

14º Congresso de Inovação, Ciência e Tecnologia do IFSP - 2023

JULIA.MARINO BUSO¹, FABIANO.GONZAGA FUMES²

¹ Graduando em Engenharia de Controle e Automação, Bolsista PIBIFSP, IFSP, Câmpus Salto, j.buso@ifsp.edu.br.

² Mestre em Engenharia Mecânica, Professor EBTT, IFSP Campus Hortolândia, fabiano.fumes@ifsp.edu.br

INTRODUÇÃO AO USO DE REDES NEURAIS PARA SOLUÇÃO DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS

RESUMO: As Equações Diferenciais são fundamentais para modelar uma ampla gama de fenômenos naturais e científicos, abrangendo áreas como física, engenharia, biologia e economia. A solução analítica de tais problemas pode ser desafiadora ou mesmo impossível para muitos casos complexos. Neste contexto, a utilização de estratégias utilizando redes neurais oferece uma alternativa eficiente e veloz. Através das Redes Neurais Informadas pela Física (PINN), que incorporam informações de condições iniciais e de contorno diretamente na arquitetura da rede, as PINNs se mostraram altamente eficazes na resolução de uma ampla variedade de EDs. Uma das vantagens deste método a ser exemplificada neste trabalho é a manipulação de dados experimentais ruidosos e situações em que apenas uma parte do domínio é conhecida.

PALAVRAS-CHAVE: fenômenos; física; sistemas físicos; neurônio; PINN.

INTRODUCTION TO THE USE OF NEURAL NETWORKS TO SOLUTION DIFFERENTIAL EQUATIONS

ABSTRACT: Differential Equations are fundamental for modeling a wide range of natural and scientific phenomena, spanning areas such as physics, engineering, biology, and economics. The analytical solution of such problems can be challenging or even impossible for many complex cases. In this context, employing strategies using neural networks provides an efficient and swift alternative. Through Physics-Informed Neural Networks (PINNs), which incorporate initial and boundary condition information directly into the network architecture, PINNs have proven to be highly effective in solving a wide variety of differential equations. One of the advantages of this method to be exemplified in this work is the handling of noisy experimental data and situations where only a part of the domain is known.

KEYWORDS: phenomena; physics; physical systems; neuron; PINN.

INTRODUÇÃO

Equações diferenciais (EDs) servem como um alicerce para compreender e descrever diversos fenômenos em várias disciplinas científicas [1]. Desde a modelagem de sistemas físicos à descrição de processos biológicos e econômicos, as EDs são modelos matemáticos que descrevem a dinâmica das mudanças. No entanto, soluções analíticas para EDs muitas vezes são inatingíveis para casos complexos e não lineares, demandando abordagens computacionais inovadoras. Nos últimos anos, as Redes Neurais Informadas pela Física (PINNs) surgiram como um paradigma promissor para resolver as EDs, combinando as redes neurais com parâmetros físicos [2].

As redes neurais (RNs) demonstraram capacidades notáveis em aproximar funções complexas e padrões a partir de dados. Enquanto isso, a essência da física reside em equações governantes que prescrevem as relações fundamentais entre quantidades em um sistema [1]. A união desses conceitos, redes neurais e equações governantes, formam as PINNs. Ao incorporar a física conhecida de um problema na RN, as PINNs oferecem uma abordagem de dados que mantém os princípios físicos, permitindo a solução de EDs onde os dados podem ser escassos, ruidosos ou ausentes.

A ideia das PINNs é utilizar a rede para impor implicitamente as EDs governantes e quaisquer condições iniciais ou de contorno fornecidas [2]. Isso é alcançado treinando a RN com dados do problema e regularizando o comportamento da rede usando as EDs. Como resultado, as PINNs não apenas se aproximam da solução de uma ED, mas também de satisfazê-la com alta fidelidade. Essa abordagem tem sido aplicada em áreas como dinâmica de fluidos, mecânica estrutural e transferência de calor.

