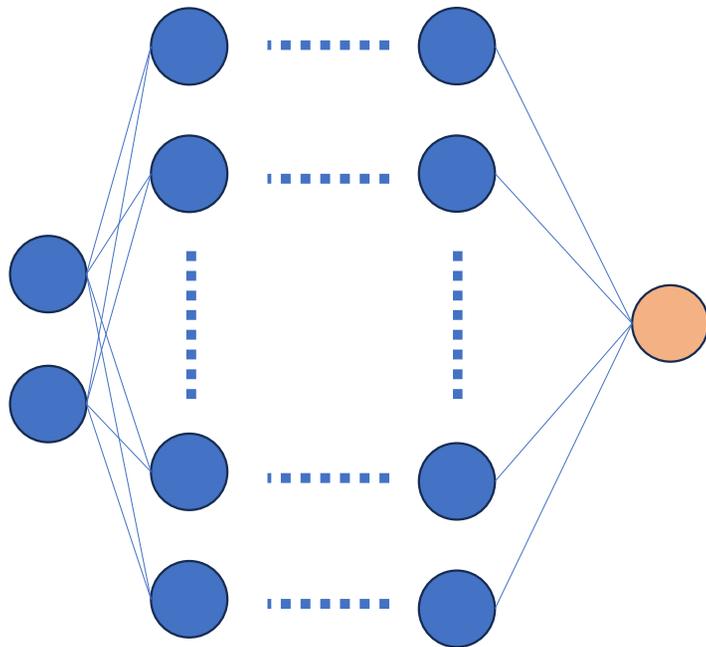
$$MSE_f = \frac{1}{N_f} \sum_{i=1}^{N_f} |f(t_f^i, x_f^i)|^2.$$

$$\begin{aligned} u(0, x) &= -\sin(\pi x), \\ u(t, -1) &= u(t, 1) = 0. \end{aligned}$$

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

Solución a EDP en tiempo continuo

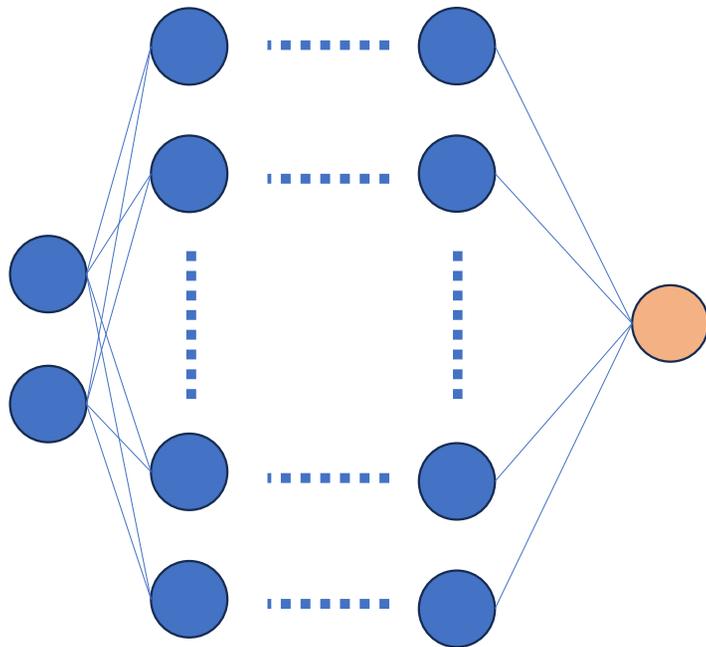
Configuración de la red neuronal:



- 2 entradas t, x

Solución a EDP en tiempo continuo

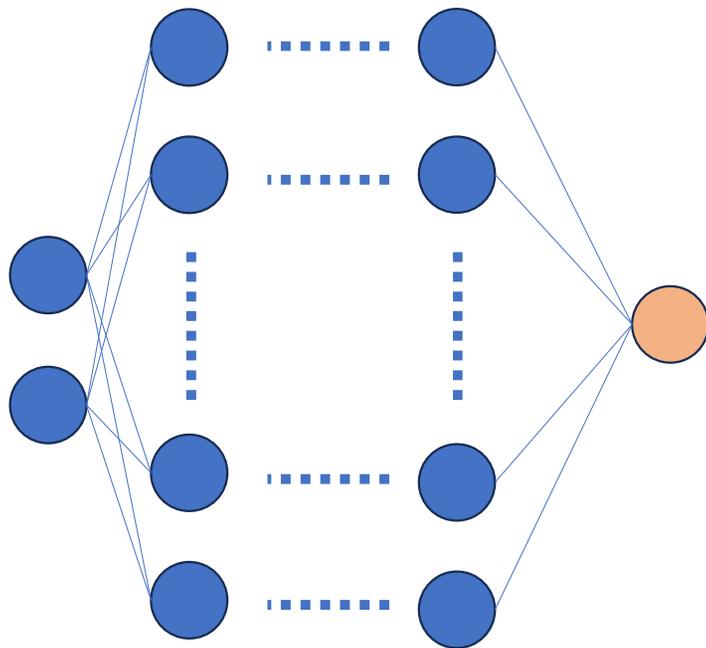
Configuración de la red neuronal:



- 2 entradas t, x
- 1 salida $u(t,x)$

Solución a EDP en tiempo continuo

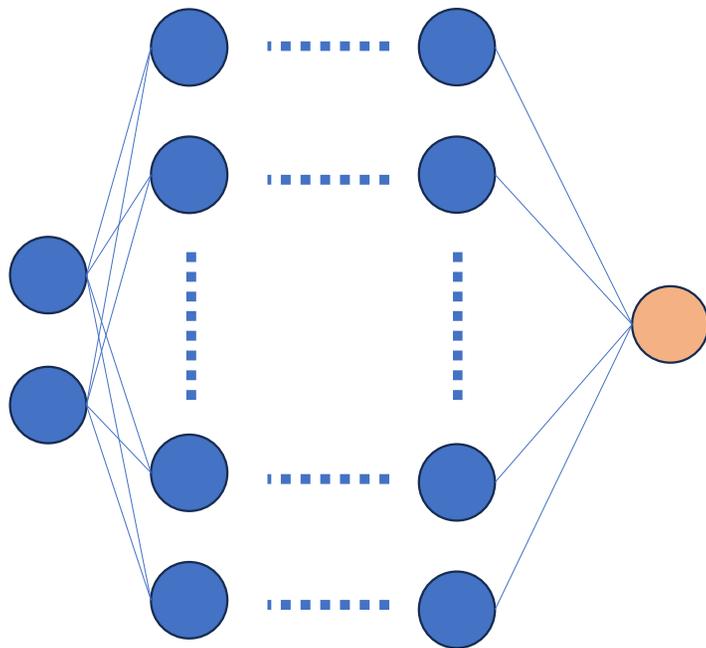
Configuración de la red neuronal:



- 2 entradas t, x
- 1 salida $u(t,x)$
- 8 capas ocultas

Solución a EDP en tiempo continuo

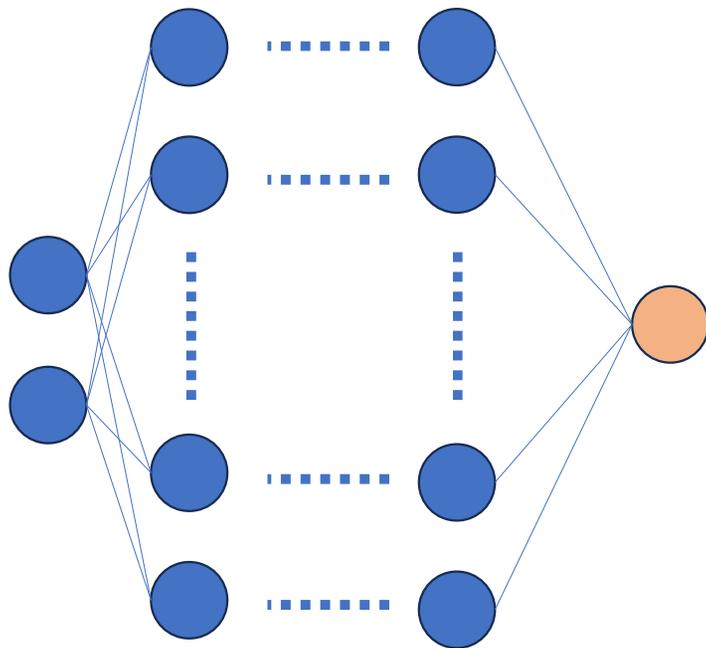
Configuración de la red neuronal:



- 2 entradas t, x
- 1 salida $u(t,x)$
- 8 capas ocultas
- 20 neuronas cada capa oculta

Solución a EDP en tiempo continuo

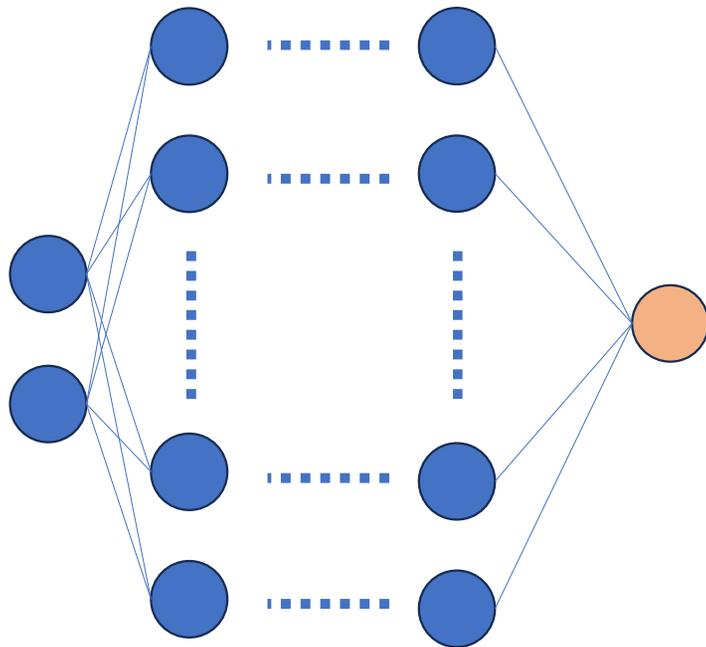
Configuración de la red neuronal:



- 2 entradas t, x
- 1 salida $u(t,x)$
- 8 capas ocultas
- 20 neuronas cada capa oculta
- tangente hiperbólica

Solución a EDP en tiempo continuo

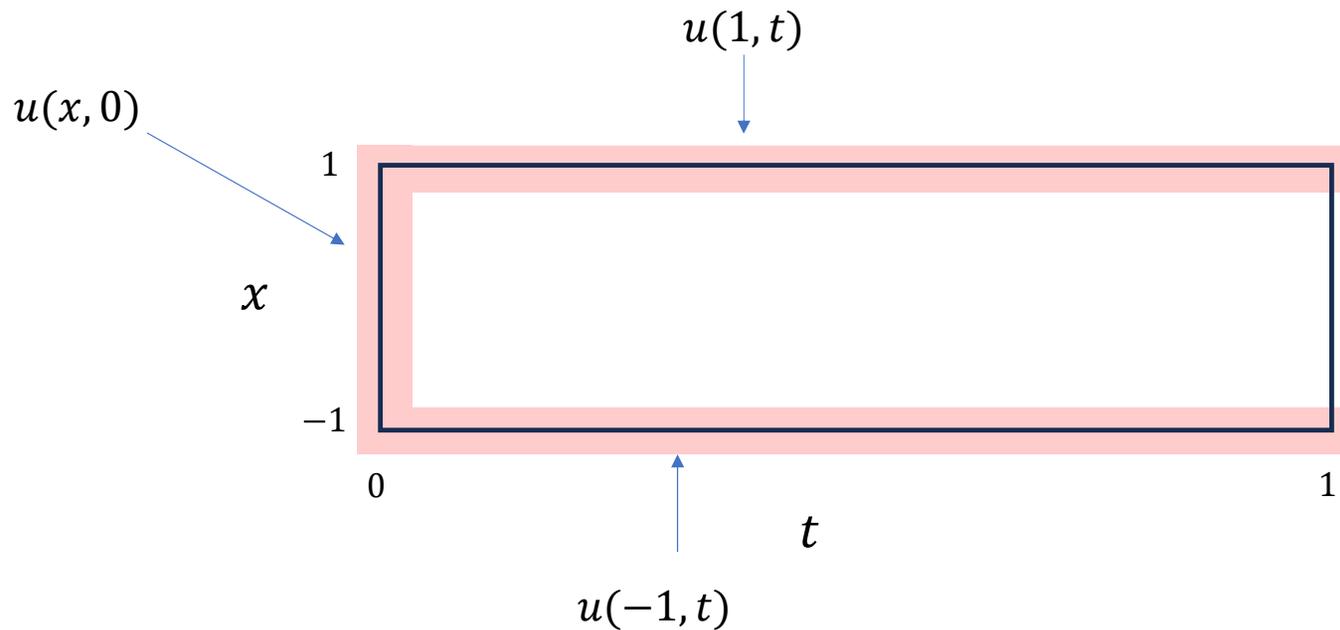
Configuración de la red neuronal:



