



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE MATEMÁTICA, ESTATÍSTICA E COMPUTAÇÃO CIENTÍFICA
DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA APLICADA



RAFAEL ALEXANDROW FRANCHI CARNIELLO

Estudo da forma fraca de redes neurais fisicamente guiadas para aproximar modelos escalares de leis de conservação hiperbólicas

Campinas
2022

RAFAEL ALEXANDROW FRANCHI CARNIELLO

Estudo da forma fraca de redes neurais fisicamente guiadas para aproximar modelos escalares de leis de conservação hiperbólicas

Monografia apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos para obtenção de créditos na disciplina Projeto Supervisionado, sob a orientação do Prof. Eduardo Abreu e Prof. João B. Florindo.

Resumo

O presente trabalho buscou estudar a solução numérica de leis de conservação hiperbólicas escalares em uma dimensão através de redes neurais fisicamente guiadas na forma fraca, introduzida em 2022 [2]. Para isso, primeiro, através da teoria de distribuições, foi explicitada a forma integral das equações diferenciais, levando às suas conhecidas soluções fracas. Em seguida, a condição de entropia de Kruzhkov é apresentada, o que garante a unicidade de soluções no caso escalar. Para a aproximação numérica foram utilizadas redes neurais que incorporam restrições de otimização, sendo “guiadas” a partir da física do problema, o que leva à minimização de uma função não linear e não convexa. Os experimentos numéricos se basearam na modificação do código livre disponível em <https://github.com/mroberto166/wpinns>. A partir dos resultados, obteve-se a evolução das ondas de choque e rarefação para os problemas de Riemann na equação de Burgers invíscida. Estes foram contrastados com os resultados do PINN na forma forte, apresentado no congresso ECCOMAS 2022, para problemas de leis de conservação hiperbólicas escalares bidimensionais [1]. Assim, o método numérico obteve soluções promissoras e eficientes em termos de tempo e memória computacional.

Abstract

The present work sought to study the numerical solution of scalar hyperbolic conservation laws in one dimension through physics-informed neural networks in the weak form, introduced in 2022 [2]. For this, first, through the theory of distributions, we make explicit the integral form of differential equations, leading to their known weak solutions. Then, the Kruzhkov entropy condition is presented, which guarantee the uniqueness of solutions in the scalar case. For the numerical approximation it was utilized neural networks that incorporate optimization constraints, being “guided” by the physics of the problem, leading to the minimization of a non-linear and non-convex function. The numerical experiments were based on the modification of the free source code available at <https://github.com/mroberto166/wpinns>. From the results, the evolution of the shock and rarefaction waves for the Riemann problems in the inviscid Burgers equation was obtained. These, were contrasted with the PINN results in the strong form, presented at ECCOMAS 2022 congress, for scalar hyperbolic conservation laws problems in two-dimensions [1]. Thus the numerical method obtained promising and efficient solutions in terms of computational time and memory consumption.

Contents

1	Introdução	6
2	Preliminares Matemáticos	7
2.1	Medidas	7
2.2	Espaços Funcionais	7
2.3	Distribuições	9
3	Fundamentação Teórica	9
3.1	Leis de Conservação Hiperbólicas	9
3.1.1	Derivação	9
3.1.2	Condição de Entropia	14
3.1.3	Compacidade	17
3.1.4	Problemas de Riemann	17
3.2	Redes Neurais	20
3.2.1	Multi Layer Perceptron	20
3.2.2	PINN Clássico	23
3.2.3	PINN Weak	25
4	Experimentos Numéricos	27
4.1	PINN Clássico	27
4.2	PINN Weak	33
4.3	Comparação das Abordagens	34
5	Conclusão	35

1 Introdução

A recente popularidade do método *physics-informed neural network* (PINNs) [18; 22; 27; 28], ou, na tradução adotada neste trabalho, redes neurais fisicamente guiadas, como um método de aproximação para resolver numericamente classes de equações diferenciais parciais (EDPs) (por exemplo, [19; 21; 26]) representa um grande avanço na computação científica [25; 20], especialmente, considerando as relativamente simples redes neurais empregadas para esse fim [11].