MATERIAL E MÉTODOS

Uma rede neural é um modelo computacional que busca simular o processo de aprendizagem do cérebro humano. Ela é composta por várias camadas de unidades interconectadas, conhecidas como neurônios artificiais. Cada neurônio recebe um vetor de entradas x , que são ponderadas por uma matriz de pesos correspondente W , além de um vetor de bias b . A combinação linear das entradas ponderadas pelos pesos, somada ao bias, é então transformada por uma função de ativação não-linear σ , resultando na saída do neurônio [4, 5, 6]. Esse processo é repetido em cada camada da rede, permitindo que ela capture relações complexas entre os dados de entrada e produza saídas úteis para tarefas como classificação, regressão e processamento de informações. Matematicamente, uma rede contendo 3 camadas pode ser definida na Eq. (1) e ilustrada na Figura 1.

$$NN(x) = W_3 \sigma_2 (W_2 \sigma_1 (W_1 x + b_1) + b_2) + b_3 \quad (1)$$

em que,

W - pesos;

σ - função de ativação;

x - entradas;

b - bias.

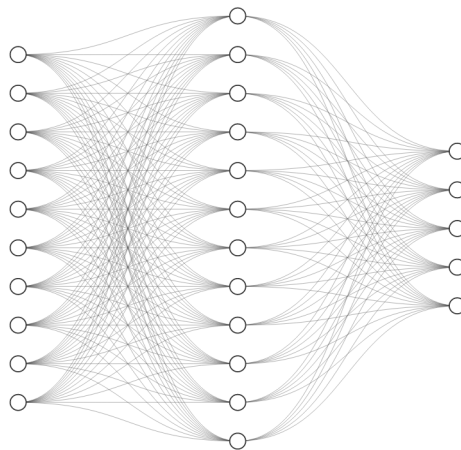


FIGURA 1. Rede neural com 3 camadas

Considere uma equação diferencial ordinária dada por

$$u' = f(u, t) \quad (2)$$

em que,

u - espaço;

t- tempo.

sendo o tempo pertencente ao intervalo de $[0,1]$ e a condição inicial dada por

$$u(0) = u_0 \quad (3)$$

Para resolver a Eq. (2), aproximamos a solução por meio de uma rede neural

$$NN(t) \approx u(t) \quad (3)$$

em que,
NN- rede neural.

Se $NN(t)$ fosse a verdadeira solução, então seria válido que $NN'(t) = f>NN(t), t$ para todos os t . Assim, transformamos essa condição em nossa função de perda, dada pela Eq. (4)

$$L(p) = \sum_i (dNN(t_i)/dt - f>NN(t_i), t_i))^2 \quad (4)$$

em que,
NN- rede neural;
t- tempo;
p- conjunto de hiperparâmetros que definem a rede neural.

Para incluir a condição inicial, definimos a solução $g(t)$

$$g(t) = u_0 + tNN(t) \quad (5)$$

em que,
 u_0 - condição inicial;
NN- rede neural;
t- tempo.

como nossa solução. Uma vez que $g(t)$ sempre satisfará a condição inicial, podemos treinar $g(t)$ para satisfazer a função derivada, e assim ela será automaticamente uma solução para a função derivada. Nesse sentido, podemos usar a função de perda

$$L(p) = \sum_i \left(\frac{dg(t_i)}{dt} - f(g(t_i), t_i) \right)^2 \quad (6)$$

Esta função será utilizada para descobrir os pesos que reduzem o erro da aproximação, realizada pela rede neural.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para verificar a viabilidade do método exposto, tomamos a equação diferencial ordinária

$$u' = \cos 2\pi t \quad (5)$$

sujeita à condição inicial $u_0 = 1$.

Substituindo o valor na função $g(t)$ descrita no item anterior, obtemos

$$g(t) = t * NN(t) + 1 \quad (7)$$

em que,
NN- rede neural;

t- tempo.

Foi utilizada uma rede neural $NN(t)$ simplificada, com 32 camadas intermediárias que transformam um escalar da camada de entrada para outro escalar da camada de saída (ilustrado na Fig. 2) e com função de ativação sendo \tanh .