- 2 entradas t, x
- 1 salida $u(t,x)$
- 8 capas ocultas
- 20 neuronas cada capa oculta
- tangente hiperbólica
- L-BFGS

Solución a EDP en tiempo continuo

Condiciones de borde:

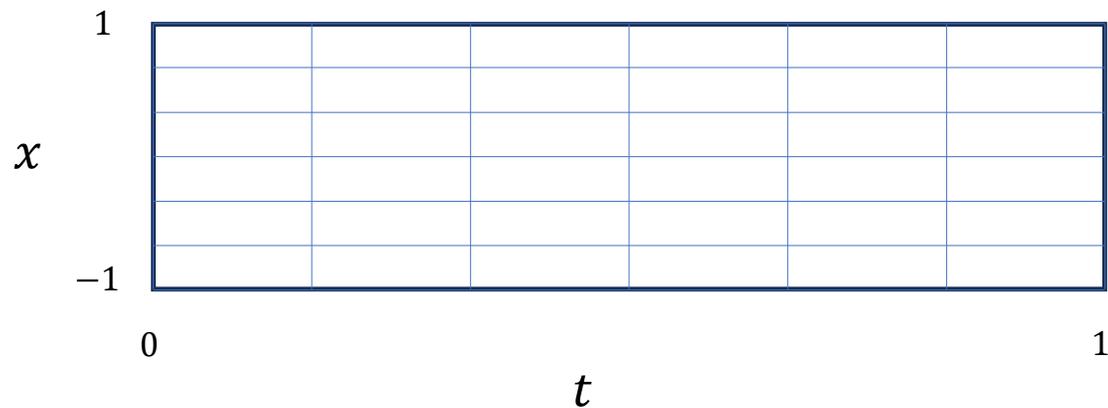


100 puntos al azar

Solución a EDP en tiempo continuo

Puntos de colocación:

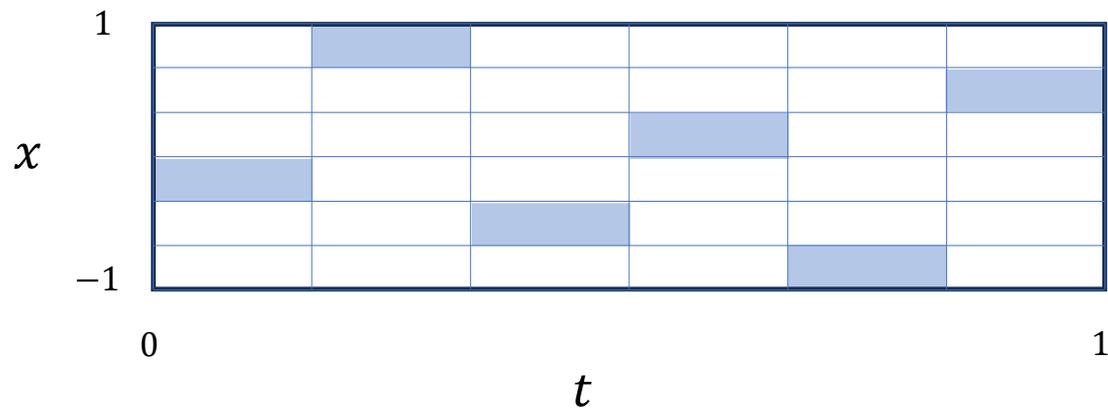
Latin hypercube sampling



Solución a EDP en tiempo continuo

Configuración de la red neuronal:

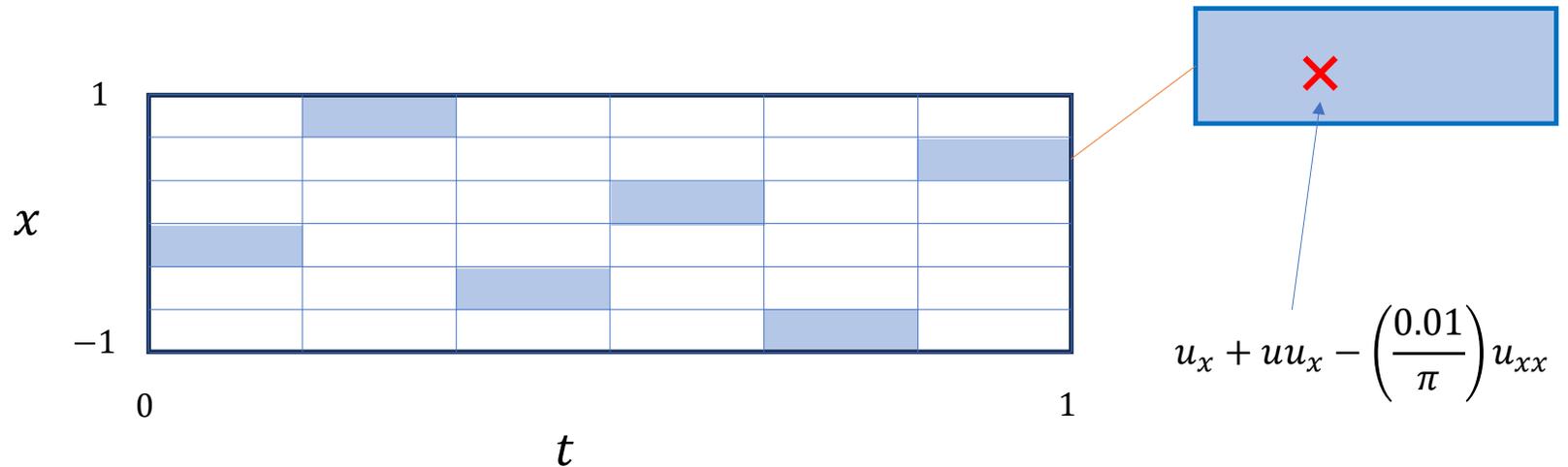
Latin hypercube sampling



Solución a EDP en tiempo continuo

Configuración de la red neuronal:

Latin hypercube sampling

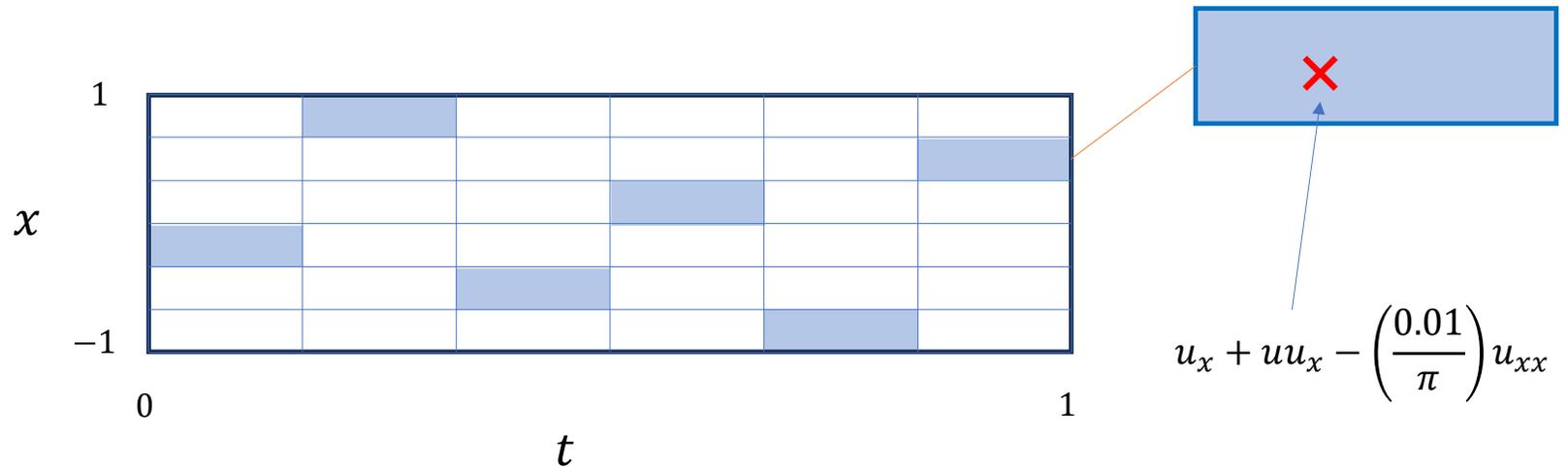


Solución a EDP en tiempo continuo

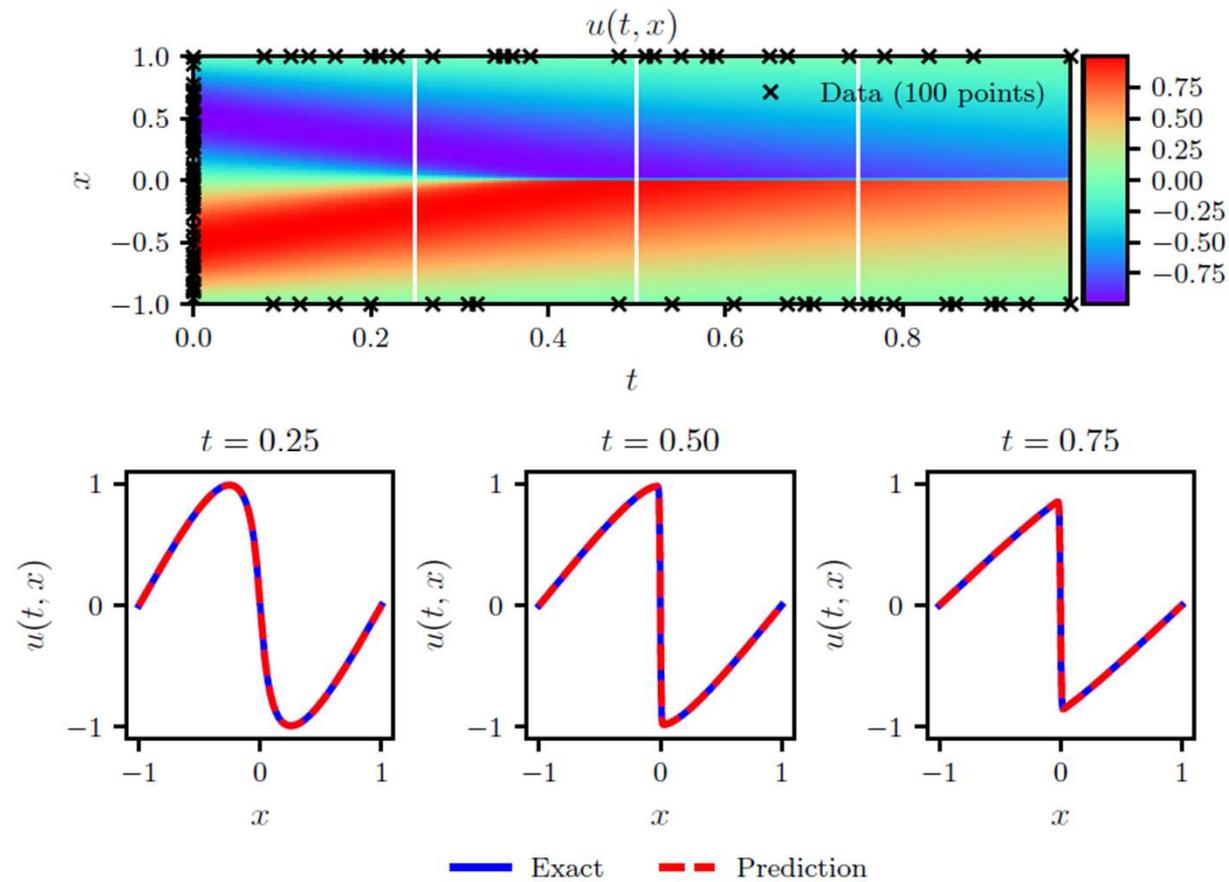
Configuración de la red neuronal:

Latin hypercube sampling

10.000 puntos



Solución a EDP en tiempo continuo



Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta

Familia de métodos iterativos para aproximar la solución a la EDP en tiempo discreto.

