

# 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



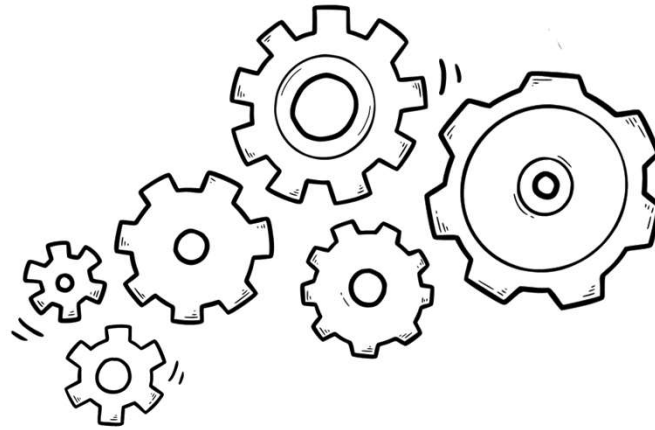
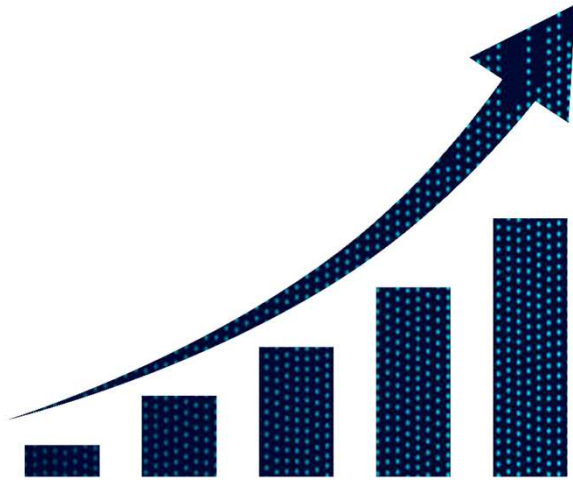
UNIVERSIDAD  
DE LA REPÚBLICA  
URUGUAY

# 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.

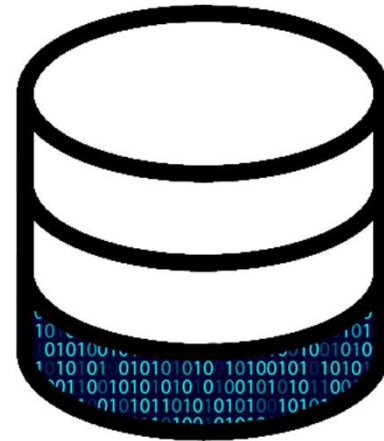


# Introducción

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



Otros campos



Física e ingeniería

# Introducción

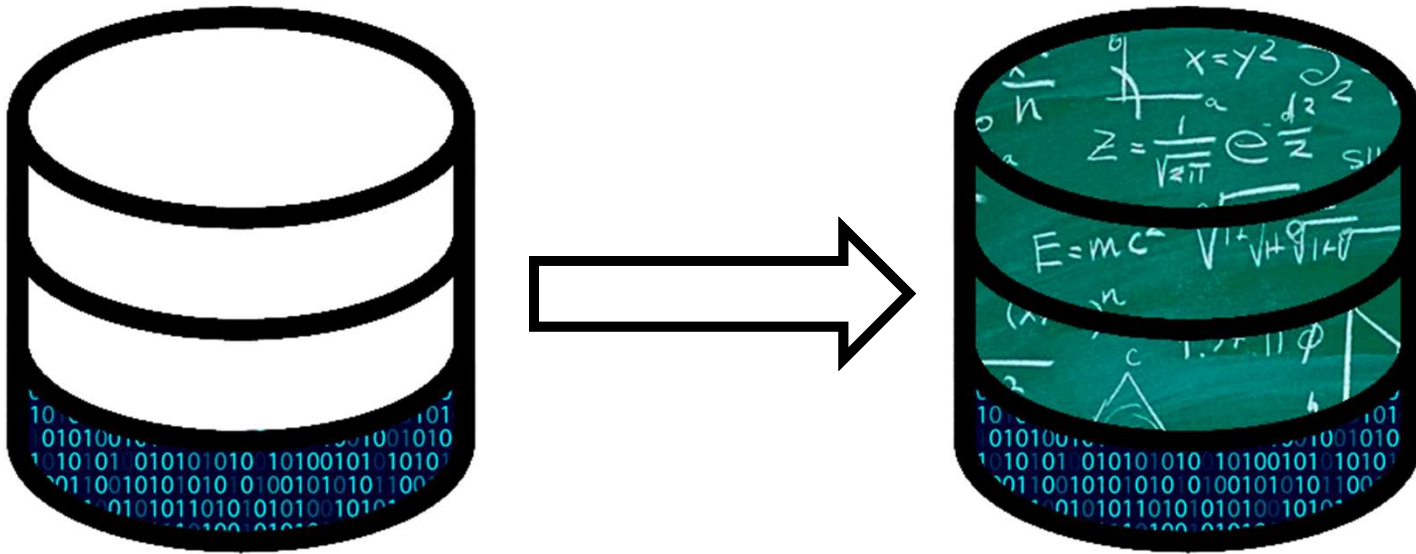
- Las soluciones estaban basadas en pocos datos y no se aprovechaba todo el conocimiento teórico adquirido hasta el momento.
- Al no utilizar esta información las soluciones pueden converger en algo que podría violar las leyes físicas.

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

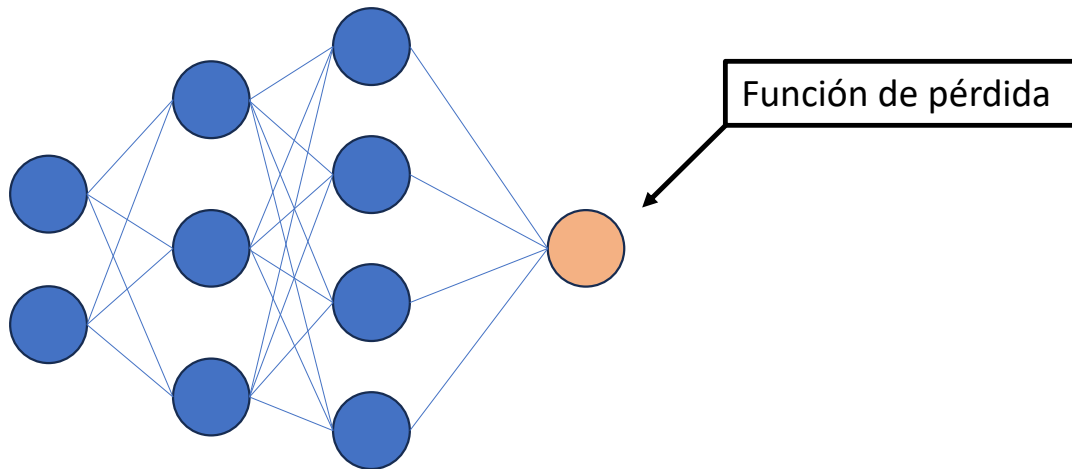
# Solución a EDP en tiempo continuo

Ecuación diferencial en derivadas parciales:

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

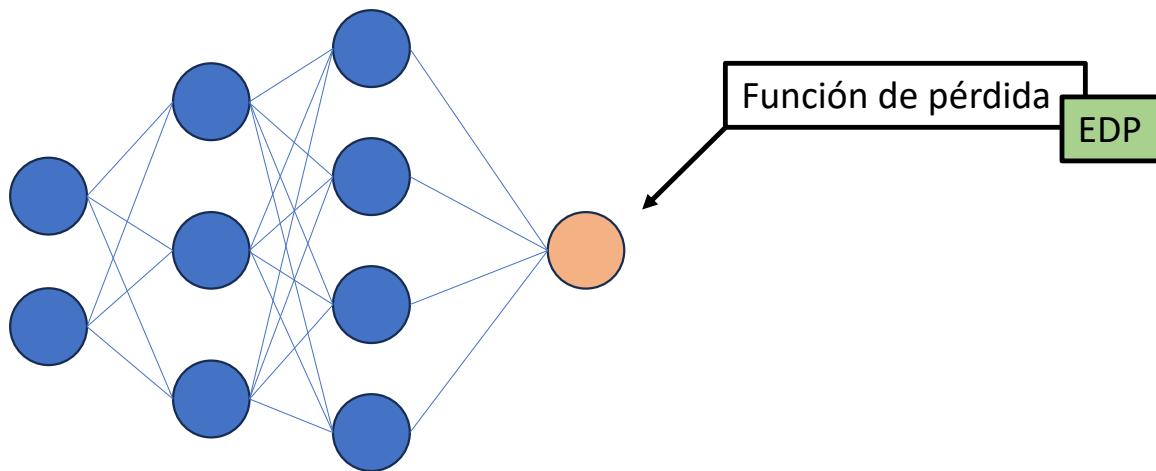
# Solución a EDP en tiempo continuo

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

$$MSE = MSE_u + MSE_f,$$

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

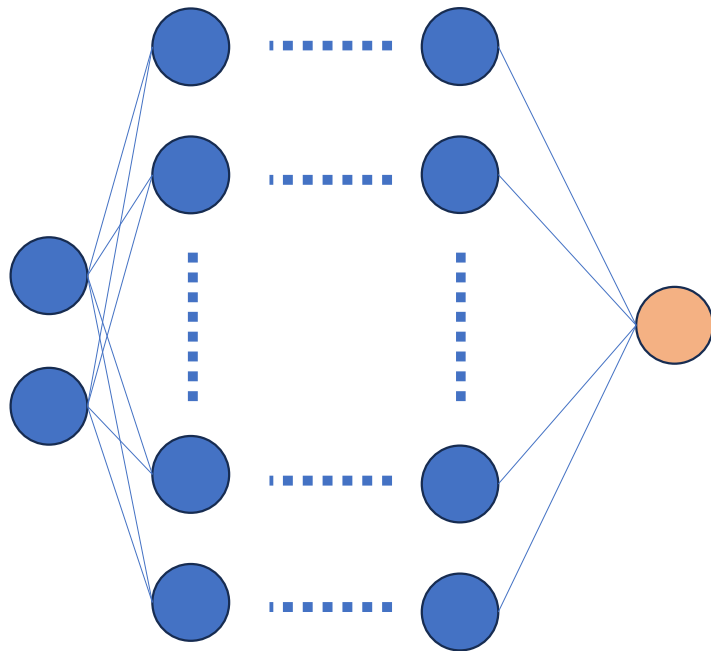
$$MSE_f = \frac{1}{N_f} \sum_{i=1}^{N_f} |f(t_f^i, x_f^i)|^2.$$