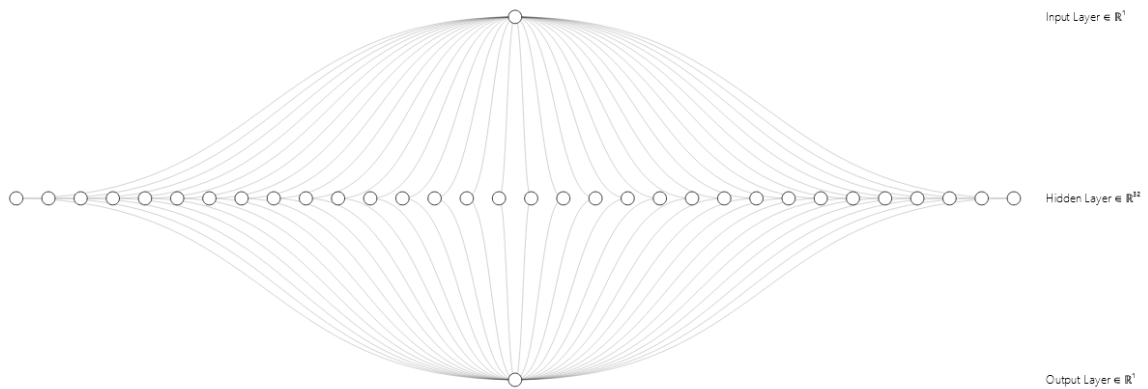


FIGURA 2. Rede neural com 3 camadas usada no problema

A função de perda, calculada em 5000 épocas, é ilustrada na Fig. 3. Percebe-se que, com o passar do tempo, à medida que a rede neural é cada vez mais bem treinada, há uma diminuição significativa na quantidade de erros, o que implica que o resultado final se tornará cada vez mais próximo do resultado verdadeiro.

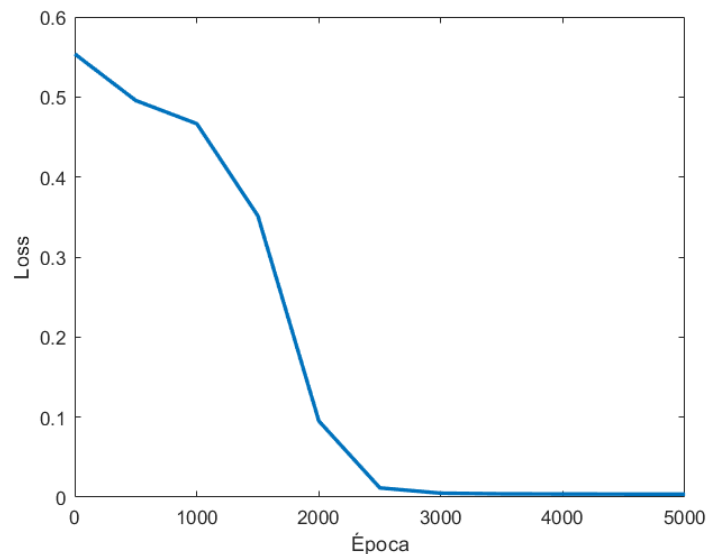


FIGURA 3. Resultados dos cálculos da função de perda.

Ao tomarmos a integral de ambos os lados de nossa equação diferencial, é possível obter a solução analítica:

$$\int g' = g = \int \cos 2\pi t = C + \sin 2\pi t / 2\pi \quad (7)$$

em que,
C- constante.

e definimos $C=1$. Tomando-se um conjunto de pares (entrada, saída) da rede neural e plotá-lo em relação à solução analítica da equação diferencial fornece o gráfico dado pela Fig. 4.