Solución a EDP en tiempo discreto

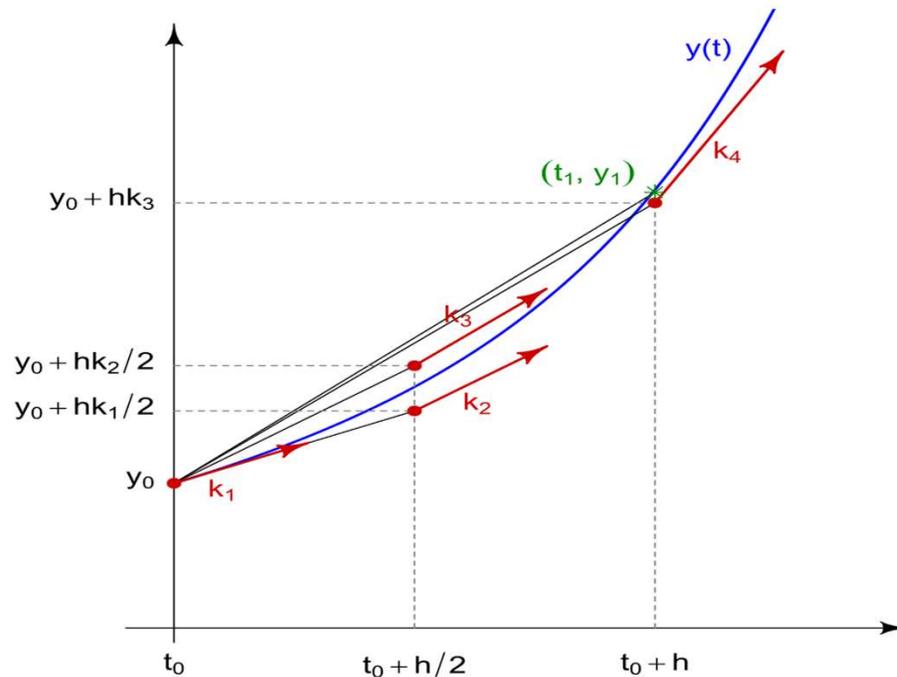
Runge-Kutta de 4to orden:

$$u^{n+1} = u^n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$
$$t^{n+1} = t^n + h$$

$$k_1 = f(t^n, u^n)$$
$$k_2 = f\left(t^n + \frac{h}{2}, u^n + h\frac{k_1}{2}\right)$$
$$k_3 = f\left(t^n + \frac{h}{2}, u^n + h\frac{k_2}{2}\right)$$
$$k_4 = f(t^n + h, u^n + hk_3)$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta de 4to orden:



By HilberTraum - Own work, CC BY-SA 4.0, <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=64366870>

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta de 4to orden:

$$u^{n+1} = u^n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$
$$t^{n+1} = t^n + h$$

$$k_1 = f(t^n, u^n)$$
$$k_2 = f\left(t^n + \frac{h}{2}, u^n + h\frac{k_1}{2}\right)$$
$$k_3 = f\left(t^n + \frac{h}{2}, u^n + h\frac{k_2}{2}\right)$$
$$k_4 = f(t^n + h, u^n + hk_3)$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta de 4to orden:

$$u^{n+1} = u^n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$
$$t^{n+1} = t^n + h$$

$$k_1 = f(t^n, u^n)$$
$$k_2 = f\left(t^n + \frac{h}{2}, u^n + h\frac{k_1}{2}\right)$$
$$k_3 = f\left(t^n + \frac{h}{2}, u^n + h\frac{k_2}{2}\right)$$
$$k_4 = f(t^n + h, u^n + hk_3)$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta de 4to orden:

$$u^{n+1} = u^n + h \left(\frac{1}{6} k_1 + \frac{2}{6} k_2 + \frac{2}{6} k_3 + \frac{1}{6} k_4 \right)$$
$$t^{n+1} = t^n + h$$

$$k_1 = f(t^n, u^n)$$
$$k_2 = f\left(t^n + \frac{h}{2}, u^n + h \frac{k_1}{2}\right)$$
$$k_3 = f\left(t^n + \frac{h}{2}, u^n + h \frac{k_2}{2}\right)$$
$$k_4 = f(t^n + h, u^n + h k_3)$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta de 4to orden:

$$u^{n+1} = u^n + h \left(\frac{1}{6} k_1 + \frac{2}{6} k_2 + \frac{2}{6} k_3 + \frac{1}{6} k_4 \right)$$
$$t^{n+1} = t^n + h$$

$$k_1 = f(t^n, u^n)$$
$$k_2 = f\left(t^n + \frac{h}{2}, u^n + h \frac{k_1}{2}\right)$$
$$k_3 = f\left(t^n + \frac{h}{2}, u^n + h \frac{k_2}{2}\right)$$
$$k_4 = f(t^n + h, u^n + h k_3)$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta de 4to orden:

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \left(\frac{1}{6} k_1 + \frac{2}{6} k_2 + \frac{2}{6} k_3 + \frac{1}{6} k_4 \right)$$
$$t^{n+1} = t^n + \Delta t$$

$$k_1 = f(t^n, u^n)$$
$$k_2 = f\left(t^n + \frac{\Delta t}{2}, u^n + \Delta t \frac{k_1}{2}\right)$$
$$k_3 = f\left(t^n + \frac{\Delta t}{2}, u^n + \Delta t \frac{k_2}{2}\right)$$
$$k_4 = f(t^n + \Delta t, u^n + \Delta t k_3)$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta de 4to orden:

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \left(\frac{1}{6} k_1 + \frac{2}{6} k_2 + \frac{2}{6} k_3 + \frac{1}{6} k_4 \right)$$
$$t^{n+1} = t^n + \Delta t$$

$$k_1 = f(t^n, u^n)$$
$$k_2 = f\left(t^n + \frac{\Delta t}{2}, u^n + \Delta t \frac{k_1}{2}\right)$$
$$k_3 = f\left(t^n + \frac{\Delta t}{2}, u^n + \Delta t \frac{k_2}{2}\right)$$
$$k_4 = f(t^n + \Delta t, u^n + \Delta t k_3)$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta de 4to orden:

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \left(\frac{1}{6} O(u^{t+c_1}) + \frac{2}{6} O(u^{t+c_2}) + \frac{2}{6} O(u^{t+c_3}) + \frac{1}{6} O(u^{t+c_4}) \right)$$
$$t^{n+1} = t^n + \Delta t$$

$$O(u^{t+c_1}) = f(t^n, u^n)$$
$$O(u^{t+c_2}) = f\left(t^n + \frac{\Delta t}{2}, u^n + \frac{\Delta t}{2} O(u^{t+c_1})\right)$$
$$O(u^{t+c_3}) = f\left(t^n + \frac{\Delta t}{2}, u^n + \frac{\Delta t}{2} O(u^{t+c_2})\right)$$
$$O(u^{t+c_4}) = f(t^n + \Delta t, u^n + \Delta t O(u^{t+c_3}))$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta de 4to orden:

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \left(\frac{1}{6} O(u^{t+c_1}) + \frac{2}{6} O(u^{t+c_2}) + \frac{2}{6} O(u^{t+c_3}) + \frac{1}{6} O(u^{t+c_4}) \right)$$
$$t^{n+1} = t^n + \Delta t$$

$$O(u^{t+c_1}) = f(t^n, u^n)$$
$$O(u^{t+c_2}) = f\left(t^n + \frac{\Delta t}{2}, u^n + \frac{\Delta t}{2} O(u^{t+c_1})\right)$$
$$O(u^{t+c_3}) = f\left(t^n + \frac{\Delta t}{2}, u^n + \frac{\Delta t}{2} O(u^{t+c_2})\right)$$
$$O(u^{t+c_4}) = f(t^n + \Delta t, u^n + \Delta t O(u^{t+c_3}))$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta de 4to orden:

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \left(\frac{1}{6} O(u^{t+c_1}) + \frac{2}{6} O(u^{t+c_2}) + \frac{2}{6} O(u^{t+c_3}) + \frac{1}{6} O(u^{t+c_4}) \right)$$
$$t^{n+1} = t^n + \Delta t$$

$$\begin{aligned} O(u^{t+c_1}) &= f(t^n, u^n) \\ O(u^{t+c_2}) &= f\left(t^n + \frac{\Delta t}{2}, u^n + \frac{\Delta t}{2} O(u^{t+c_1})\right) \\ O(u^{t+c_3}) &= f\left(t^n + \frac{\Delta t}{2}, u^n + \frac{\Delta t}{2} O(u^{t+c_2})\right) \\ O(u^{t+c_4}) &= f(t^n + \Delta t, u^n + \Delta t O(u^{t+c_3})) \end{aligned}$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta de 4to orden:

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \left(\frac{1}{6} O(u^{t+c_1}) + \frac{2}{6} O(u^{t+c_2}) + \frac{2}{6} O(u^{t+c_3}) + \frac{1}{6} O(u^{t+c_4}) \right)$$
$$t^{n+1} = t^n + \Delta t$$

$$O(u^{t+c_1}) = f(t^n + c_1 \Delta t, u^n)$$
$$O(u^{t+c_2}) = f \left(t^n + c_2 \Delta t, u^n + \frac{\Delta t}{2} O(u^{t+c_1}) \right)$$
$$O(u^{t+c_3}) = f \left(t^n + c_3 \Delta t, u^n + \frac{\Delta t}{2} O(u^{t+c_2}) \right)$$
$$O(u^{t+c_4}) = f(t^n + c_4 \Delta t, u^n + \Delta t O(u^{t+c_3}))$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta de 4to orden:

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \left(\frac{1}{6} O(u^{t+c_1}) + \frac{2}{6} O(u^{t+c_2}) + \frac{2}{6} O(u^{t+c_3}) + \frac{1}{6} O(u^{t+c_4}) \right)$$
$$t^{n+1} = t^n + \Delta t$$

$$O(u^{t+c_1}) = f(t^n + c_1 \Delta t, u^n)$$
$$O(u^{t+c_2}) = f \left(t^n + c_2 \Delta t, u^n + \frac{\Delta t}{2} O(u^{t+c_1}) \right)$$
$$O(u^{t+c_3}) = f \left(t^n + c_3 \Delta t, u^n + \frac{\Delta t}{2} O(u^{t+c_2}) \right)$$
$$O(u^{t+c_4}) = f \left(t^n + c_4 \Delta t, u^n + \Delta t O(u^{t+c_3}) \right)$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta de 4to orden:

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \left(\frac{1}{6} O(u^{t+c_1}) + \frac{2}{6} O(u^{t+c_2}) + \frac{2}{6} O(u^{t+c_3}) + \frac{1}{6} O(u^{t+c_4}) \right)$$
$$t^{n+1} = t^n + \Delta t$$

$$O(u^{t+c_1}) = f(t^n + c_1 \Delta t, u^n)$$
$$O(u^{t+c_2}) = f(t^n + c_2 \Delta t, u^n + \Delta t a_{21} O(u^{t+c_1}))$$
$$O(u^{t+c_3}) = f(t^n + c_3 \Delta t, u^n + \Delta t a_{32} O(u^{t+c_2}))$$
$$O(u^{t+c_4}) = f(t^n + c_4 \Delta t, u^n + \Delta t a_{43} O(u^{t+c_3}))$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta de 4to orden:

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \left(\frac{1}{6} O(u^{t+c_1}) + \frac{2}{6} O(u^{t+c_2}) + \frac{2}{6} O(u^{t+c_3}) + \frac{1}{6} O(u^{t+c_4}) \right)$$

$$t^{n+1} = t^n + \Delta t$$

$$\begin{aligned} O(u^{t+c_1}) &= f(t^n + c_1 \Delta t, u^n) \\ O(u^{t+c_2}) &= f(t^n + c_2 \Delta t, u^n + \Delta t a_{21} O(u^{t+c_1})) \\ O(u^{t+c_3}) &= f(t^n + c_3 \Delta t, u^n + \Delta t a_{32} O(u^{t+c_2})) \\ O(u^{t+c_4}) &= f(t^n + c_4 \Delta t, u^n + \Delta t a_{43} O(u^{t+c_3})) \end{aligned}$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta de 4to orden:

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \left(\frac{1}{6} O(u^{t+c_1}) + \frac{2}{6} O(u^{t+c_2}) + \frac{2}{6} O(u^{t+c_3}) + \frac{1}{6} O(u^{t+c_4}) \right)$$

$$\begin{aligned} O(u^{t+c_1}) &= f(t^n + c_1 \Delta t, u^n) \\ O(u^{t+c_2}) &= f(t^n + c_2 \Delta t, u^n + \Delta t a_{21} O(u^{t+c_1})) \\ O(u^{t+c_3}) &= f(t^n + c_3 \Delta t, u^n + \Delta t a_{32} O(u^{t+c_2})) \\ O(u^{t+c_4}) &= f(t^n + c_4 \Delta t, u^n + \Delta t a_{43} O(u^{t+c_3})) \end{aligned}$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta de 4to orden:

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \left(\frac{1}{6} O(u^{t+c_1}) + \frac{2}{6} O(u^{t+c_2}) + \frac{2}{6} O(u^{t+c_3}) + \frac{1}{6} O(u^{t+c_4}) \right)$$

$$\begin{aligned} O(u^{t+c_1}) &= f(t^n + c_1 \Delta t, u^n) \\ O(u^{t+c_2}) &= f(t^n + c_2 \Delta t, u^n + \Delta t a_{21} O(u^{t+c_1})) \\ O(u^{t+c_3}) &= f(t^n + c_3 \Delta t, u^n + \Delta t a_{32} O(u^{t+c_2})) \\ O(u^{t+c_4}) &= f(t^n + c_4 \Delta t, u^n + \Delta t a_{43} O(u^{t+c_3})) \end{aligned}$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta de 4to orden:

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t(b_1 O(u^{t+c_1}) + b_2 O(u^{t+c_2}) + b_3 O(u^{t+c_3}) + b_4 O(u^{t+c_4}))$$

$$\begin{aligned} O(u^{t+c_1}) &= f(t^n + c_1 \Delta t, u^n) \\ O(u^{t+c_2}) &= f(t^n + c_2 \Delta t, u^n + \Delta t a_{21} O(u^{t+c_1})) \\ O(u^{t+c_3}) &= f(t^n + c_3 \Delta t, u^n + \Delta t a_{32} O(u^{t+c_2})) \\ O(u^{t+c_4}) &= f(t^n + c_4 \Delta t, u^n + \Delta t a_{43} O(u^{t+c_3})) \end{aligned}$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta de 4to orden:

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t(b_1 O(u^{t+c_1}) + b_2 O(u^{t+c_2}) + b_3 O(u^{t+c_3}) + b_4 O(u^{t+c_4}))$$

$$\begin{aligned}O(u^{t+c_1}) &= f(t^n + c_1 \Delta t, u^n) \\O(u^{t+c_2}) &= f(t^n + c_2 \Delta t, u^n + \Delta t a_{21} O(u^{t+c_1})) \\O(u^{t+c_3}) &= f(t^n + c_3 \Delta t, u^n + \Delta t a_{32} O(u^{t+c_2})) \\O(u^{t+c_4}) &= f(t^n + c_4 \Delta t, u^n + \Delta t a_{43} O(u^{t+c_3}))\end{aligned}$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta:

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \sum_{j=1}^q b_j O(u^{t+c_j})$$

$$\begin{aligned} O(u^{t+c_1}) &= f(t^n + c_1 \Delta t, u^n) \\ O(u^{t+c_2}) &= f(t^n + c_2 \Delta t, u^n + \Delta t a_{21} O(u^{t+c_1})) \\ O(u^{t+c_3}) &= f(t^n + c_3 \Delta t, u^n + \Delta t a_{32} O(u^{t+c_2})) \\ O(u^{t+c_4}) &= f(t^n + c_4 \Delta t, u^n + \Delta t a_{43} O(u^{t+c_3})) \end{aligned}$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta:

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \sum_{j=1}^q b_j O(u^{t+c_j})$$

$$O(u^{t+c_1}) = f(t^n + c_1 \Delta t, u^n)$$

$$O(u^{t+c_2}) = f(t^n + c_2 \Delta t, u^n + \Delta t a_{21} O(u^{t+c_1}))$$

$$O(u^{t+c_3}) = f(t^n + c_3 \Delta t, u^n + \Delta t a_{32} O(u^{t+c_2}))$$

$$O(u^{t+c_4}) = f(t^n + c_4 \Delta t, u^n + \Delta t a_{43} O(u^{t+c_3}))$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta:

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \sum_{j=1}^q b_j O(u^{t+c_j})$$

$$O(u^{t+c_2}) = f(t^n + c_2\Delta t, u^n + \Delta t a_{21}O(u^{t+c_1}))$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta:

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \sum_{j=1}^q b_j O(u^{t+c_j})$$

$$O(u^{t+c_2}) = f(t^n + c_2\Delta t, u^n + \Delta t a_{21}O(u^{t+c_1}))$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta:

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \sum_{j=1}^q b_j O(u^{t+c_j})$$

$$O(u^{t+c_2}) = f(t^n + c_2\Delta t, u^n + \Delta t a_{21}O(u^{t+c_1}))$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta:

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \sum_{j=1}^q b_j O(u^{t+c_j})$$

$$O(u^{t+c_2}) = f(t^n + c_2\Delta t, u^n + \Delta t a_{21}O(u^{t+c_1}))$$

$$u^{t+c_2} = u^n + \Delta t a_{21}O(u^{t+c_1})$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta:

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \sum_{j=1}^q b_j O(u^{t+c_j})$$

$$O(u^{t+c_2}) = f(t^n + c_2\Delta t, u^n + \Delta t a_{21}O(u^{t+c_1}))$$

$$u^{t+c_2} = u^n + \Delta t a_{21}O(u^{t+c_1})$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta:

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \sum_{j=1}^q b_j O(u^{t+c_j})$$

$$u^{t+c_2} = u^n + \Delta t a_{21} O(u^{t+c_1})$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta:

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \sum_{j=1}^q b_j O(u^{t+c_j})$$

$$u^{t+c_2} = u^n + \Delta t a_{21} O(u^{t+c_1})$$

Método explícito
depende de los estados
anteriores

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta:

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \sum_{j=1}^q b_j O(u^{t+c_j})$$

$$u^{n+c_2} = u^n + \Delta t \sum_{j=1}^q a_{2j} O(u^{t+c_j})$$

Método implícito
depende de todos los estados

Solución a EDP en tiempo discreto

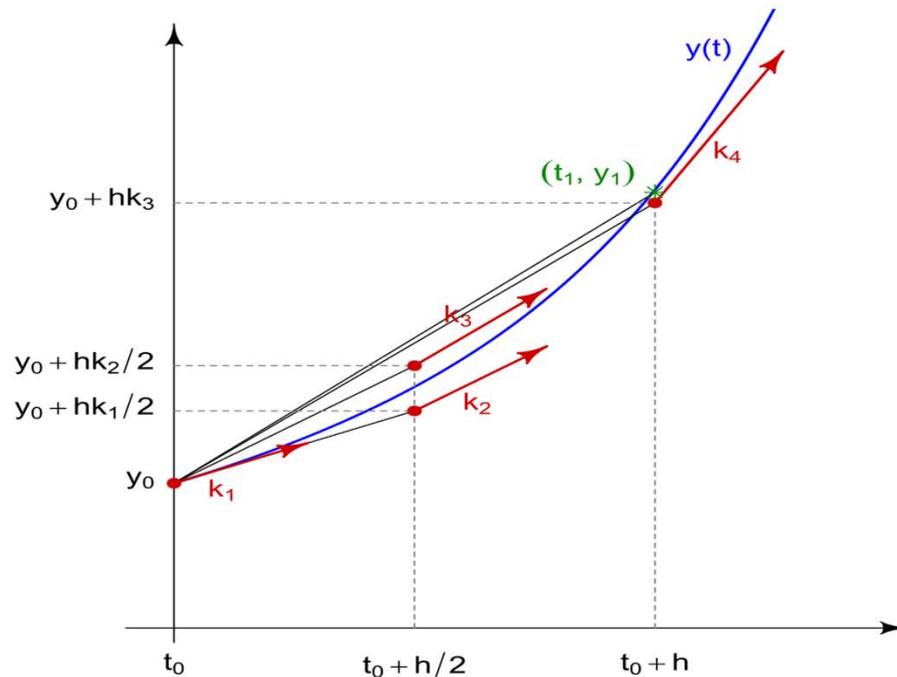
Runge-Kutta:

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \sum_{j=1}^q b_j O(u^{t+c_j})$$

$$u^{n+c_i} = u^n + \Delta t \sum_{j=1}^q a_{ij} O(u^{t+c_j}), \quad i = 1, \dots, q$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta de 4to orden:



By HilberTraum - Own work, CC BY-SA 4.0, <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=64366870>

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta:

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \sum_{j=1}^q b_j O(u^{t+c_j})$$

$$u^{n+c_i} = u^n + \Delta t \sum_{j=1}^q a_{ij} O(u^{t+c_j}), \quad i = 1, \dots, q$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta:

$$u^{n+1} = u^n \boxed{+} \Delta t \sum_{j=1}^q b_j O(u^{t+c_j})$$


$$u^{n+c_i} = u^n \boxed{+} \Delta t \sum_{j=1}^q a_{ij} O(u^{t+c_j}), \quad i = 1, \dots, q$$


Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta:

$$u^{n+1} = u^n - \Delta t \sum_{j=1}^q b_j O(u^{t+c_j})$$

$$u^{n+c_i} = u^n - \Delta t \sum_{j=1}^q a_{ij} O(u^{t+c_j}), \quad i = 1, \dots, q$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta:

$$u^{n+1} = u^n - \Delta t \sum_{j=1}^q b_j O(u^{t+c_j})$$

$$u^{n+c_i} = u^n - \Delta t \sum_{j=1}^q a_{ij} O(u^{t+c_j}), \quad i = 1, \dots, q$$

$$[u^{n+c_1}(x), \dots, u^{n+c_q}(x), u^{n+1}(x)]$$

Salida de la red

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta:

$$u^{n+1} = u^n - \Delta t \sum_{j=1}^q b_j O(u^{t+c_j})$$

$$u^{n+c_i} = u^n - \Delta t \sum_{j=1}^q a_{ij} O(u^{t+c_j}), \quad i = 1, \dots, q$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta:

$$u^n = u^{n+1} + \Delta t \sum_{j=1}^q b_j O(u^{t+c_j})$$

$$u^n = u^{n+c_i} + \Delta t \sum_{j=1}^q a_{ij} O(u^{t+c_j}), \quad i = 1, \dots, q$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta:

$$u_{q+1}^n := u^n = u^{n+1} + \Delta t \sum_{j=1}^q b_j O(u^{t+c_j})$$

$$u_i^n := u^n = u^{n+c_i} - \Delta t \sum_{j=1}^q a_{ij} O(u^{t+c_j}), \quad i = 1, \dots, q$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Runge-Kutta:

$$u_{q+1}^n := u^n = u^{n+1} + \Delta t \sum_{j=1}^q b_j O(u^{t+c_j})$$

$$u_i^n := u^n = u^{n+c_i} - \Delta t \sum_{j=1}^q a_{ij} O(u^{t+c_j}), \quad i = 1, \dots, q$$

$$[u_1^n, \dots, u_q^n, u_{q+1}^n]$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Función de pérdida:

$$SSE = SSE_n + SSE_b$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Función de pérdida:

$$SSE = SSE_n + SSE_b$$

$$SSE_n = \sum_{j=1}^q \sum_{i=1}^{N_n} |u_j^n(x^{n,i}) - u^{n,i}|^2$$

SSE_b depende de las condiciones de borde

Solución a EDP en tiempo discreto

Ejemplo:

Allen-Cahn Equation

$$\begin{aligned}u_t - 0.0001u_{xx} + 5u^3 - 5u &= 0, & x \in [-1,1], & t \in [0,1] \\u(0, x) &= x^2 \cos(\pi x) \\u(t, -1) &= u(t, 1) \\u_x(t, -1) &= u_x(t, 1)\end{aligned}$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Ejemplo:

Allen-Cahn Equation

$$O(u^{n+c_j}) = -0.0001u_{xx}^{n+c_j} + 5(u^{n+c_j})^3 - 5u^{n+c_j}$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Función de pérdida:

$$SSE = SSE_n + SSE_b$$

$$SSE_n = \sum_{j=1}^{q+1} \sum_{i=1}^{N_n} |u_j^n(x^{n,i}) - u^{n,i}|^2$$

$$\begin{aligned} SSE_b &= \sum_{i=1}^q |u^{n+c_i}(-1) - u^{n+c_i}(1)|^2 + |u^{n+1}(-1) - u^{n+1}(1)| \\ &+ \sum_{i=1}^q |u_x^{n+c_i}(-1) - u_x^{n+c_i}(1)|^2 + |u_x^{n+1}(-1) - u_x^{n+1}(1)| \end{aligned}$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Función de pérdida:

$$SSE = SSE_n + SSE_b$$

$$SSE_n = \sum_{j=1}^{q+1} \sum_{i=1}^{N_n} |u_j^n(x^{n,i}) - u^{n,i}|^2$$

$$SSE_b = \sum_{i=1}^q |u^{n+c_i}(-1) - u^{n+c_i}(1)|^2 + |u^{n+1}(-1) - u^{n+1}(1)|^2 \\ + \sum_{i=1}^q |u_x^{n+c_i}(-1) - u_x^{n+c_i}(1)|^2 + |u_x^{n+1}(-1) - u_x^{n+1}(1)|^2$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Función de pérdida:

$$SSE = SSE_n + SSE_b$$

$$SSE_n = \sum_{j=1}^{q+1} \sum_{i=1}^{N_n} |u_j^n(x^{n,i}) - u^{n,i}|^2$$

$$\begin{aligned} SSE_b &= \sum_{i=1}^q |u^{n+c_i}(-1) - u^{n+c_i}(1)|^2 + |u^{n+1}(-1) - u^{n+1}(1)| \\ &+ \sum_{i=1}^q |u_x^{n+c_i}(-1) - u_x^{n+c_i}(1)|^2 + |u_x^{n+1}(-1) - u_x^{n+1}(1)| \end{aligned}$$

Solución a EDP en tiempo discreto

Función de pérdida:

$$SSE_n = \sum_{j=1}^{q+1} \sum_{i=1}^{N_n} |u_j^n(x^{n,i}) - u^{n,i}|^2$$

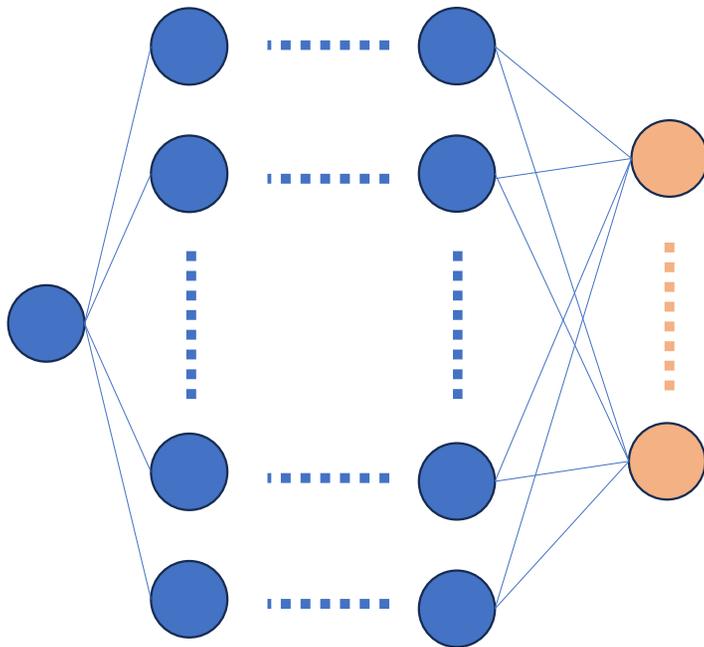
$$u_i^n := u^n = u^{n+c_i} - \Delta t \sum_{j=1}^q a_{ij} O(u^{t+c_j}), \quad i = 1, \dots, q$$

$$u_{q+1}^n := u^n = u^{n+1} + \Delta t \sum_{j=1}^q b_j O(u^{t+c_j})$$

$$O(u^{n+c_j}) = -0.0001u_{xx}^{n+c_j} + 5(u^{n+c_j})^3 - 5u^{n+c_j}$$

Solución a EDP en tiempo discreto

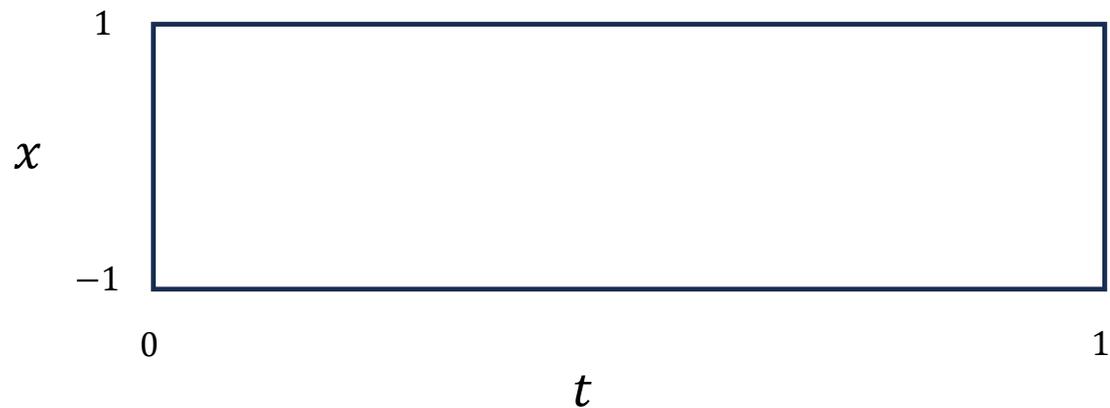
Configuración del problema:



- 1 entrada (x)
- $q+1$ salidas (estados de Runge-Kutta)
- 4 capas ocultas
- 200 neuronas cada capa oculta

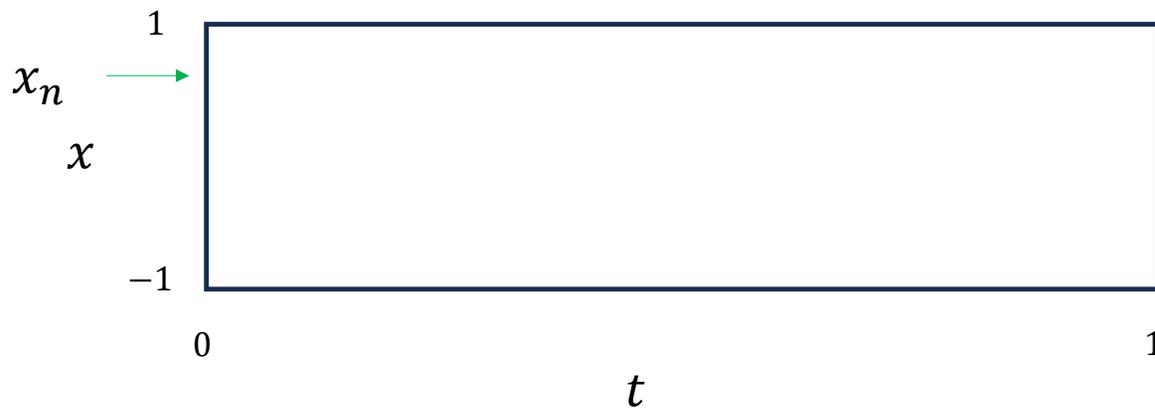
Solución a EDP en tiempo discreto

Configuración del problema:



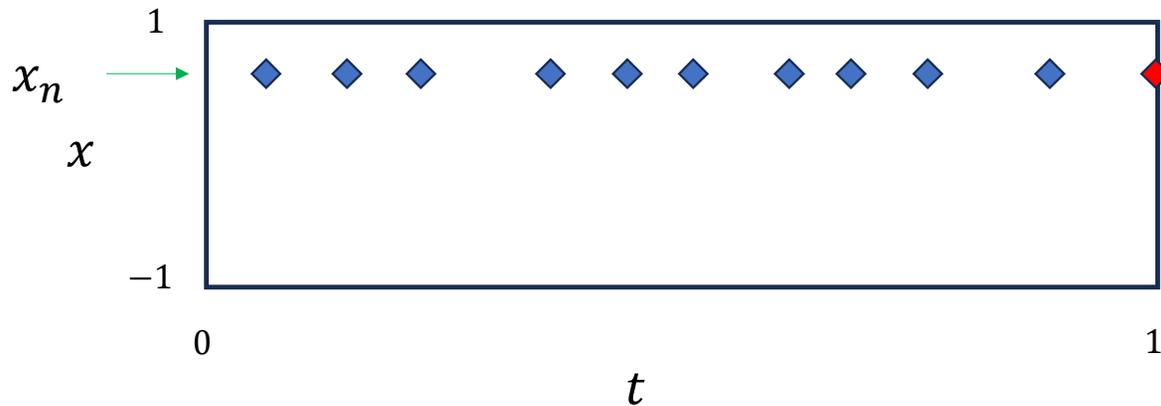
Solución a EDP en tiempo discreto

Configuración del problema:



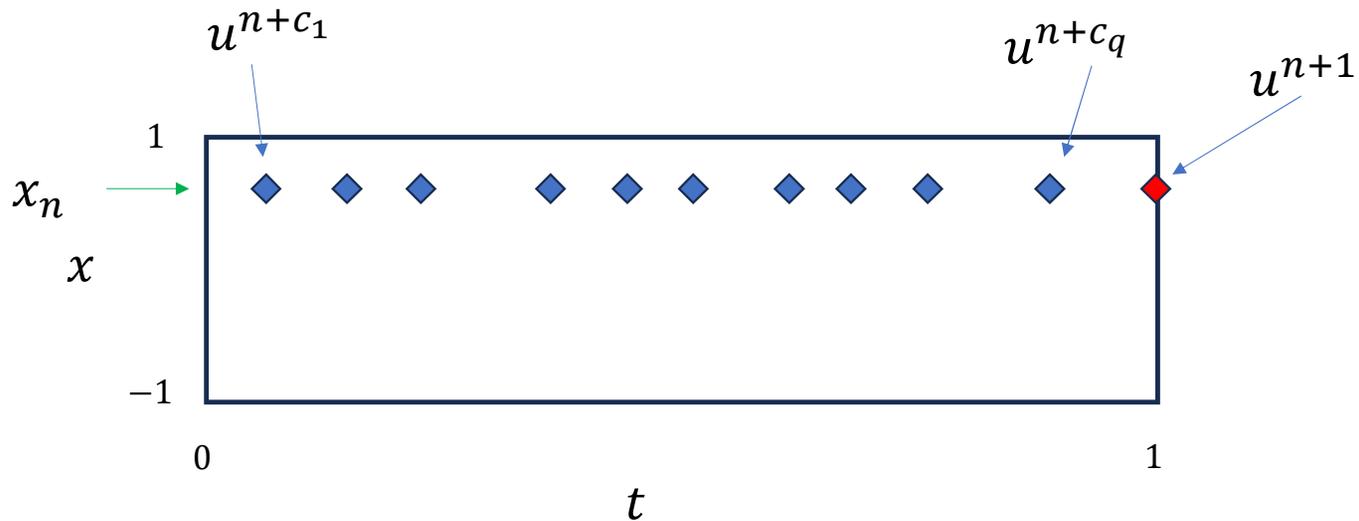
Solución a EDP en tiempo discreto

Configuración del problema:



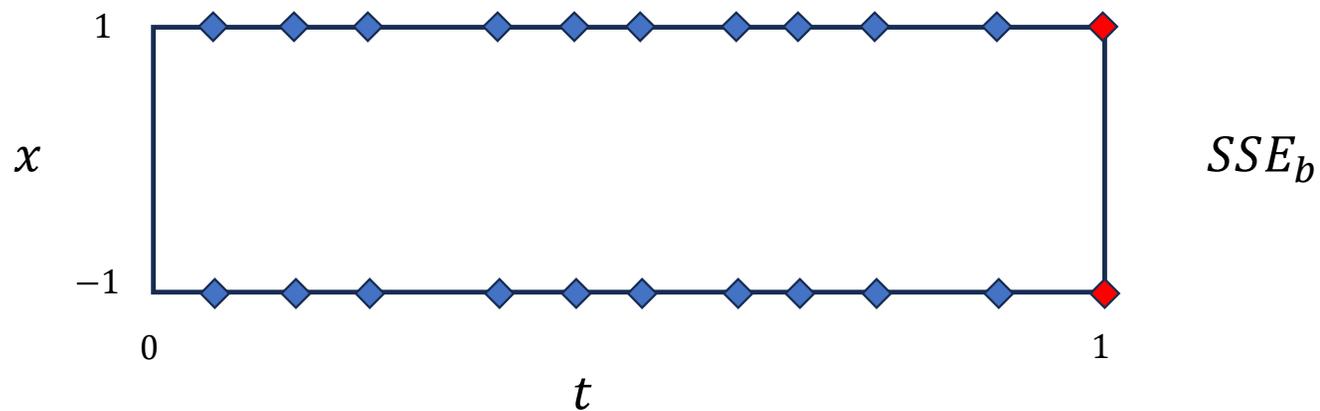
Solución a EDP en tiempo discreto

Configuración del problema:



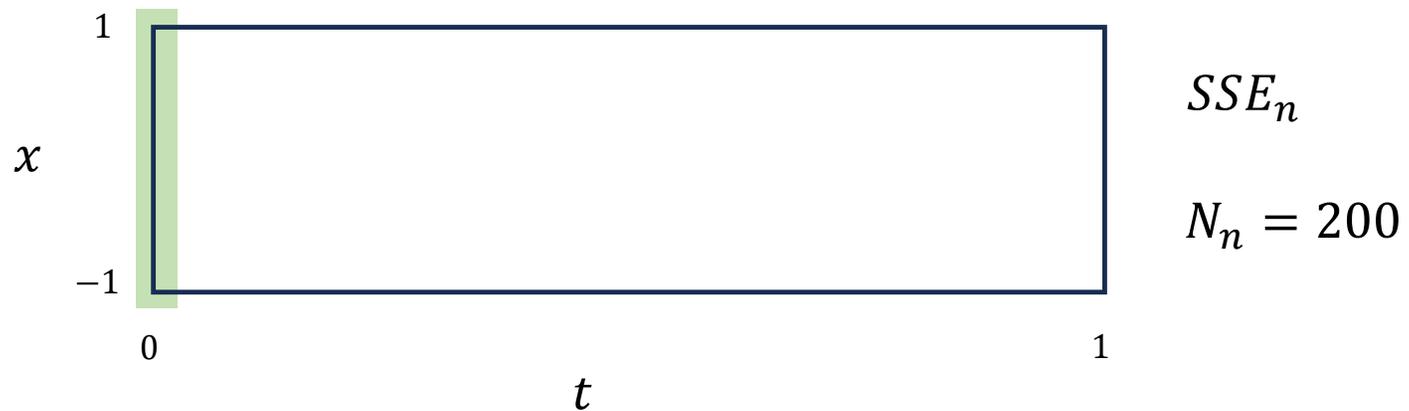
Solución a EDP en tiempo discreto

Configuración del problema:



Solución a EDP en tiempo discreto

Configuración del problema:

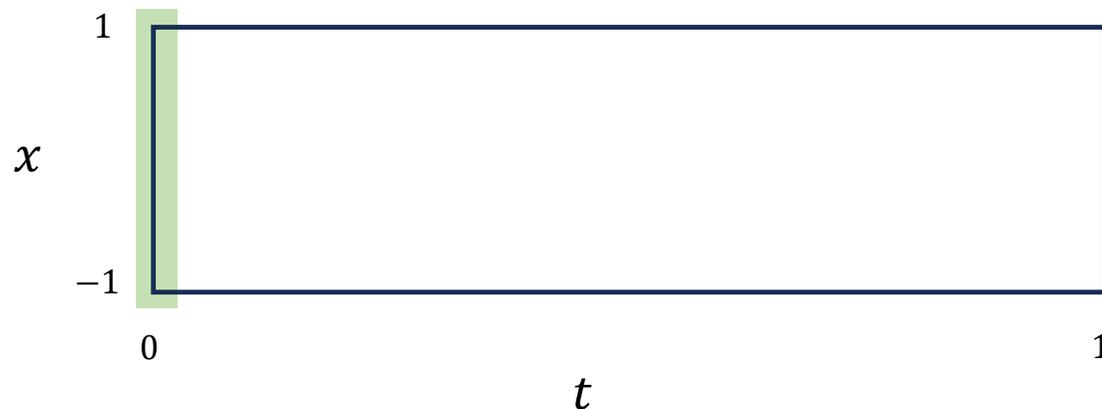


Solución a EDP en tiempo discreto

Configuración del problema:

$$SSE_n = \sum_{j=1}^{q+1} \sum_{i=1}^{N_n} |u_j^n(x^{n,i}) - u^{n,i}|^2$$

$$u_i^n = u^{n+c_i} - \Delta t \sum_{j=1}^q a_{ij} O(u^{t+c_j}), \quad i = 1, \dots, q$$



SSE_n

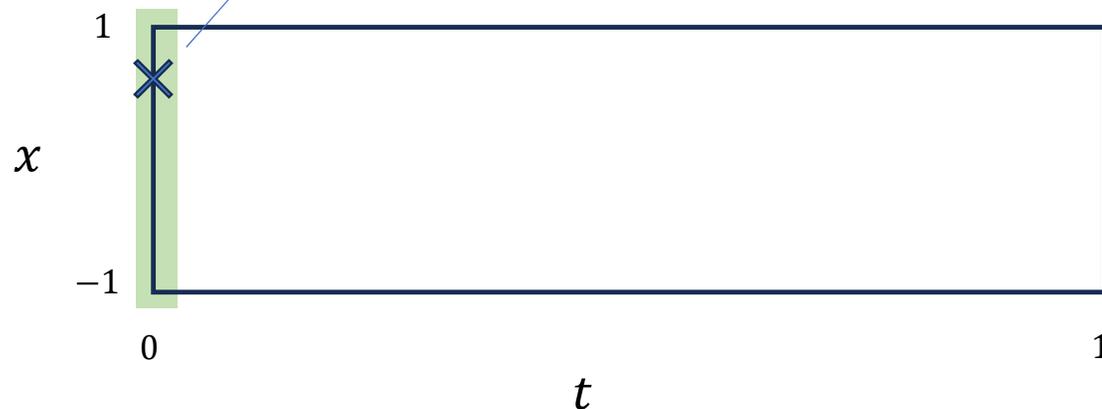
$N_n = 200$

Solución a EDP en tiempo discreto

Configuración del problema:

$$SSE_n = \sum_{j=1}^{q+1} \sum_{i=1}^{N_n} |u_j^n(x^{n,i}) - u^{n,i}|^2$$

$$u_i^n = u^{n+c_i} - \Delta t \sum_{j=1}^q a_{ij} O(u^{t+c_j}), \quad i = 1, \dots, q$$



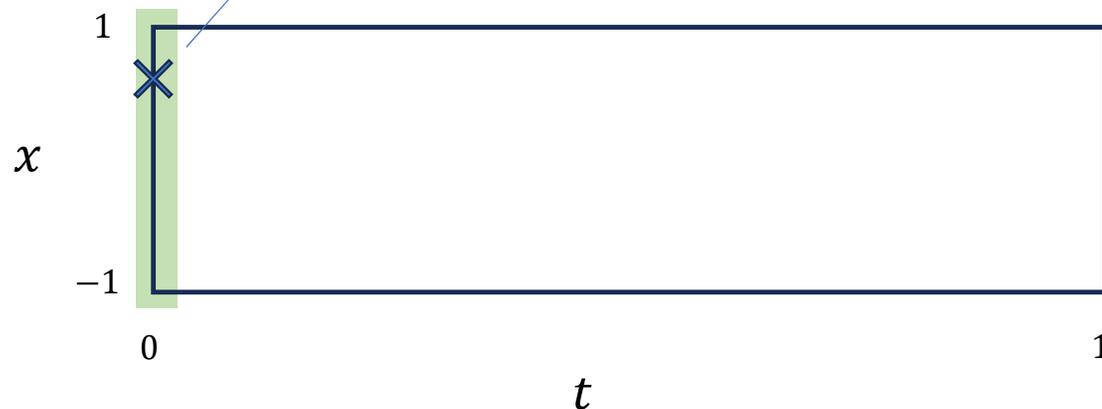
SSE_n

$N_n = 200$

Solución a EDP en tiempo discreto

Configuración del problema:

$$SSE_n = \sum_{j=1}^{q+1} \sum_{i=1}^{N_n} |u_j^n(x^{n,i}) - u^{n,i}|^2$$
$$u_i^n = u^{n+c_i} - \Delta t \sum_{j=1}^q a_{ij} O(u^{t+c_j}), \quad i = 1, \dots, q$$



