GPINN: Physics-Informed Neural Network with Graph Embedding

Autores del Paper: Yuyang Miao, Haolin Li, Danilo Mandic.
Presentador: Camilo Borba

Noviembre 2024

Agenda

Introducción al problema

PINNs

PINNs - Grafos Embebidos

Teoría de Grafos

Vector de Fiedler

Experimento 1: Modelo de propagación de calor

Experimento 2: Modelo de grieta unilateral

Introducción al problema

Contexto y motivación

- Las PINNs han ganado interés debido a su capacidad para resolver PDE
- Pero operan en espacios Euclidianos y carecen de contexto espacial
- Distancia Euclideana puede no coincidir con la distancia física real
- Esto lleva a que el modelo tenga errores a sin significado físico

Graph Physics-Informed Neural Network

- Se propone GPINN:
  - Utilizar vector de Fiedler para transformar espacio de entrada (euclideano) a uno de salida (euclieadeano y topológico basado en grafos).
- Dos casos de estudio:
  - Propagación de calor
  - Elasticidad Lineal

PINNs

Breve repaso de PINNs (I)

- Tenemos nuestra ecuación diferencial:

$$u(x,t) + N(u(x,t)) = 0, \quad x \in \Omega, \quad t \in [0,T] \tag{1}$$

  Donde:
  - $u(x,t)$ representa solución dependiente de las coordenadas espaciales x y temporales t.
- PINN resuelve la ecuación 1 mediante un mapeo de red neuronal que relaciona las entradas $x \in \Omega \subset \mathbb{R}^d$ y $t \in [0,T]$ con la salida $u(x,t) \in \mathbb{R}$ en la forma:

$$u_{NN}(x,t) : \Omega \to \mathbb{R} \tag{2}$$

Breve repaso de PINNs (II)

- Por lo tanto tenemos que resolver un problema de optimización donde la pérdida de nuestra red neuronal es:

$$L = \omega_1 L_{\text{PDE}} + \omega_2 L_{\text{Data}} + \omega_3 L_{\text{IC}} + \omega_4 L_{\text{BC}} \tag{3}$$

- Donde:
  - L_{PDE} representa el residuo de la PDE, es decir $L_{\text{PDE}} = u_{NN}(x, t) + N(u_{NN}(x, t))$
  - L_{Data} es la pérdida en los puntos de muestreo, es decir, la pérdida de la regresión
  - L_{IC} es la pérdida de la condición inicial
  - L_{BC} es la pérdida en la condición de borde
  - ωs son factores de escalado.

Limitaciones

- La solución es continua y diferenciable en todo el dominio de $\mathbb{R}^d$ y en el intervalo de tiempo $[0, T]$.
- Esto limita su uso en campos discontinuos o en campos con segmentos no diferenciables
- Tal deficiencia introduce la desigualdad de distancias
  - La distancia Euclidiana entre dos puntos en el espacio de entrada no siempre corresponde a su distancia física en Ω.

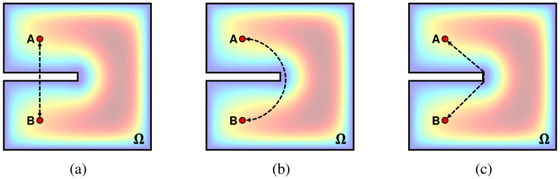

Fig. 1: Distances of heat propagation (a) in the input space, (b) through a possible propagation path in physics and (c) in the shortest propagation path in physics.

PINNs - Grafos Embebidos

GPINNs (I)

- Se propone un método que incorpora el embedding de grafo en las PINNs para alinear el espacio de entrada de manera más cercana con los espacios físicos.
- Como se demuestra en Chung et al.[1], un espacio topológico definido por la teoría de grafos puede capturar las características contextuales espaciales con mayor precisión en comparación con un espacio Euclidiano. En consecuencia, la solución de la Ecuación 1 se modifica de la siguiente manera:

[1] M. K. Chung, S. Seo, N. Adluru, and H. K. Vorperian, "Hot spots conjecture and its application to modeling tubular structures," in *Machine Learning in Medical Imaging: Second International Workshop, MLMI 2011, Held in Conjunction with MICCAI 2011, Toronto, Canada, September 18, 2011. Proceedings 2*, Springer, 2011, pp. 225–232.

GPINNs (II)

- La solución de la ecuación 1 se modifica de la siguiente manera:

$$u_{NN}(x, t, z) : \Omega \to \mathbb{R} \tag{4}$$

- donde la dimensión adicional introducida se denota por $z \in \mathbb{R}$.