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

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

# Solución a EDP en tiempo continuo

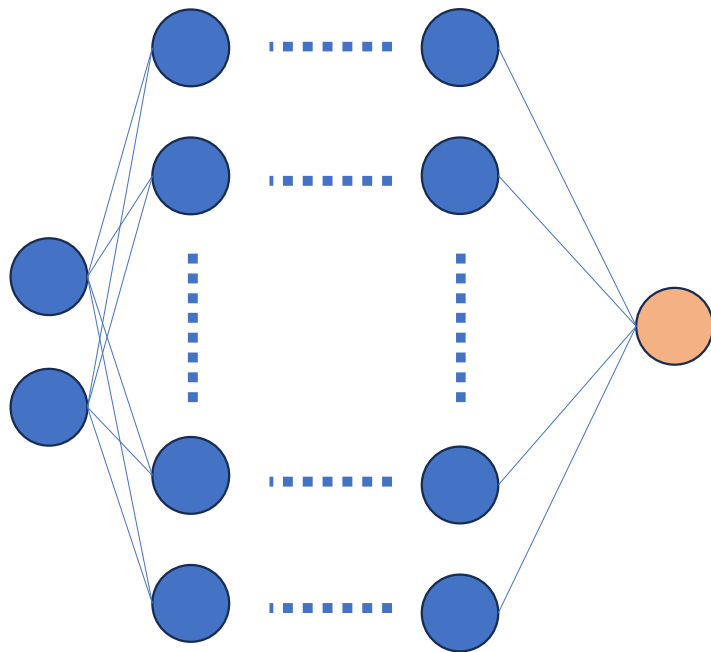
## Configuración de la red neuronal:



- 2 entradas  $t, x$

# Solución a EDP en tiempo continuo

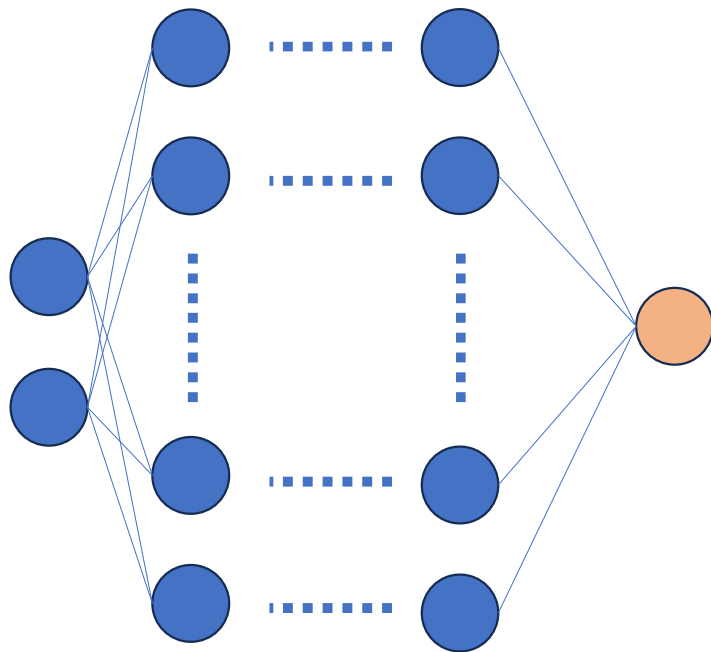
## Configuración de la red neuronal:



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

# Solución a EDP en tiempo continuo

## Configuración de la red neuronal:

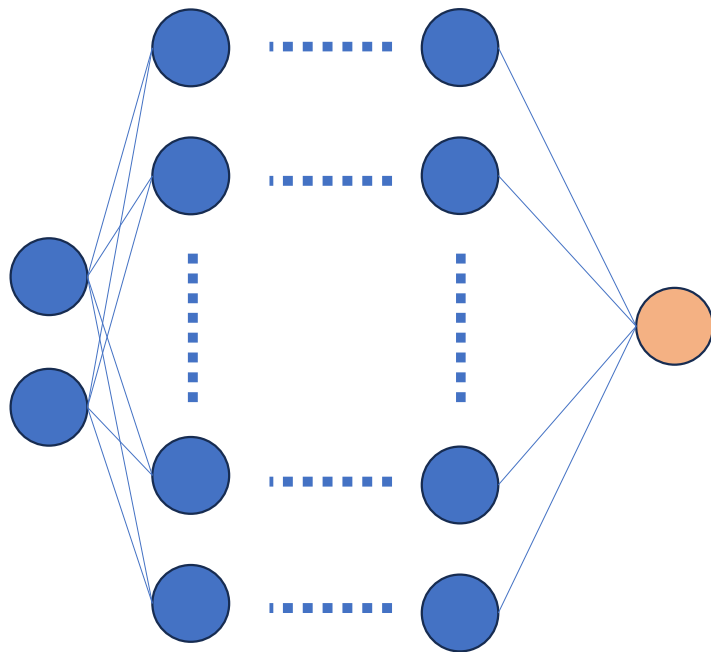


- 2 entradas  $t, x$
- 1 salida  $u(t,x)$
- 8 capas ocultas



# Solución a EDP en tiempo continuo

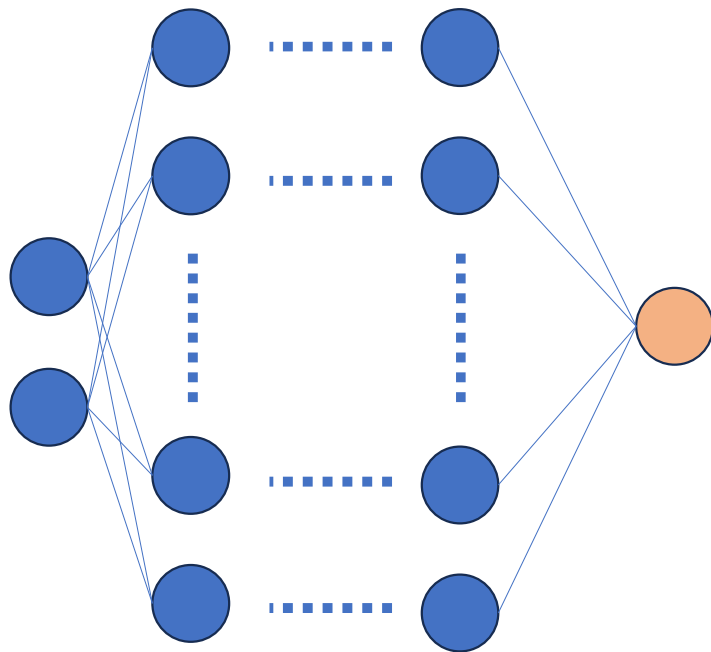
## Configuración de la red neuronal:



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

# Solución a EDP en tiempo continuo

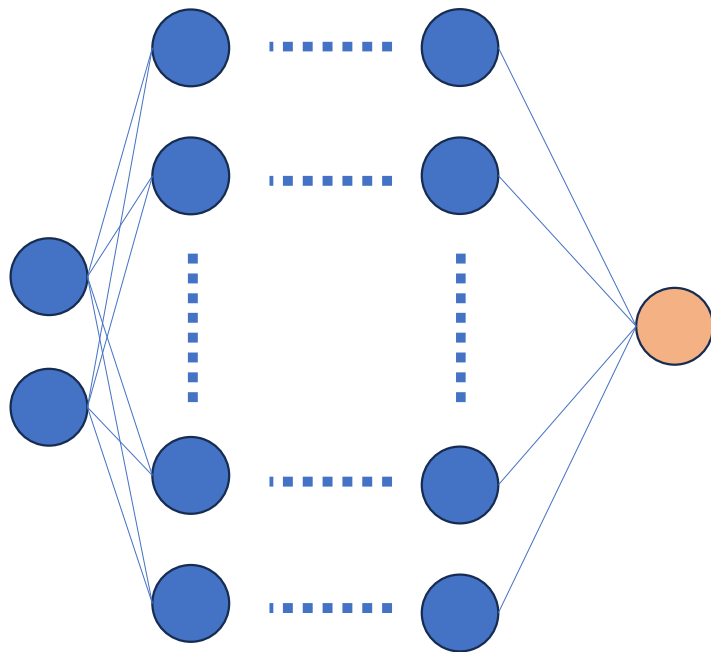
## Configuración de la red neuronal:



- 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

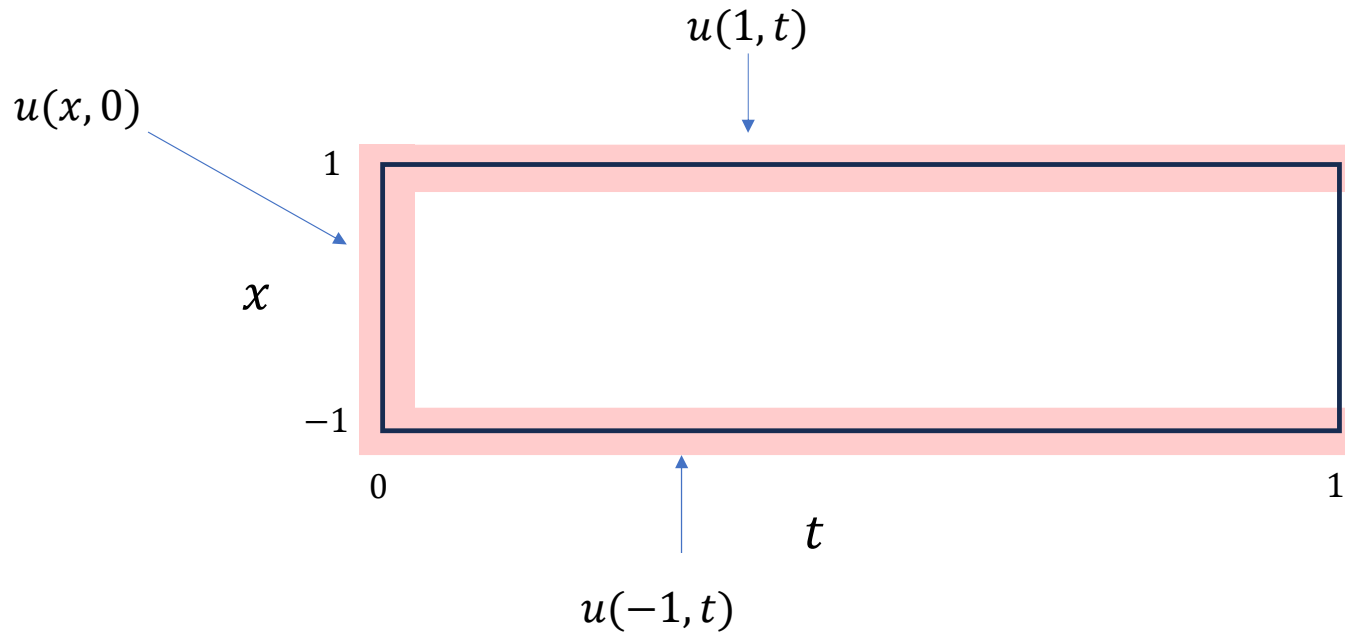
## Configuración de la red neuronal:



- 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:**

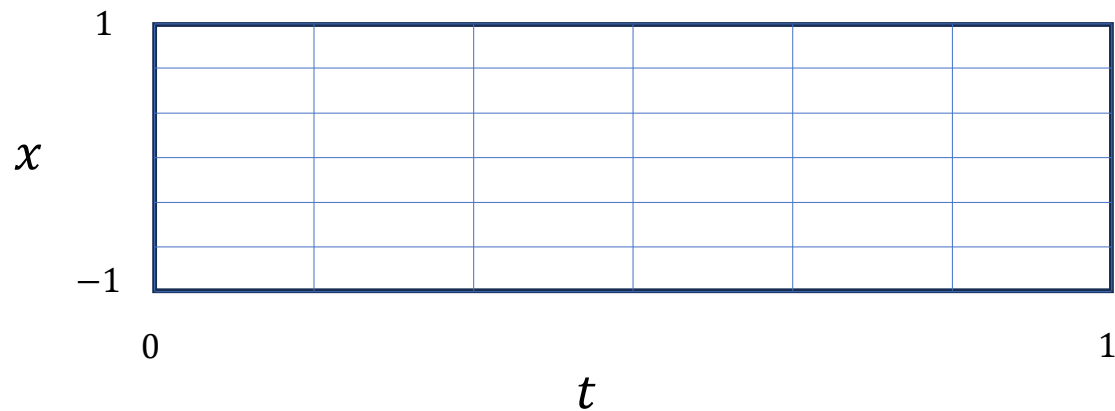


100 puntos al azar

# Solución a EDP en tiempo continuo

**Puntos de colocación:**

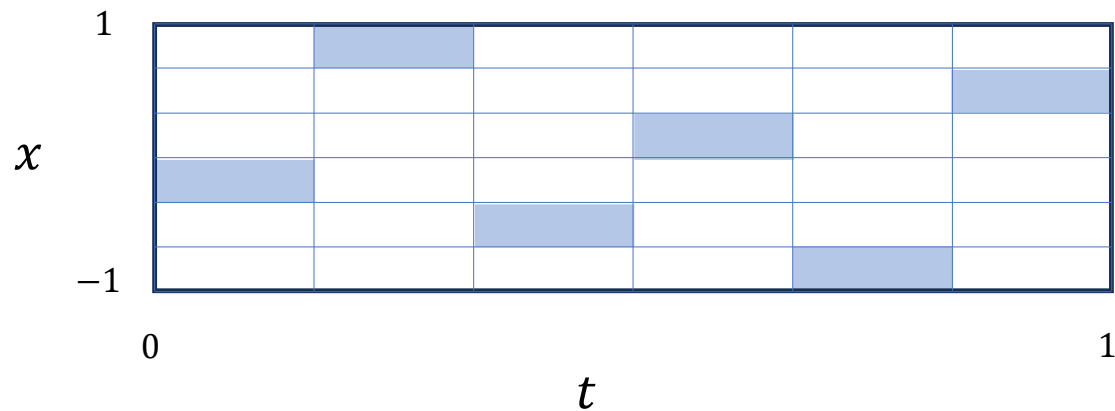
Latin hypercube sampling



# Solución a EDP en tiempo continuo

## Configuración de la red neuronal:

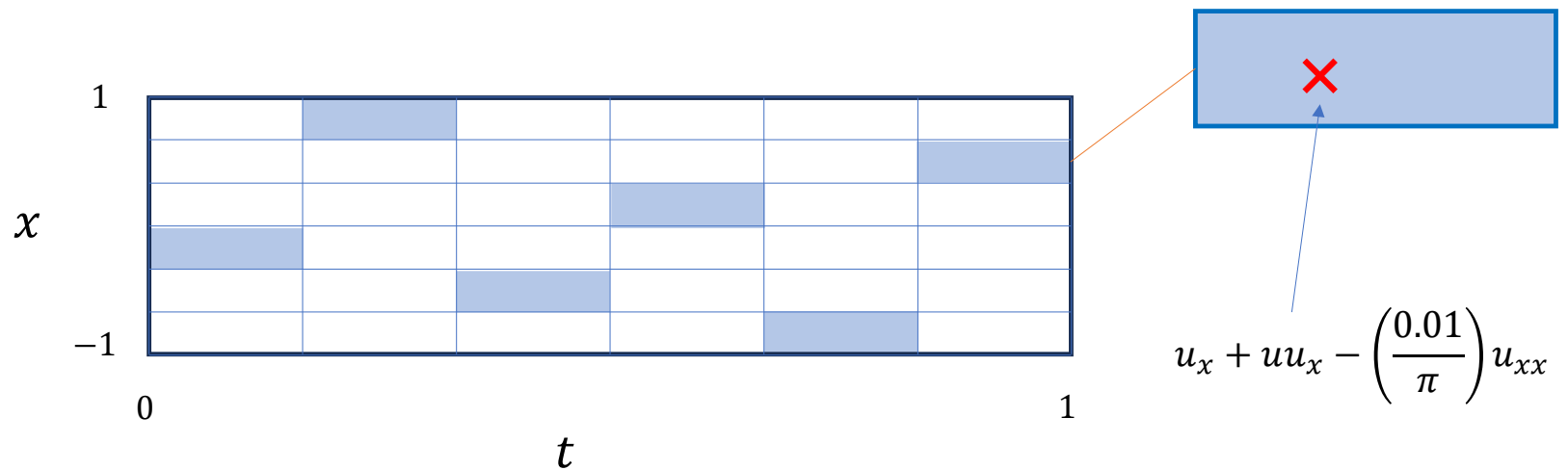
Latin hypercube sampling



# Solución a EDP en tiempo continuo

## Configuración de la red neuronal:

Latin hypercube sampling

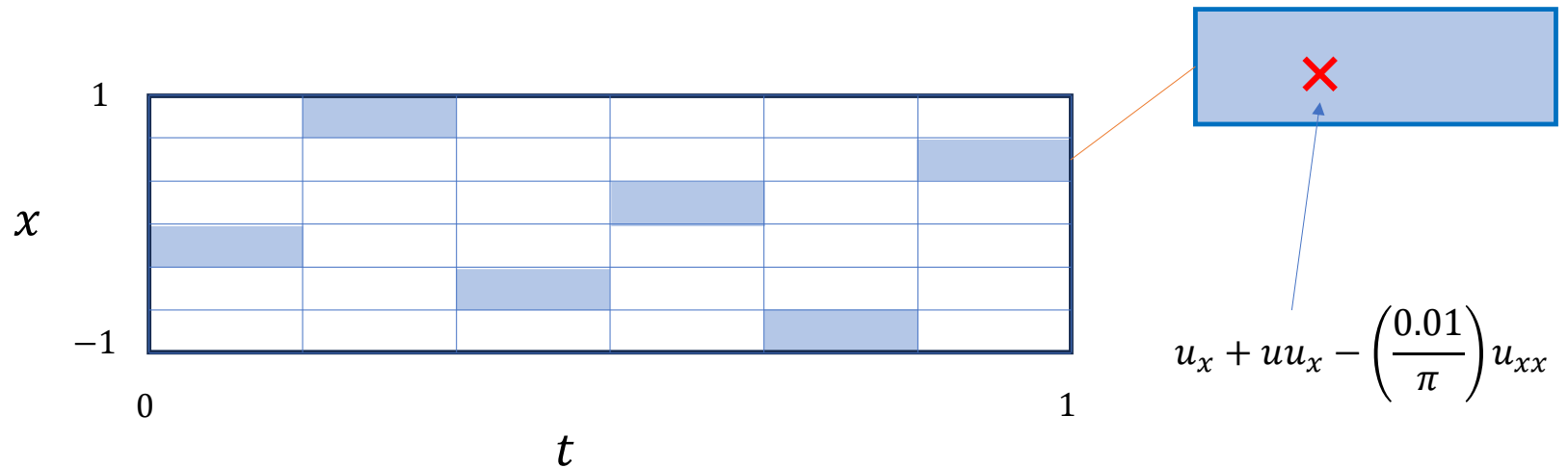


# Solución a EDP en tiempo continuo

## Configuración de la red neuronal:

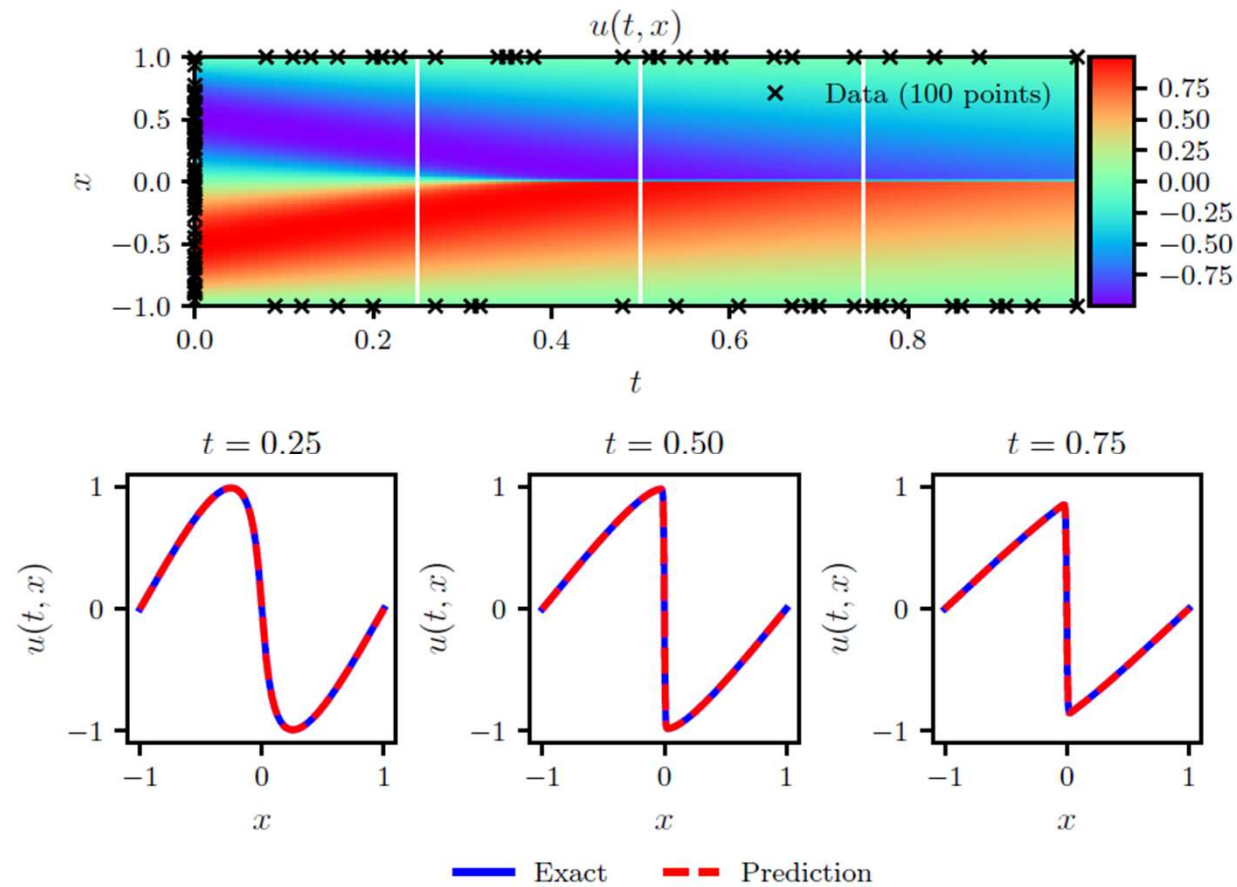
Latin hypercube sampling

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

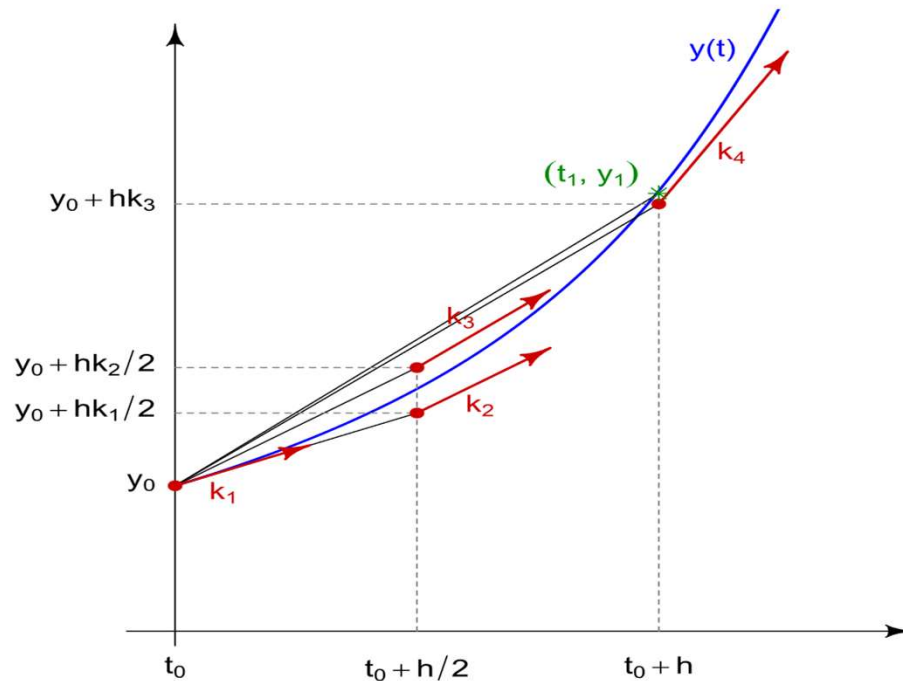
**Runge-Kutta de 4to orden:**

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

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

# 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:**

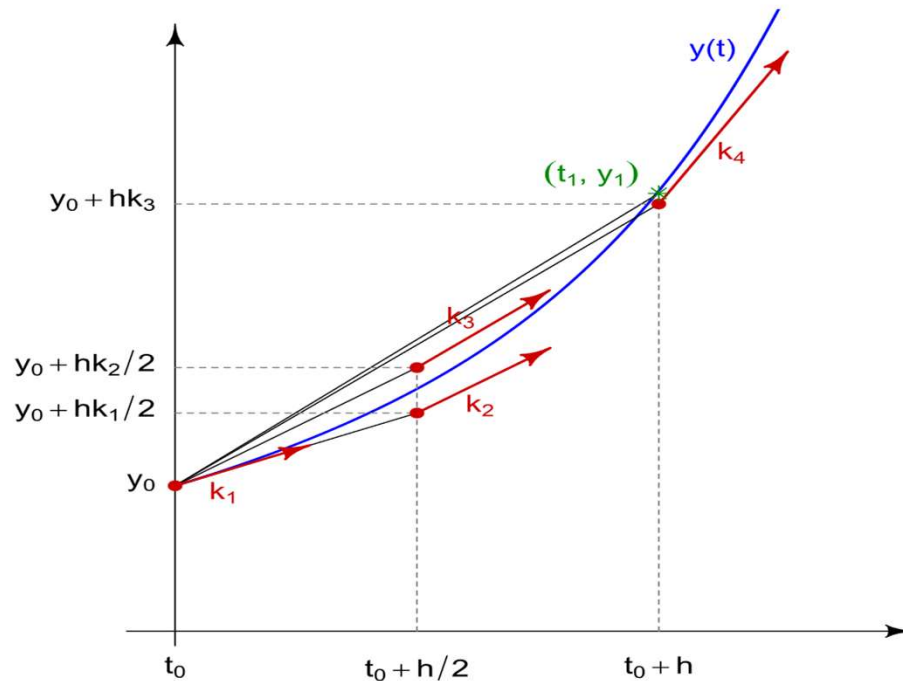
$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \sum_{j=1}^q b_j O(u^{t+c_j})$$

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



# 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

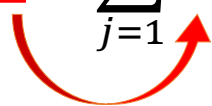
**Runge-Kutta:**

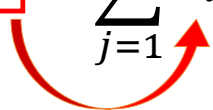
$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \sum_{j=1}^q b_j O(u^{t+c_j})$$

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

# 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:**

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

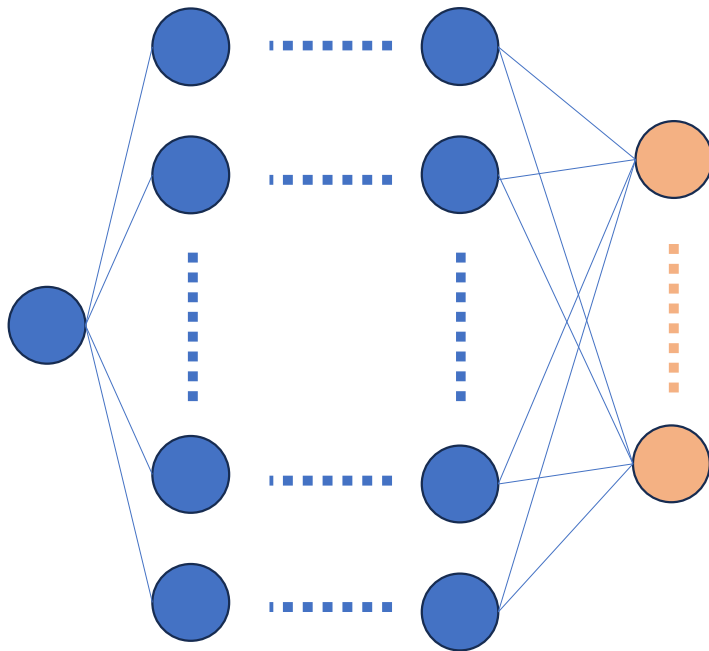
$$u_i^n := u^n = u^{n+c_i} - \Delta t \sum_{j=1}^q a_{ij} O(u^{t+c_j}), \quad i = 1, \dots, q$$