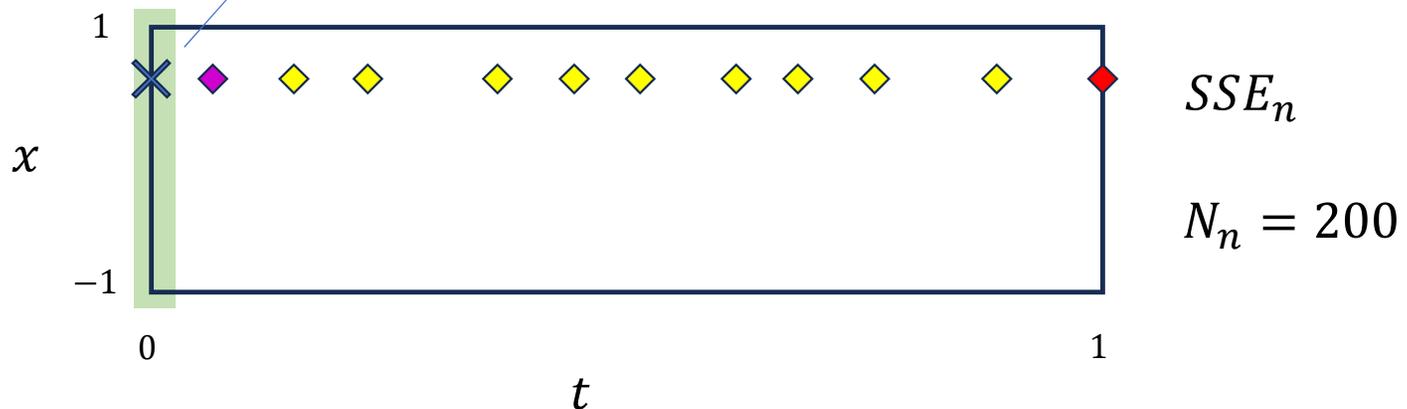
SSE_n

$N_n = 200$

Solución a EDP en tiempo discreto

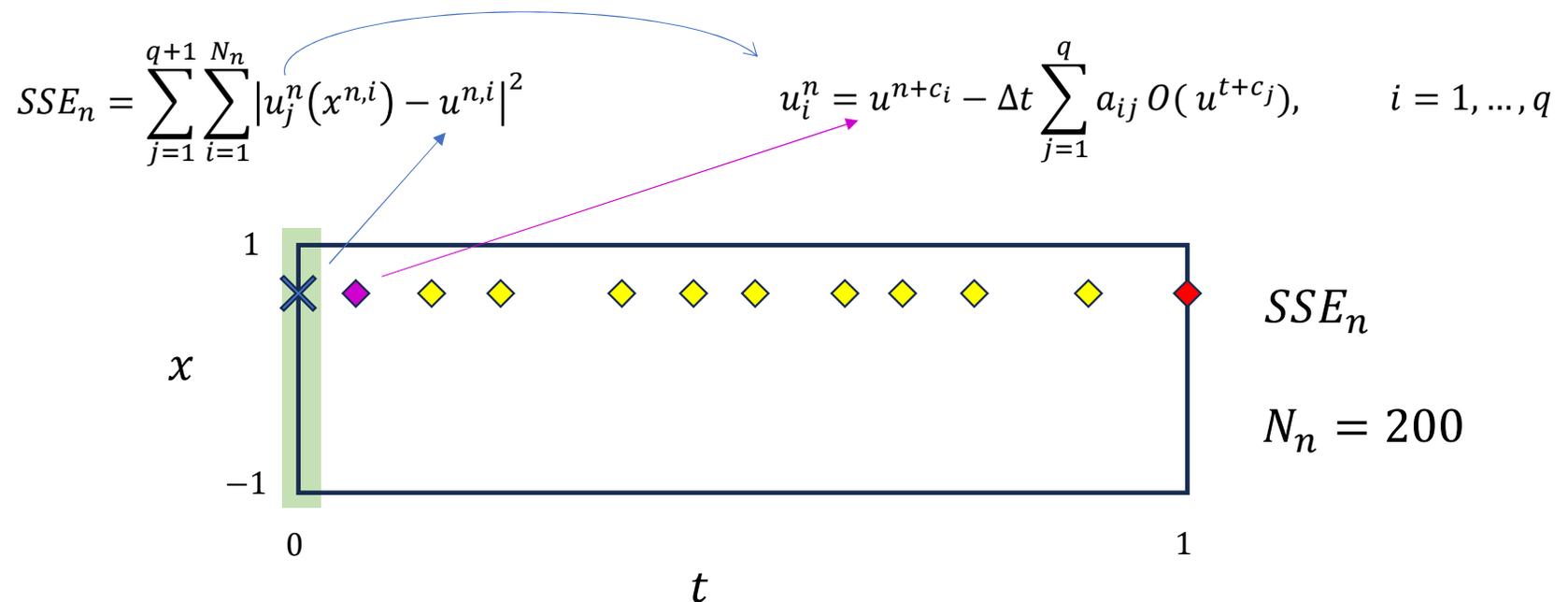
Configuración del problema:

$$SSE_n = \sum_{j=1}^{q+1} \sum_{i=1}^{N_n} |u_j^n(x^{n,i}) - u^{n,i}|^2$$
$$u_i^n = u^{n+c_i} - \Delta t \sum_{j=1}^q a_{ij} O(u^{t+c_j}), \quad i = 1, \dots, q$$



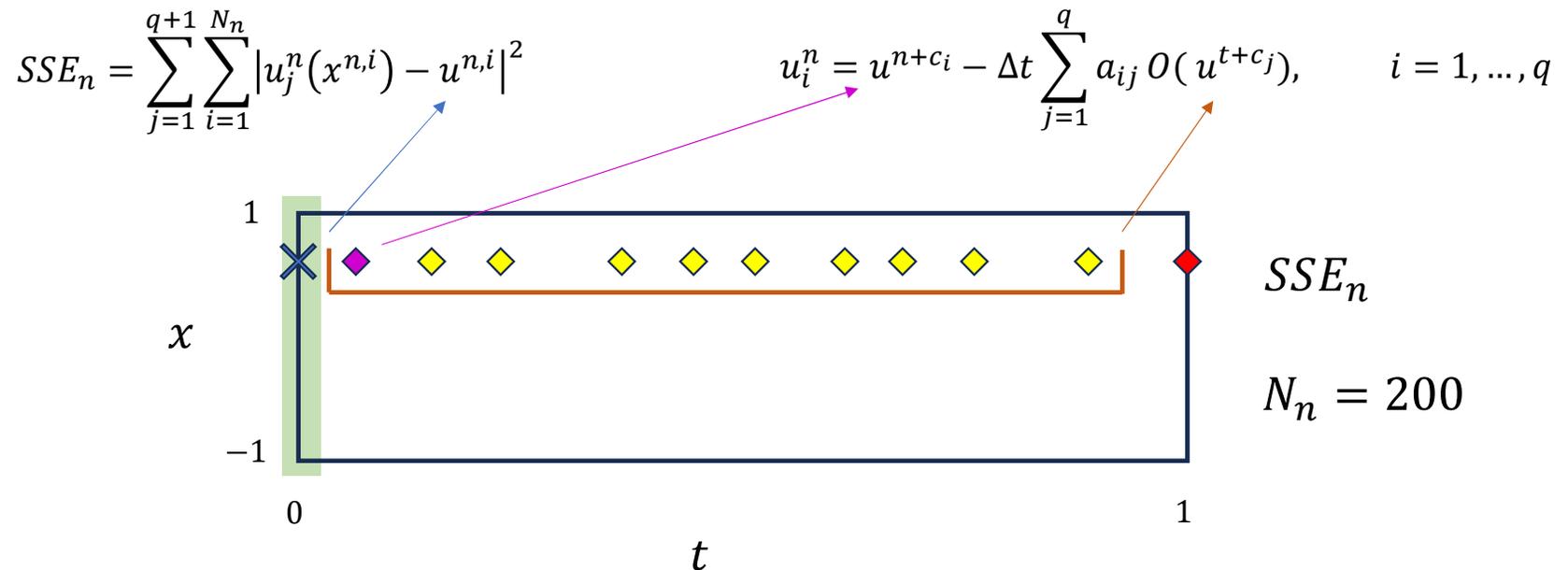
Solución a EDP en tiempo discreto

Configuración del problema:

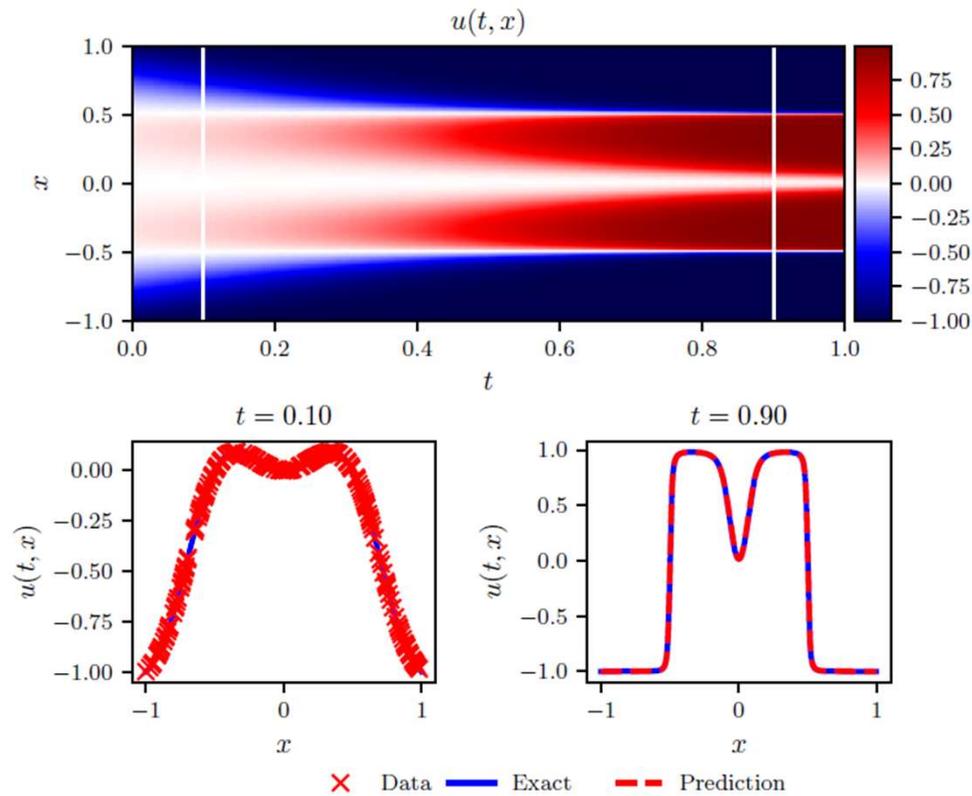


Solución a EDP en tiempo discreto

Configuración del problema:



Solución a EDP en tiempo discreto



Descubrimiento de parámetros de EDP en tiempo continuo

Ecuación diferencial en derivadas parciales con parámetros:

$$u_t + O(u, \lambda) = 0, \quad x \in \Omega, \quad t \in [0, T]$$

Descubrimiento de parámetros de EDP en tiempo continuo

Ecuación de Burgers con las condiciones de borde de Dirichlet

$$\begin{aligned}u_t + \lambda_1 u u_x + \lambda_2 u_{xx} &= 0, & x \in [-1,1], & t \in [0,1] \\u(0, x) &= -\sin(\pi x) \\u(t, -1) &= u(t, 1) = 0\end{aligned}$$

Descubrimiento de parámetros de EDP en tiempo continuo

Ecuación de Burgers con las condiciones de borde de Dirichlet

$$\begin{aligned}u_t + \lambda_1 u u_x + \lambda_2 u_{xx} &= 0, & x \in [-1,1], & t \in [0,1] \\u(0, x) &= -\sin(\pi x) \\u(t, -1) &= u(t, 1) = 0\end{aligned}$$

$$f := u_t + \lambda_1 u u_x + \lambda_2 u_{xx}$$

Descubrimiento de parámetros de EDP en tiempo continuo

Función de pérdida

$$MSE = MSE_u + MSE_f,$$

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

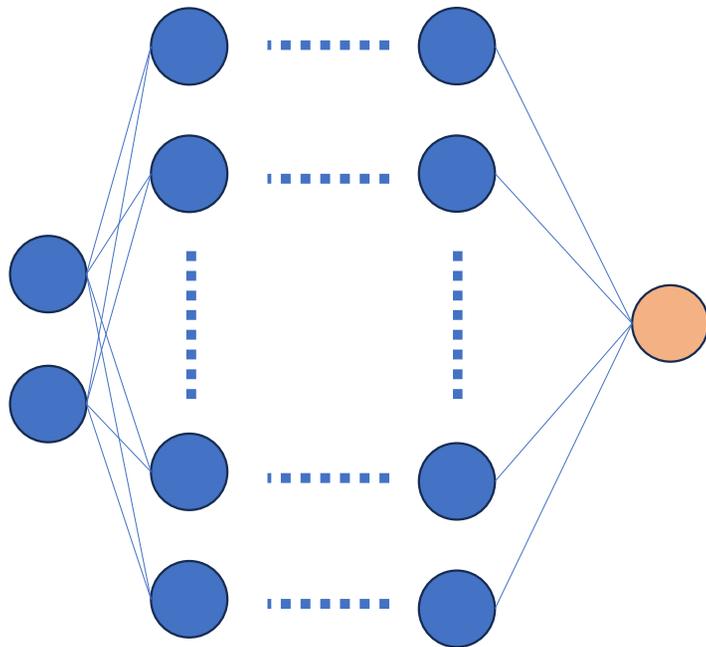
$$MSE_f = \frac{1}{N_f} \sum_{i=1}^{N_f} |f(t_f^i, x_f^i)|^2.$$

$$\begin{aligned} u(0, x) &= -\sin(\pi x), \\ u(t, -1) &= u(t, 1) = 0. \end{aligned}$$

$$f := u_t + \lambda_1 u u_x - \lambda_2 u_{xx}$$

Descubrimiento de parámetros de EDP en tiempo continuo

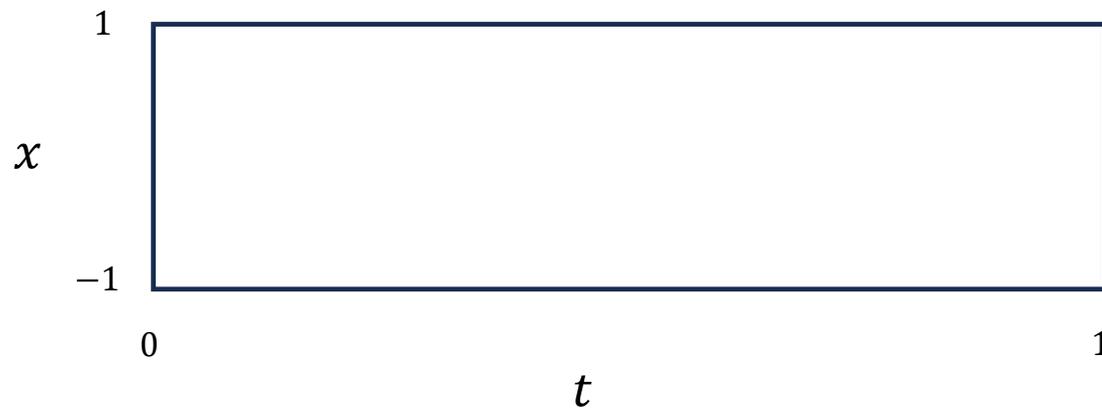
Configuración de la red neuronal:



- 2 entradas t, x
- 1 salida $u(t,x)$
- 8 capas ocultas
- 20 neuronas cada capa oculta
- tangente hiperbólica
- L-BFGS

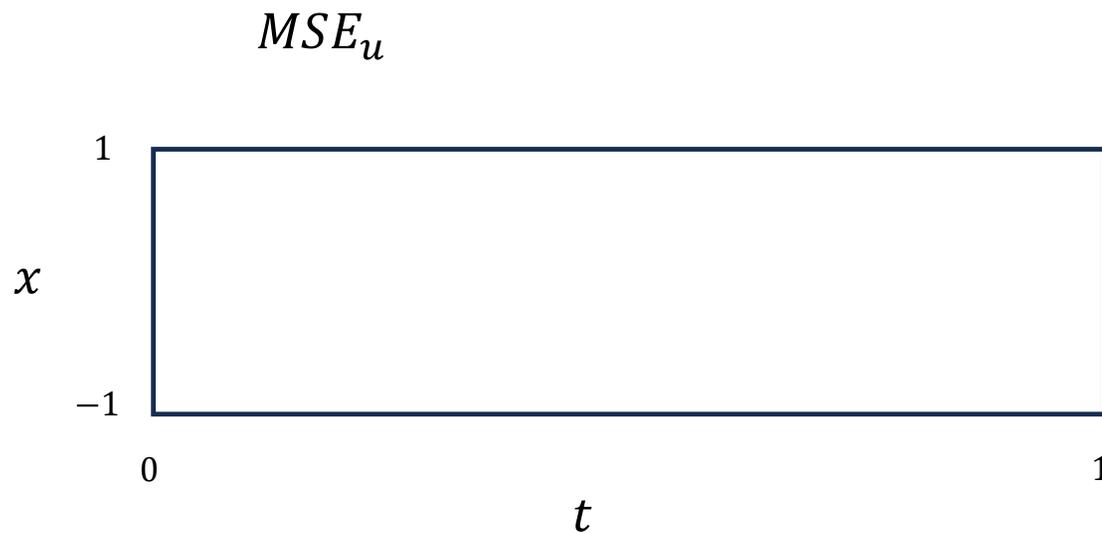
Descubrimiento de parámetros de EDP en tiempo continuo

Función de pérdida:



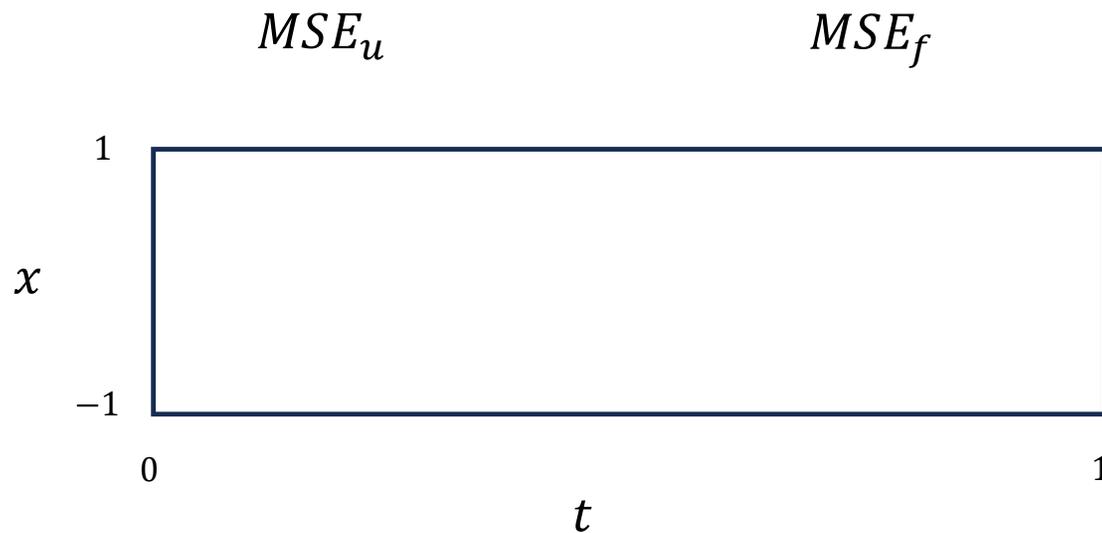
Descubrimiento de parámetros de EDP en tiempo continuo

Función de pérdida:



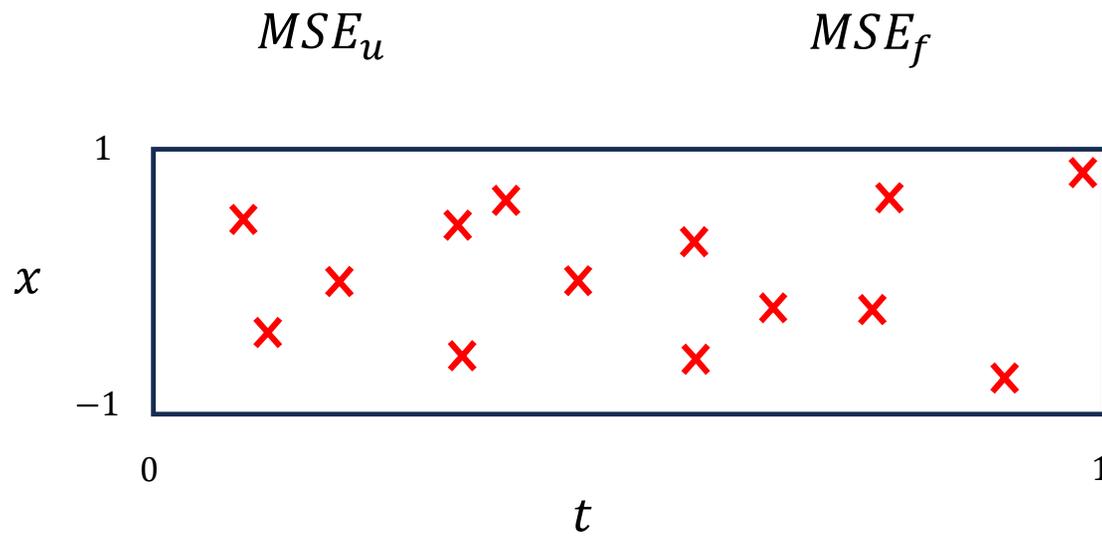
Descubrimiento de parámetros de EDP en tiempo continuo

Función de pérdida:



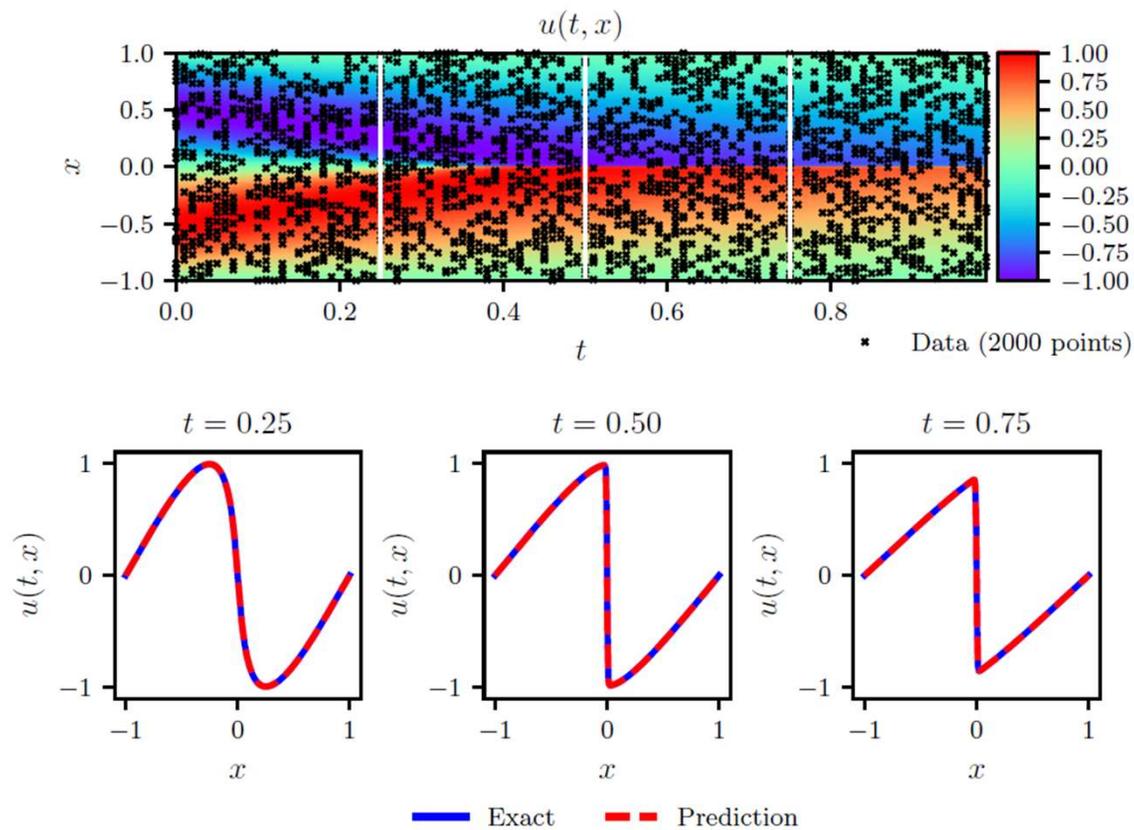
Descubrimiento de parámetros de EDP en tiempo continuo

Función de pérdida:

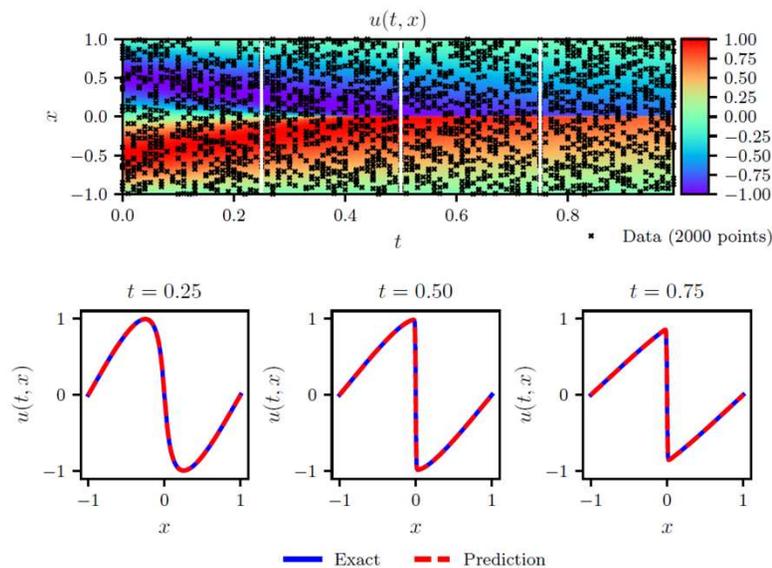


2000 puntos al azar

Descubrimiento de parámetros de EDP en tiempo continuo



Descubrimiento de parámetros de EDP en tiempo continuo



$$\lambda_1 = 1.0$$

$$\lambda_2 = 0.01/\pi$$

Correct PDE	$u_t + uu_x - 0.0031831u_{xx} = 0$
Identified PDE (clean data)	$u_t + 0.99915uu_x - 0.0031794u_{xx} = 0$
Identified PDE (1% noise)	$u_t + 1.00042uu_x - 0.0032098u_{xx} = 0$

Gracias



FACULTAD DE
INGENIERÍA

175
AÑOS



UNIVERSIDAD
DE LA REPÚBLICA
URUGUAY