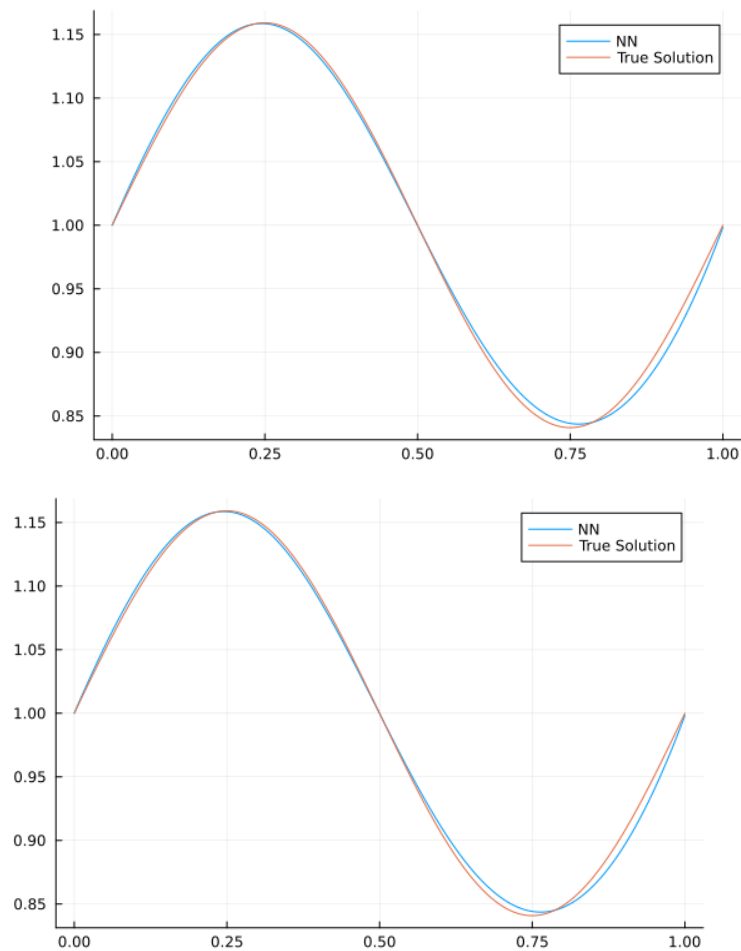


FIGURA 4. Gráfico com a resolução original e rede neural, em um intervalo de $[0, 1]$ segundos.

É visível a semelhança entre ambos os resultados, porém o resultado da rede neural foi amplamente mais simples de se obter quando comparado à solução verdadeira, quando feita manualmente. Em casos físicos, no qual as condições iniciais muitas vezes são desconhecidas, a resolução por meio da rede neural se torna muito viável e simples.

CONCLUSÕES

Com este estudo introdutório, fica evidente que a utilização de uma rede neural simplificada auxilia consideravelmente a resolução de equação diferencial. Foi possível realizar, conforme descrito, um treinamento em 5000 épocas que dispensa outros métodos numéricos de solução de equações diferenciais. Modelos mais complexos devem ser avaliados de maneira a se realizar uma comparação frente à presença de não linearidades. Com o avanço da pesquisa, é possível realizar a construção de redes neurais que auxiliem na solução de problemas físicos com condições iniciais desconhecidas, pois a mesma possui a habilidade de previsão de dados quando treinada.

CONTRIBUIÇÕES DOS AUTORES

J.M.B. contribuiu com a pesquisa, desenvolvimento do projeto, metodologia, experimentos e redação do trabalho.

F.G.F. atuou em indicações de referências, revisão do trabalho e aprovação da versão submetida.

AGRADECIMENTOS

Agradecimento ao Instituto Federal de São Paulo- Campus Salto, por fornecer uma infraestrutura adequada para a realização do projeto.

REFERÊNCIAS

- [1] Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). **Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations**. *Journal of Computational Physics*, 378, 686-707.
- [2] Sirignano, J., & Spiliopoulos, K. (2018). **DGM: A deep learning algorithm for solving partial differential equations**. *Journal of Computational Physics*, 375, 1339-1364.
- [3] **Introduction to Scientific Machine Learning through Physics-Informed Neural Networks - MIT Parallel Computing and Scientific Machine Learning (SciML)**. Acesso em: 2023. Disponível em:
<https://book.sciml.ai/notes/03-Introduction_to_Scientific_Machine_Learning_through_Physics-Informed_Neural_Networks/>.
- [4] DSA, E. **Capítulo 1 - Deep Learning e a Tempestade Perfeita**. Acesso em: 2023. Disponível em:
<<https://www.deeplearningbook.com.br/deep-learning-a-tempestade-perfeita/>>.
- [5] **But what is a neural network? | Chapter 1, Deep learning**. Acesso em: 2023. Disponível em:
<https://www.youtube.com/watch?v=aircAruvnKk&list=PLZHQObOWTODNU6R1_67000Dx_ZCJB-3pi&ab_channel=3Blue1Brown>.
- [6] Aroztegui, J. M., & Machado, T. J. (2021). **Soluções Numéricas de Equações Diferenciais com Redes Neurais Artificiais**. *VETOR - Revista De Ciências Exatas E Engenharias*, 31(2), 2–13.
<https://doi.org/10.14295/vetor.v31i2.13793>