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

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

# Solución a EDP en tiempo discreto

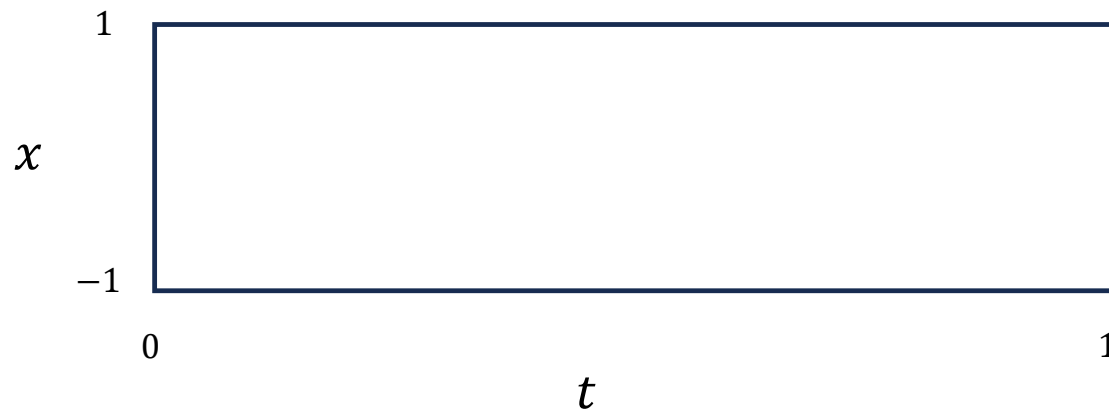
## Configuración del problema:



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

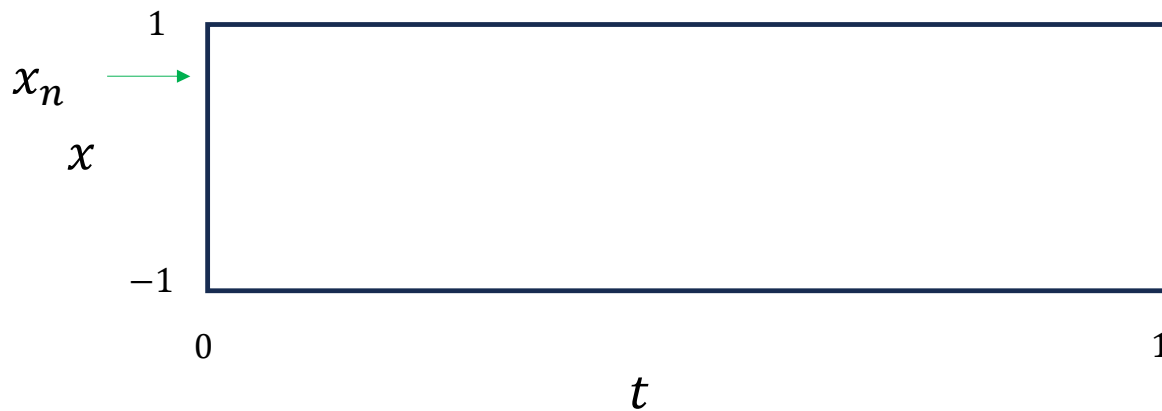
# Solución a EDP en tiempo discreto

**Configuración del problema:**



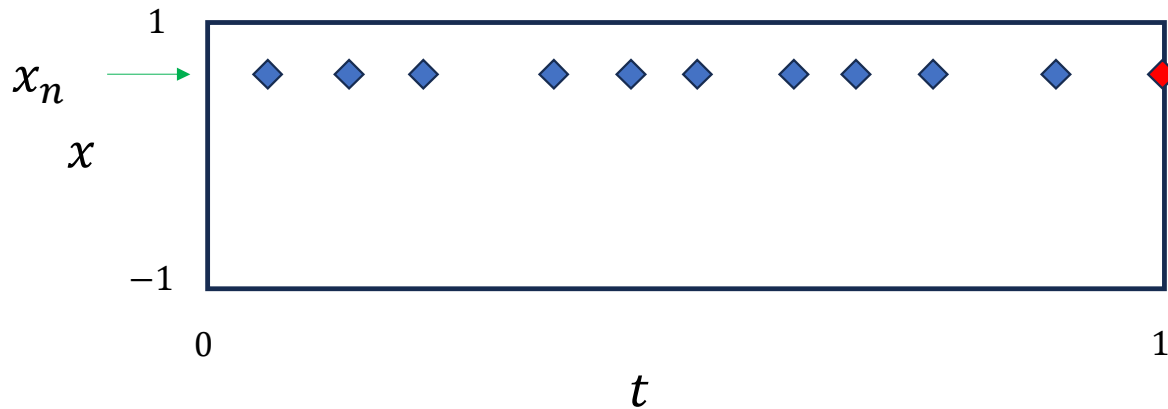
# Solución a EDP en tiempo discreto

**Configuración del problema:**



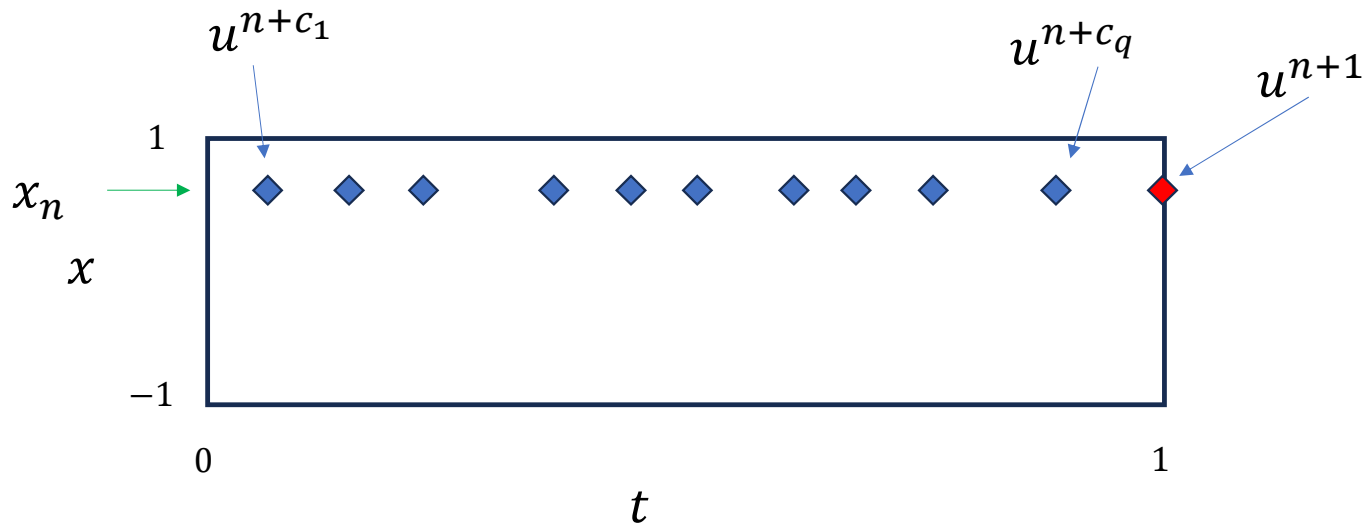
# Solución a EDP en tiempo discreto

**Configuración del problema:**



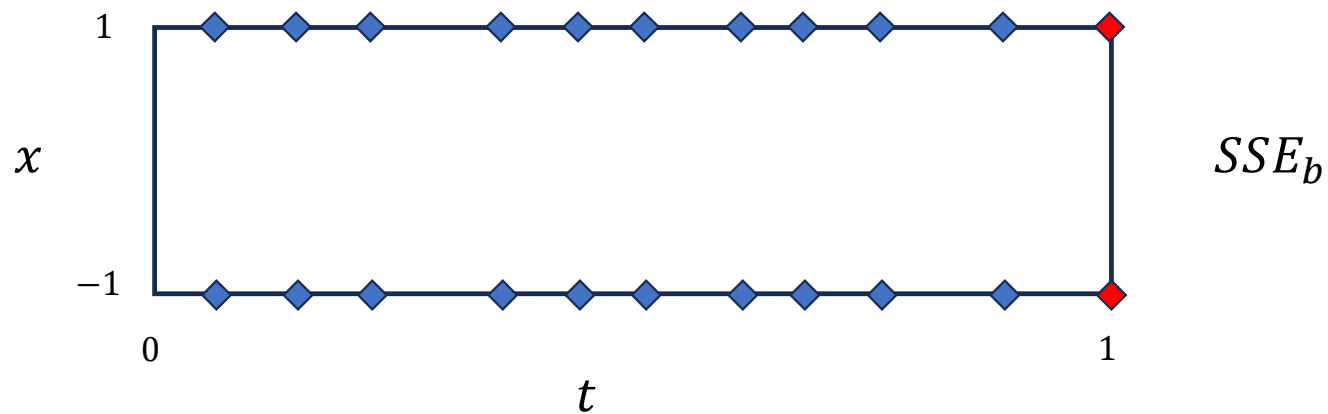
# Solución a EDP en tiempo discreto

**Configuración del problema:**



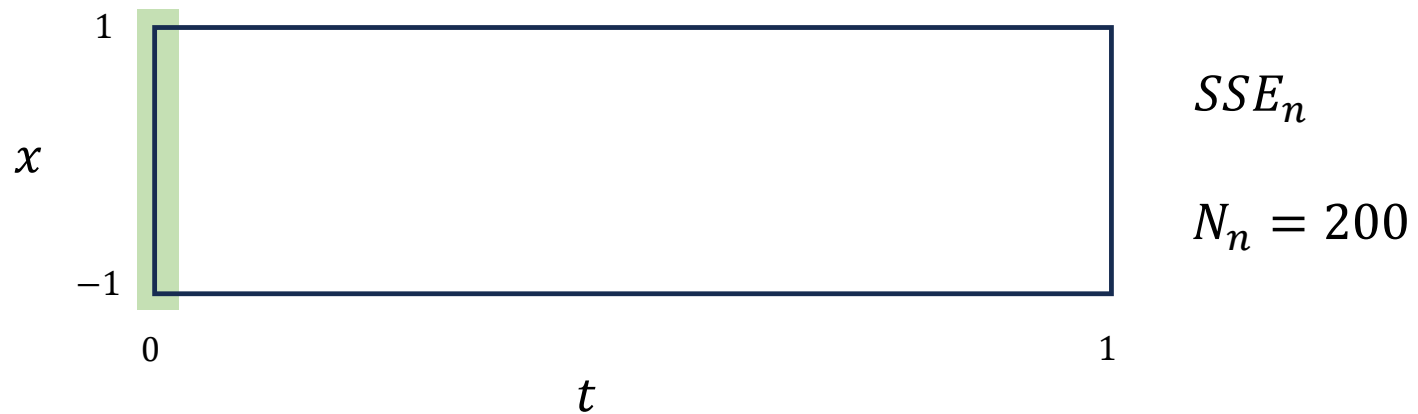
# Solución a EDP en tiempo discreto

**Configuración del problema:**



# Solución a EDP en tiempo discreto

**Configuración del problema:**



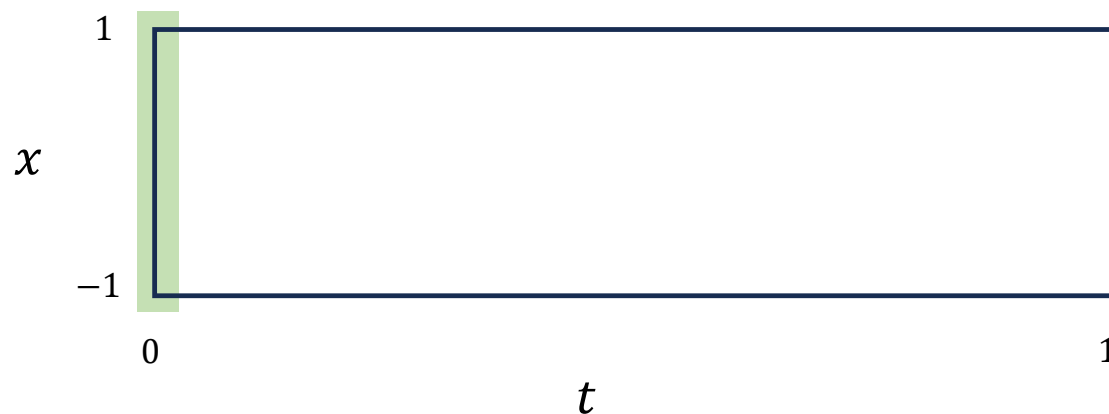


# Solución a EDP en tiempo discreto

## Configuración del problema:

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

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



$SSE_n$

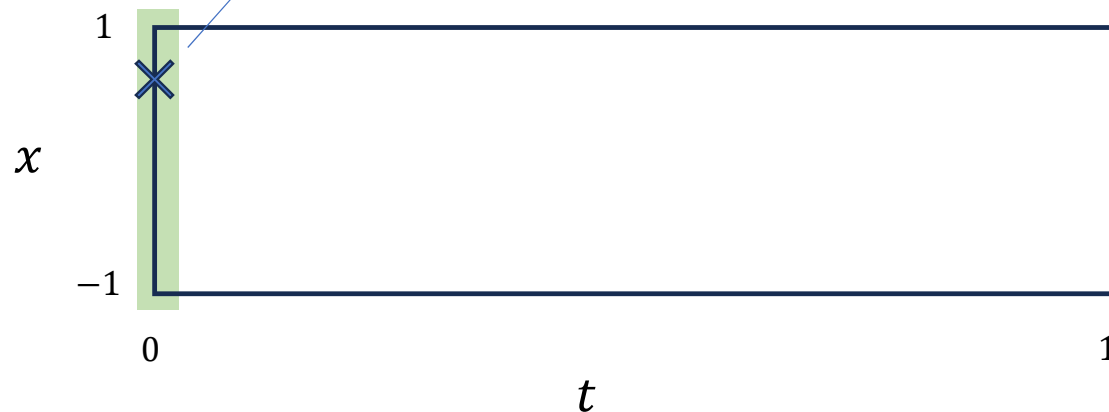
$N_n = 200$

# Solución a EDP en tiempo discreto

## Configuración del problema:

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

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



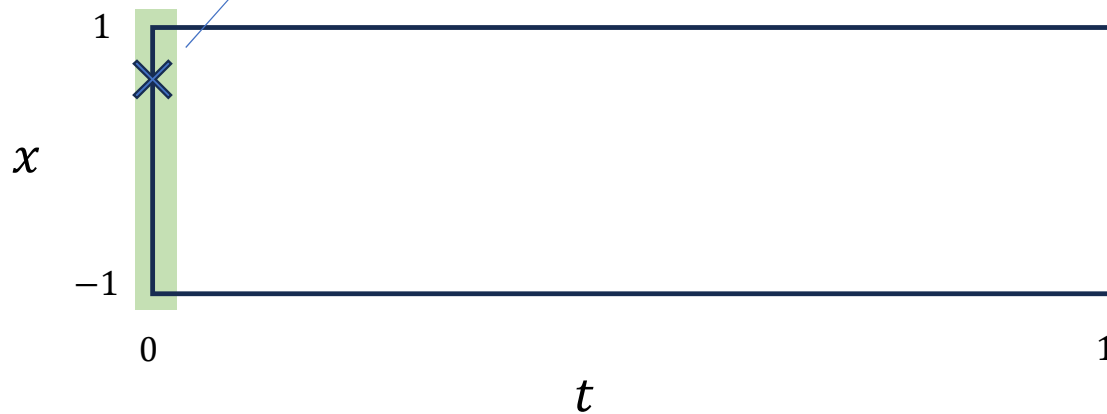
$SSE_n$

$N_n = 200$

# Solución a EDP en tiempo discreto

## Configuración del problema:

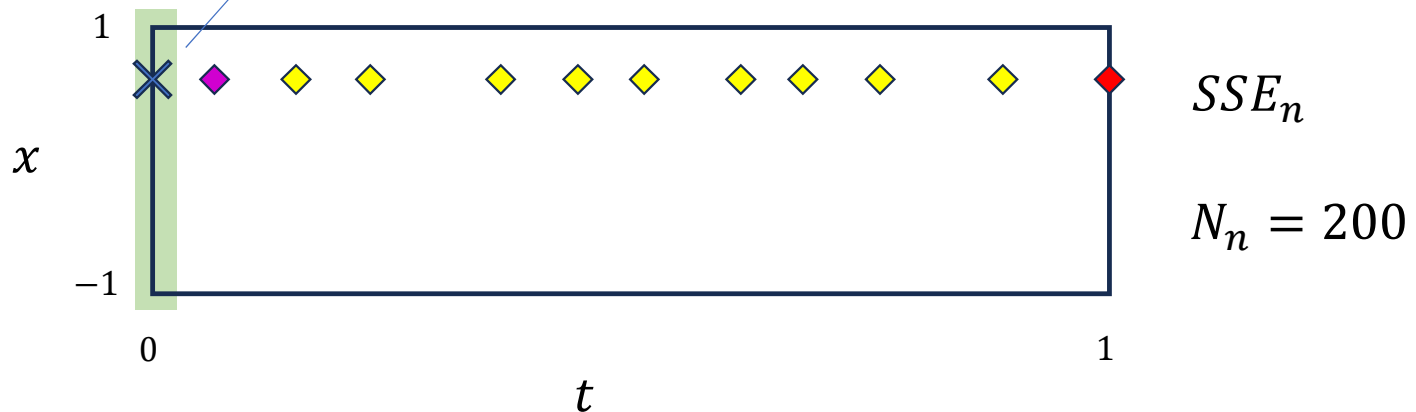
$$SSE_n = \sum_{j=1}^{q+1} \sum_{i=1}^{N_n} |u_j^n(x^{n,i}) - u^{n,i}|^2$$
$$u_i^n = u^{n+c_i} - \Delta t \sum_{j=1}^q a_{ij} O(u^{t+c_j}), \quad i = 1, \dots, q$$