Um passo importante e distinto no tratamento numérico de modelos envolvendo EDPs foi dado em [22] (2019) para problemas diretos (resolvendo uma equação diferencial com condição de contorno e/ou de valor inicial) e problemas inversos (aproximando uma EDP paramétrica sobre um conjunto de dados experimentais), combinando modelagem de equações diferenciais e abordagens baseadas em dados; veja também [14; 17]. Desde então, apenas alguns trabalhos foram desenvolvidos com uma análise matemática e numérica rigorosa; veja [14; 23; 24] e as referências nele citadas.

Para o propósito específico do presente trabalho, consideramos essencial destacar alguns avanços recentes dos quais obtivemos *insights* adicionais, a saber, a prova da consistência para EDPs elípticas e parabólicas lineares de segunda ordem [12]; estendendo esta estratégia à prova generalizada de consistência para equações lineares [13], incluindo a equação de advecção linear, que é uma EDP linear hiperbólica; e a estimativa de limites de erro para problemas diretos e inversos [14].

Apesar do sucesso recente de abordagens baseadas em aprendizado para resolver EDPs em configurações relativamente “bem comportadas”, ainda existem pontos nessas metodologias e aplicações que merecem uma discussão mais profunda, tanto em termos teóricos quanto práticos.

Uma dessas questões está relacionada ao fato de soluções de leis de conservação hiperbólicas poderem ser descontínuas. A análise de [27; 15] e as referências nele contidas sugerem que PINNs na forma forte não podem aproximar com precisão as soluções fracas subjacentes dessas EDPs. Isso pode ser explicado pelo fato de que o resíduo pontual aumenta para aproximações suaves da solução exata subjacente e minimizá-lo na classe de redes neurais é ineficiente.

Outra forma natural de se abordarem os modelos de transporte em questão é na sua forma fraca, i.e., variacional. As soluções descontínuas geradas pertencem ao espaço L^1 , sendo assim, não são diferenciáveis, mas, em contrapartida, são Lebesgue integráveis em um espaço de medida. Portanto, a solução proposta para contornar tal questão envolvendo as redes neurais fisicamente guiadas utiliza a forma fraca das leis de conservação hiperbólicas e foi introduzida em 2022 por De Ryck, Mishra e Molinaro [2] com código livre disponível em <https://github.com/mroberto166/wpinns>. Este método apresenta grande potencial para avançar as aplicações de redes neurais em EDPs e, portanto, será estudado neste trabalho.

A monografia está organizada da seguinte forma: na Seção 2, os preliminares matemáticos envolvendo análise funcional utilizados são expostos para completude de definições. Depois, na Seção 3, são apresentados alguns aspectos básicos de equações diferenciais parciais hiperbólicas em problemas de transporte, juntamente com o esquema numérico a ser utilizado. Na Seção 4, os experimentos numéricos obtidos pela rede neural, tanto na forma forte no caso bidimensional, quanto na forma fraca no caso unidimensional são apresentados. Finalmente, na última seção, são feitas algumas considerações finais.

2 Preliminares Matemáticos

2.1 Medidas

Sejam (X, Σ) e (Y, Z) espaços mensuráveis, i.e., X e Y são conjuntos equipados com sua respectiva σ -álgebra Σ e Z . Uma função $f : X \rightarrow Y$ é dita mensurável se para todo $E \in Z$ a pré-imagem de E sobre f está em Σ . Ou, alternativamente,

$$f^{-1}(E) := \{x \in X \mid f(x) \in E\} \in \Sigma. \quad (1)$$

2.2 Espaços Funcionais

Neste trabalho, a notação usual será empregada. Assim, para qualquer $p \in [1, \infty)$, $L^p(U)$ denota o conjunto de todas as funções mensuráveis $F : U \rightarrow \mathbb{R}$, tal que a integral

$$\int_U |F|^p dx \quad (2)$$

é finita. $L^p(U)$ é equipada com a norma

$$\|f\|_{L^p(U)} = \begin{cases} \left(\int_U |f|^p dx \right)^{1/p}, & 1 \leq p < \infty, \\ \text{ess sup}|f|, & p = \infty. \end{cases} \quad (3)$$