Repasemos la idea

- GPINN transforma el espacio de entrada de un espacio Euclidiano a un espacio conjunto Euclidiano y topológico (basado en grafos)
- Esto asegura una alineación más estrecha entre el dominio del problema y el espacio físico del sistema en consideración.
- La dimensión adicional se define de manera única por la geometría específica bajo consideración y es independiente de las condiciones iniciales o de frontera.

Teoría de Grafos

Matriz de Adyacencia

- Un grafo, denotado por $G = (V, E)$, está formado por un conjunto de vértices V interconectados por un conjunto de aristas E.
- La matriz de adyacencia A representa los detalles de conectividad de un grafo
  - $A_{i,j} \neq 0$ indica una arista entre los vértices i y j.
- Los grafos se pueden clasificar en dos tipos principales según si sus aristas tienen direccionalidad:
  - grafos no dirigidos (la matriz de adyacencia es simétrica, $A_{i,j} = A_{j,i}$) grafos dirigidos.

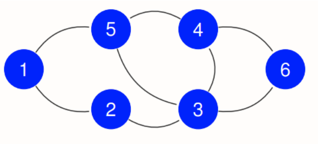

Figure: Ejemplo de Grafo no dirigido

Matriz Laplaciana

Importante

- Este estudio considera exclusivamente grafos no dirigidos debido a que las interacciones físicas son mutuas.

- El grado de un nodo (número de nodos a los que se conecta), se encuentra en la matriz de grado D
  - $D_{i,i}$ corresponde al grado del vértice i
  - los elementos fuera de la diagonal son iguales a cero.
- La matriz Laplaciana del grafo se define posteriormente como $L = D - A$.

Geometrías Complejas Definidas en el Espacio Topológico

- Podemos discretizar nuestro espacio de interés y generar una malla (y tratarla como un grafo)
- **Podemos calcular $z = f(x)$ en base a nuestro grafo y agregarlo a nuestra PINN.**

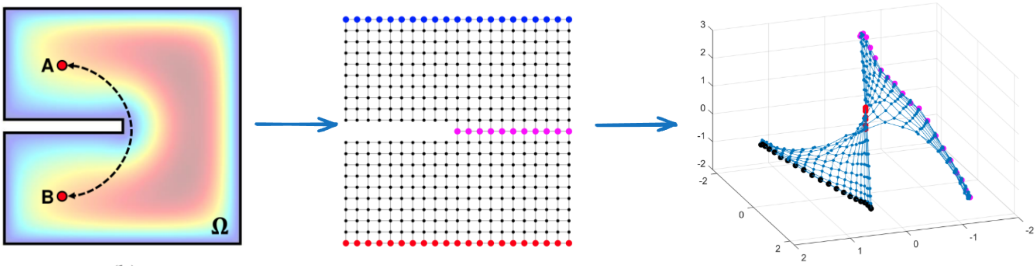

Figure: Espacio discretizado y transformado

Vector de Fiedler

Teoría Espectral de Grafos - Espectro y Conectividad

- El **segundo valor propio más chico** λ_2 es distinto de 0 ($\lambda_2 \neq 0$), si y solo si G es conexo
    - si 0 tiene multiplicidad algebraica 1, entonces G es conexo.
    - λ_2 se denomina **"spectral gap"**
    - λ_2 **indica que tan bien esta conectado el grafo**
- El vector propio asociado a λ_2 se llama **vector de Fiedler** y se usa como un primer método de clusterización

Vector de Fiedler y ecuación del calor

- Consideremos una ecuación de transferencia de calor discreta en un grafo, dada por
$$\frac{d\mathbf{f}}{dt} = \mathbf{L}\mathbf{f}, \quad \mathbf{f}(0) = \mathbf{f}_0 \tag{5}$$
- donde $\mathbf{L}$ denota la Laplaciana del grafo. La solución para esta ecuación es:
$$\mathbf{f}(t) = \sum_{i=1}^{n} (\mathbf{f}_0, \mathbf{u}_i) e^{-\lambda_i t} \mathbf{u}_i \tag{6}$$
- donde e_i denota la base ortonormal de vectores propios de $\mathbf{L}$.
- Dado que $\lambda_1 = 0$ y $u_1 = [1, 1, \cdots, 1, 1]/\sqrt{N}$, la solución la podemos escribir como:
$$f(t) \approx (f_0, u_1) u_1 + (f_0, u_2) e^{-\lambda_2 t} u_2 + R \tag{7}$$
- donde el primer término es la señal promedio en el estado final y el resto R tiende a cero más rápido que el término $(f_0, u_2)e^{-\lambda_2 t} u_2$.