# Solución a EDP en tiempo discreto

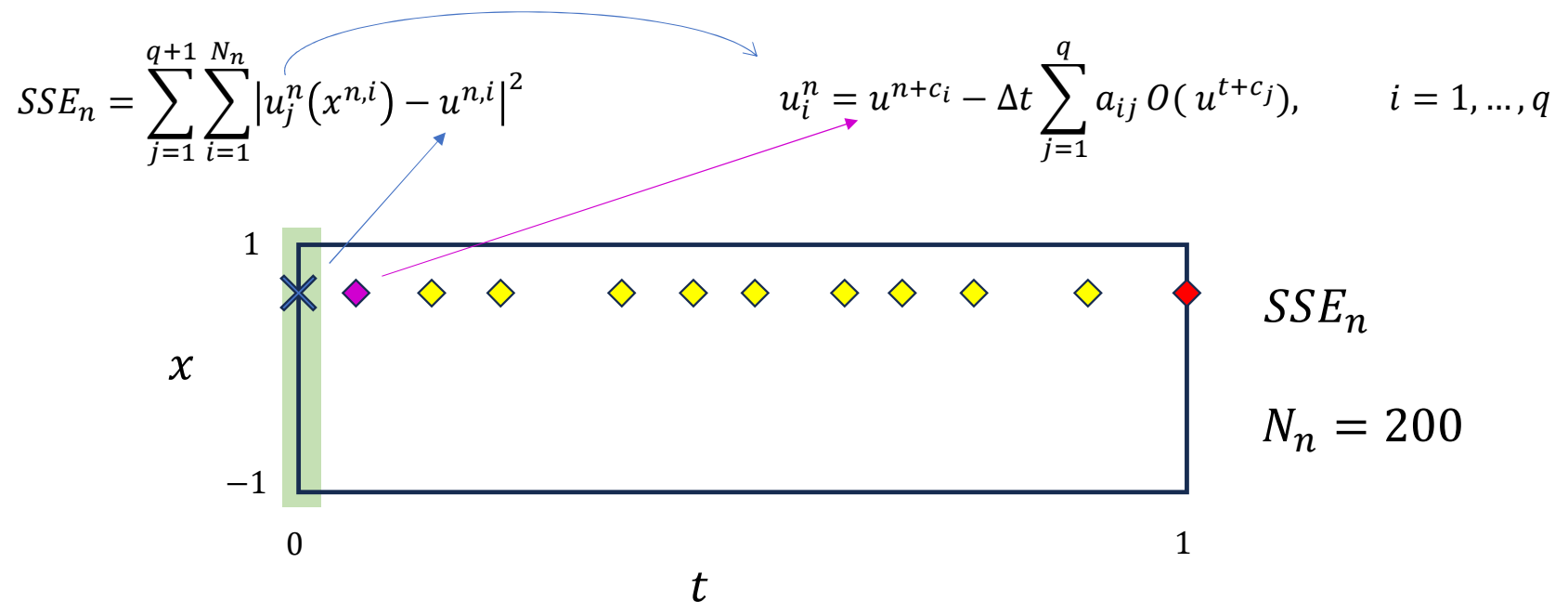
## Configuración del problema:

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



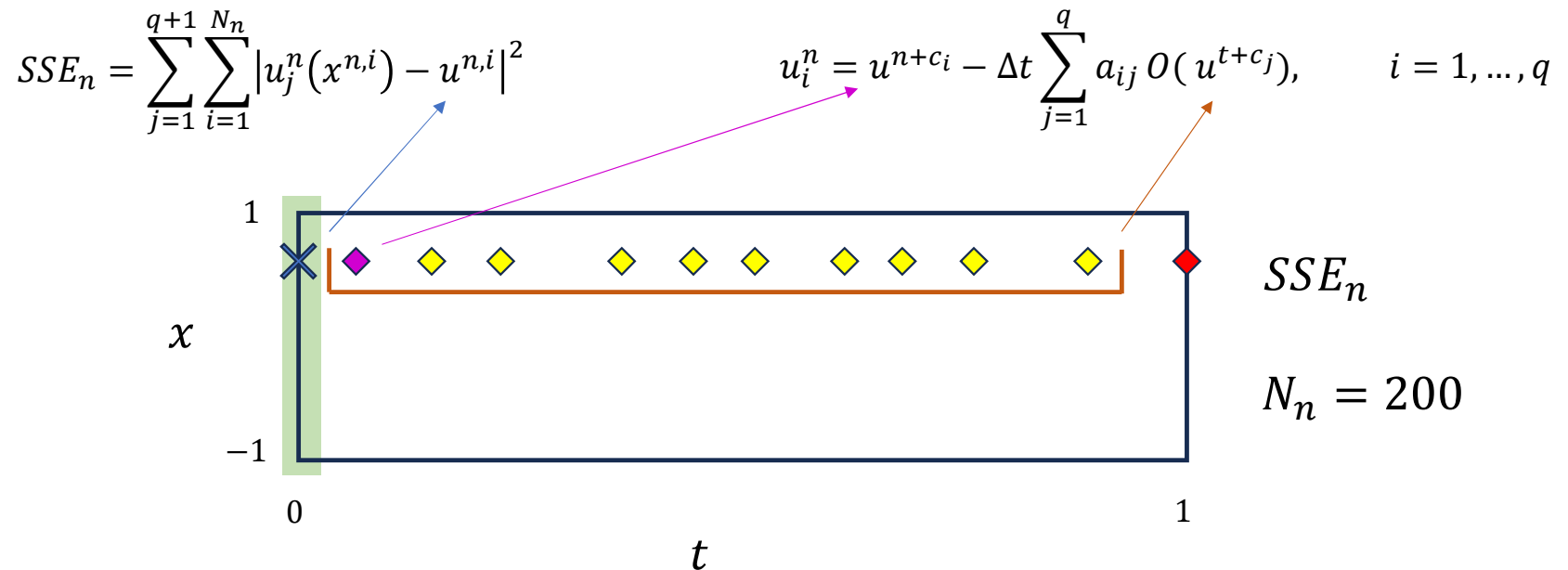
# Solución a EDP en tiempo discreto

## Configuración del problema:

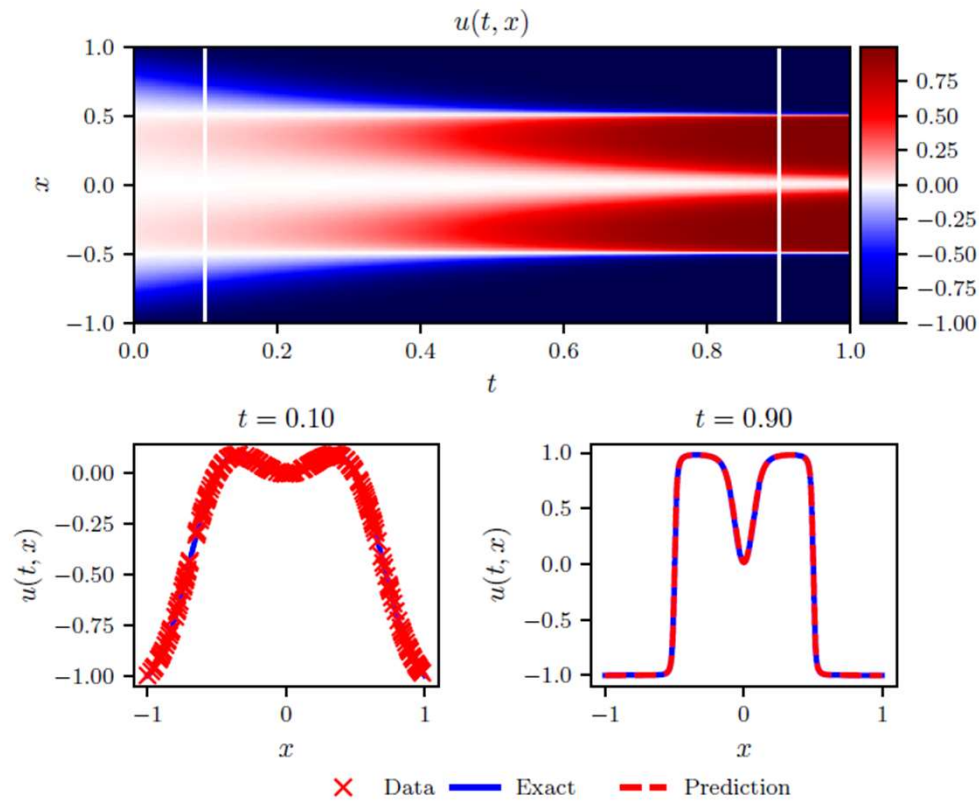


# Solución a EDP en tiempo discreto

## 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

$$MSE = MSE_u + MSE_f,$$

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

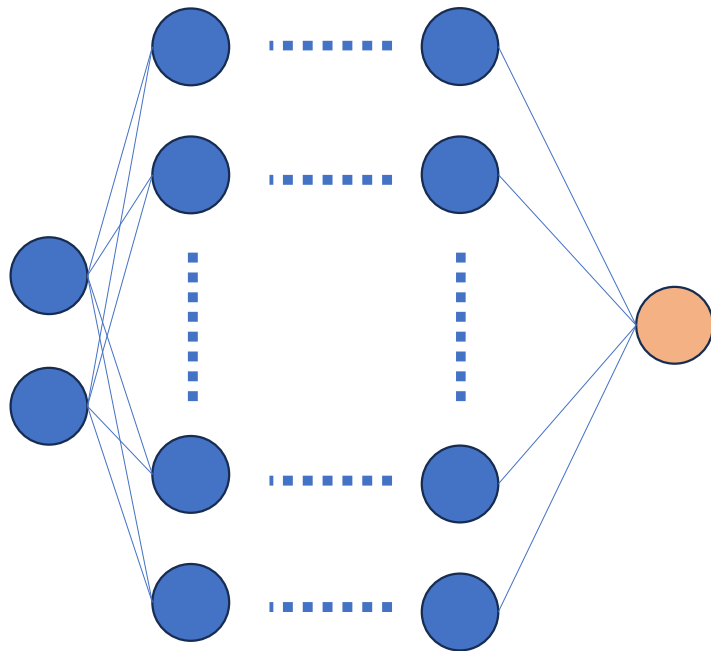
$$MSE_f = \frac{1}{N_f} \sum_{i=1}^{N_f} |f(t_f^i, x_f^i)|^2.$$

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

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

# Descubrimiento de parámetros de EDP en tiempo continuo

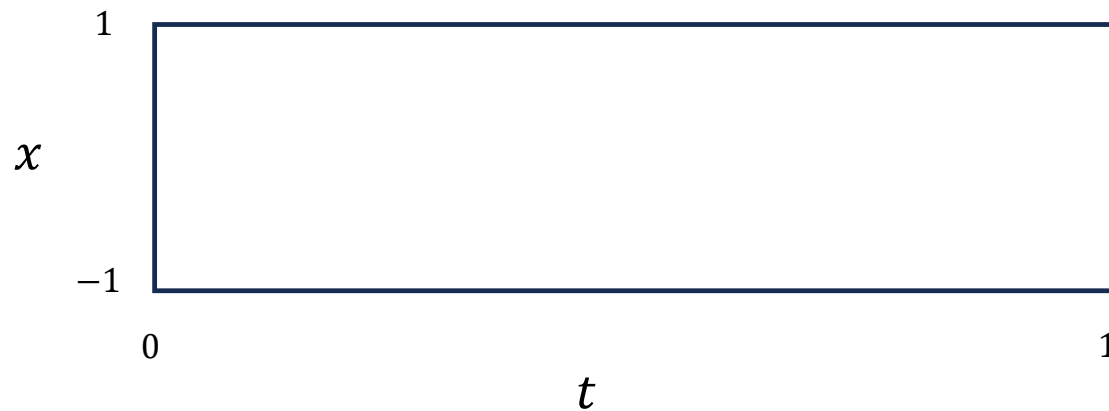
## Configuración de la red neuronal:



- 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:**



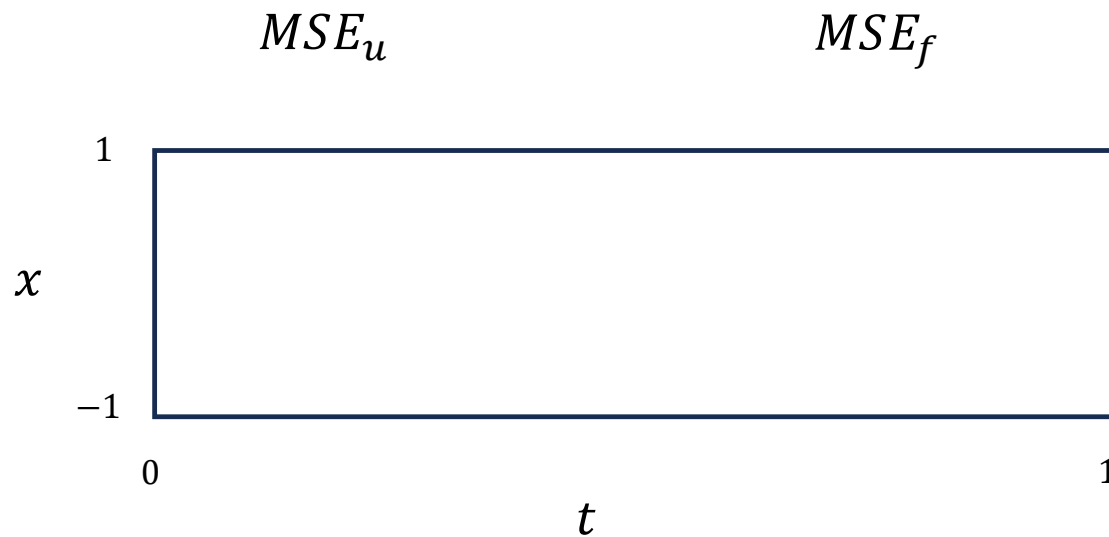
# Descubrimiento de parámetros de EDP en tiempo continuo

**Función de pérdida:**



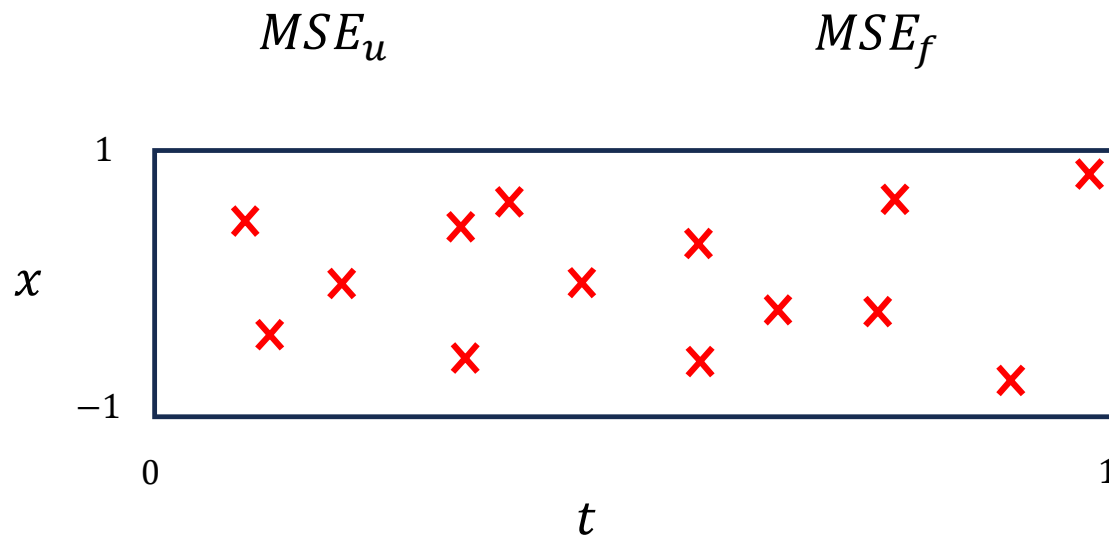
# Descubrimiento de parámetros de EDP en tiempo continuo

**Función de pérdida:**



# Descubrimiento de parámetros de EDP en tiempo continuo

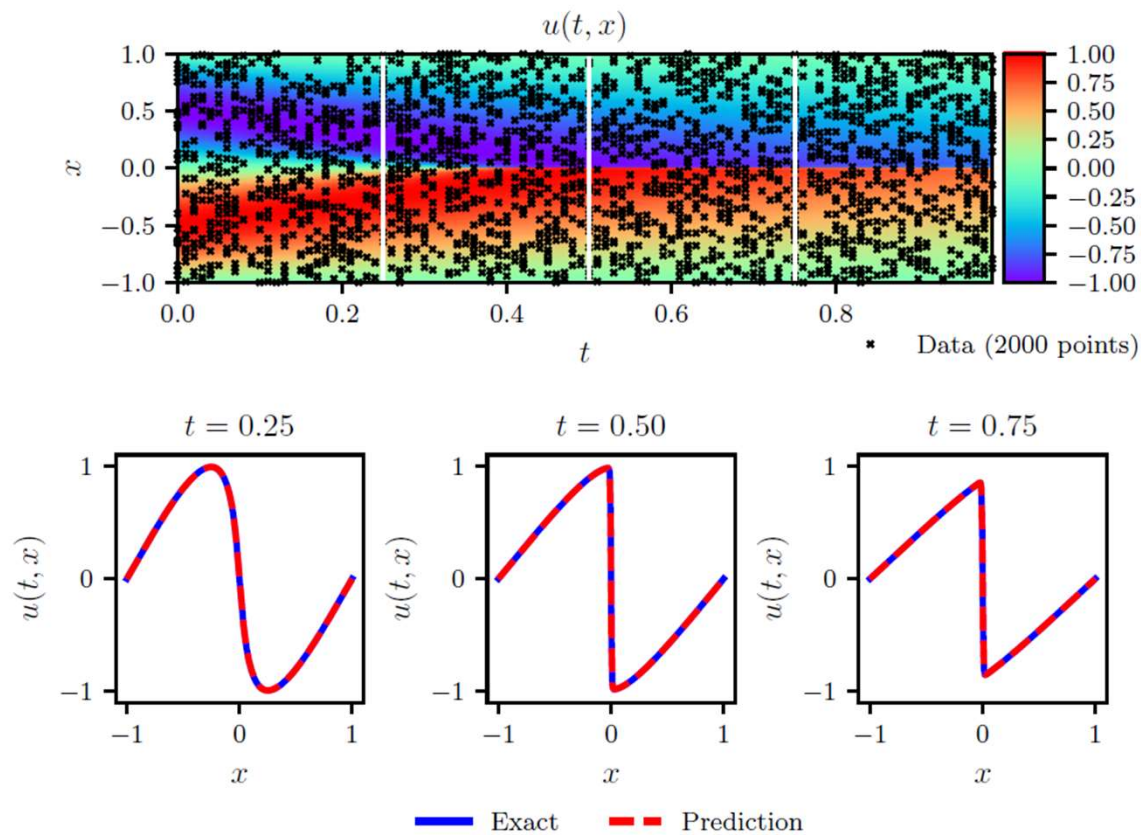
**Función de pérdida:**



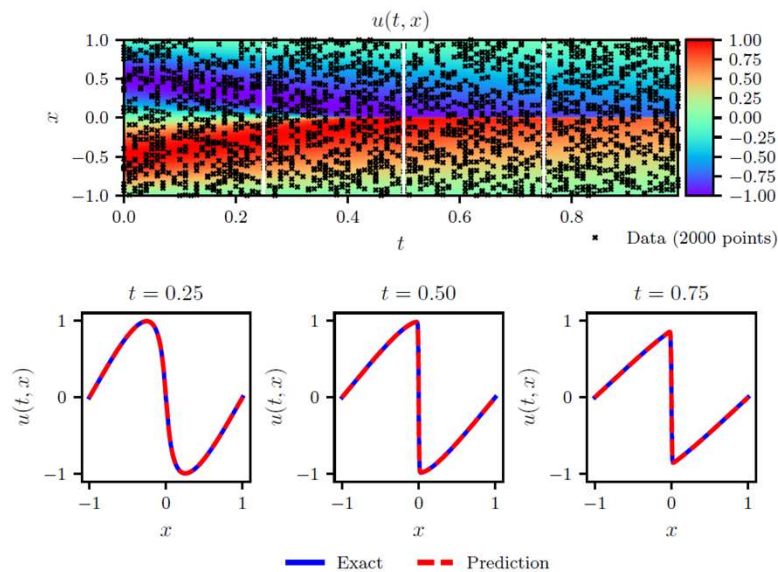
2000 puntos al azar



# 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