Experimento 1: Modelo de propagación de calor

Definición del problema

- El objetivo es encontrar el campo de temperatura en estado estacionario en una ”casa” bidimensional con el dominio y las condiciones de contorno mostradas a continuación.

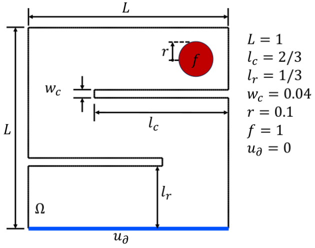

Figure: Esquema del problema de propagación del calor. El dominio de la 'casa' 2D se define como Ω; hay una fuente de calor f; la condición de contorno de Dirichlet se asigna en la frontera en la parte inferior de Ω que representa una 'ventana' cuya temperatura u_∂ es la misma que la del 'exterior'.

Arquitectura del modelo (I)

- El modelo **PINN** consistió en una red neuronal feedforward
  - dimensión de entrada de 2 para las coordenadas euclidianas $[x, y]$
  - dimensión de salida de 1 para el campo escalar de temperatura
  - Las dimensiones de las capas ocultas fueron $[64, 64, 128, 128, 64]$ con función de activación *tanh*
- El modelo **GPINN** compartió la misma arquitectura excepto por la dimensión de entrada $[x, y, z]$, donde z representa la dimensión del vector de Fiedler.

Arquitectura del modelo (II)

- Se tomó como referencia los resultados del método de elementos finitos (FEM) derivados de una malla de (256×256)
- Se seleccionaron aleatoriamente 2000, 1000 y 100 puntos de la malla para L_{PDE}, L_{data} y L_{BC} respectivamente.
- Se muestrearon 300 puntos como conjunto de prueba.
- Se usó un optimizador Adam con una tasa de aprendizaje de 0.005
- El modelo se entrenó durante $50,000$ épocas.
- El error relativo en la predicción de la temperatura se utilizó como métrica de evaluación.

Funciones de pérdida

$$L = \omega_1 L_{PDE} + \omega_2 L_{Data} + \omega_3 L_{BC}, \tag{8}$$

$$L_{PDE} = \frac{1}{N_p} \sum_{i=1}^{N_p} \left| \Delta u(x_p) - f(x_p) \right|^2 , \tag{9}$$

$$L_{data} = \frac{1}{N_D} \sum_{j=1}^{N_D} \left| u(x_D) - u^*(x_D) \right|^2 \tag{10}$$

$$\begin{aligned} L_{BC} &= \frac{1}{N_{dbc}} \sum_{i=1}^{N_{dbc}} \left| \nabla u(x_{dbc}) - v_\partial(x_{dbc}) \right|^2 \\ &+ \frac{1}{N_{nbc}} \sum_{i=1}^{N_{nbc}} \left| \nabla u(x_{nbc}) \cdot n - v_\partial(x_{nbc}) \right|^2 \end{aligned} \tag{11}$$

Resultados (I)

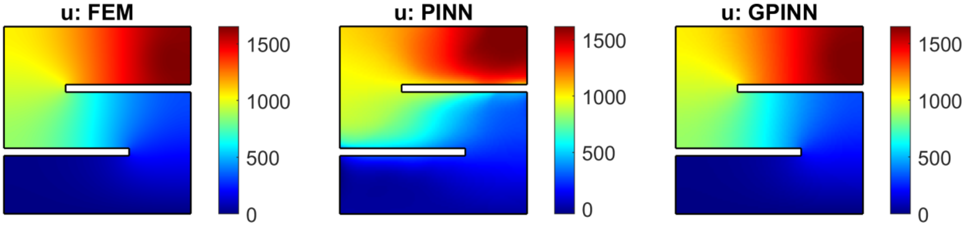

Fig. 7: Reference (FEM) and sample (NN) solutions of the steady temperature field.

Figure: PINN vs GPINN.

Resultados (II)

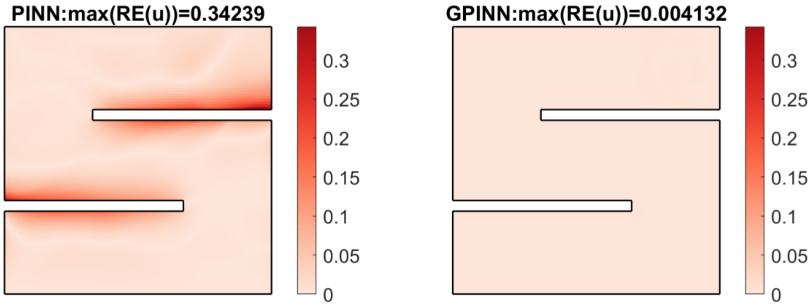

Fig. 8: Relative errors (RE) of the NN solutions to the reference FEM solution: $\mathrm{RE}(u) = |u - u^*| \,/\, \max\left(|u^*|\right)$. The subfigure on the left side is the relative error of PINN while the right one represents the GPINN.

Figure: PINN vs GPINN.

Experimento 2: Modelo de grieta unilateral

Definición del problema

- Se centró en una simulación elástica lineal de un modelo de grieta de un solo lado.

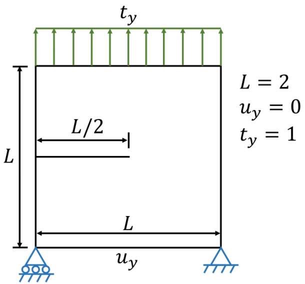

Figure: Esquema del ensayo de tracción de fisura unilateral.

Arquitectura del modelo (I)

- Las arquitecturas de los modelos PINN y GPINN eran las mismas como los modelos de la tarea de propagación del calor, excepto por la dimensión de salida, que ahora es 2.
  - es un campo vectorial con direcciones x e y.
- Se tomó como referencia los resultados del método de elementos finitos (FEM) derivados de una malla de (256×256).

Arquitectura del modelo (II)

- Se seleccionaron aleatoriamente 1000, 1000 y 200 puntos de la malla para L_{PDE}, L_{data} y L_{BC} respectivamente.
- Se muestrearon 300 puntos como conjunto de prueba.
- Se usó un optimizador Adam con una tasa de aprendizaje de 0.0003
- El modelo se entrenó durante $50,000$ épocas.
- El error relativo en la predicción del desplazamiento se utilizó como métrica de evaluación.

Resultados (I)

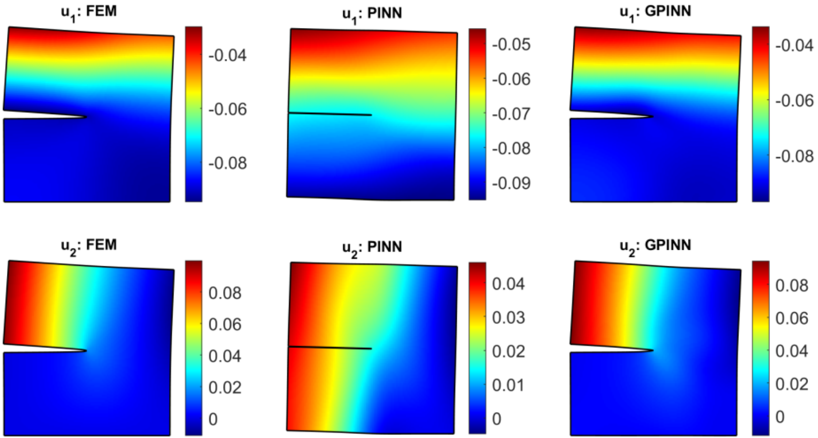

Figure: PINN vs GPINN.

Resultados (II)

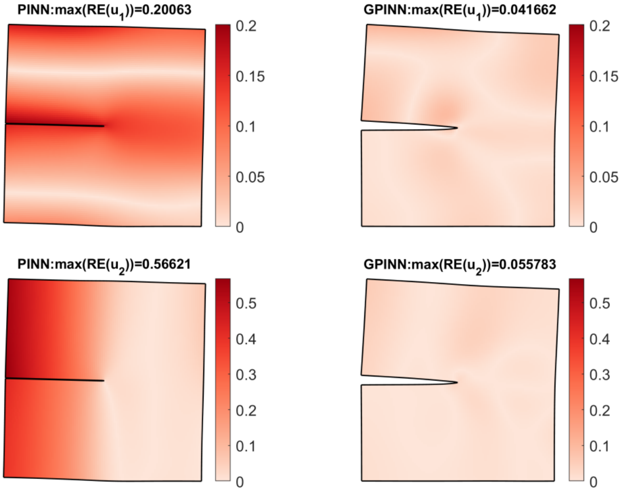

Figure: PINN vs GPINN.

¿Preguntas?