É bem conhecido que os espaços $L^p(U)$ são espaços de Banach para $p \in [1, \infty)$, e $L^2(U)$ é um espaço de Hilbert. Ainda, para tratar casos de descontinuidade com medida nula, pode-se definir

$$L^p_{\text{loc}}(U) = \{f : U \rightarrow \mathbb{R} \mid f \in L^p(K) \text{ para qualquer conjunto compacto } K \in U\}. \quad (4)$$

Portanto, se assumir que u é constante fora de um intervalo finito, implica que

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} u(x, t) dx = 0. \quad (5)$$

Logo, a quantidade total de u é independente do tempo, ou, a área do gráfico $u(\cdot, t)$ é constante.

Combinando a definição de norma L^p com as derivadas de uma função, no sentido fraco, define-se a norma natural de um espaço de Sobolev $W^{k,p}(\mathbb{R})$ para $1 \leq p \leq \infty$ e $k \in \mathbb{N}$, tal que

$$\|f\|_{k,p} = \left(\sum_{i=0}^k \|f^{(i)}\|_p^p \right)^{\frac{1}{p}} = \left(\sum_{i=0}^k \int |f^{(i)}(t)|^p dt \right)^{\frac{1}{p}}. \quad (6)$$

Para o caso em que $p = \infty$, estende-se a definição como

$$\|f\|_{k,\infty} = \max_{\{i=0,\dots,k\}} \|f^{(i)}\|_{\infty} = \max_{\{i=0,\dots,k\}} (\text{ess sup}|f^{(i)}(t)|). \quad (7)$$

O espaço de Sobolev também representa um tipo de espaço normado, ou seja, de Banach.

Por fim, define-se a variação total de uma função $u : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ como a semi-

norma $|u|_{BV} := T.V.(u)$, com

$$T.V.(u) = \sup_{x_i} \sum_i |(u(x_i) - u(x_{i-1}))|, \quad (8)$$

tal que o supremo é tirado sobre todas as partições finitas de $\{x_i\}$ para $x_i < x_{i+1}$.

2.3 Distribuições

Pela fórmula de integração por partes, para todo $u \in C^k(\Omega)$, com $k \in \mathbb{N}$, e para todas as funções ϕ de classe C^∞ com suporte compacto, i.e., $\phi \in C_c^\infty(\Omega)$, obtém-se

$$\int_{\Omega} u D^\alpha \phi dx = (-1)^{|\alpha|} \int_{\Omega} \phi D^\alpha u dx, \quad (9)$$

em que α é um multi-índice $|\alpha| = k$ e a notação $D^\alpha f$ é

$$D^\alpha f = \frac{\partial^{|\alpha|} f}{\partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_n^{\alpha_n}}. \quad (10)$$

Note que u só tem sentido neste contexto se for localmente integrável. Assim, se existir uma função localmente integrável v , então

$$\int_{\Omega} \phi D^\alpha u dx = (-1)^{|\alpha|} \int_{\Omega} v D^\alpha \phi dx, \quad \text{para todo } \phi \in C_c^\infty(\Omega). \quad (11)$$

sendo v chamada de derivada fraca de u .

3 Fundamentação Teórica

3.1 Leis de Conservação Hiperbólicas

3.1.1 Derivação

As leis de conservação hiperbólicas modelam uma ampla gama de fenômenos físicos, como, por exemplo: ondas de choque em aviões supersônicos, propagação de tsunamis até a costa, fluidos imiscíveis em reservatórios de petróleo, etc. Pode-se considerá-las como um caso particular das leis de balanço hiperbólicos, definido como

$$u_t + \nabla \cdot u = v(u), \quad (12)$$

no caso em que $v(u) = 0$, i.e.,

$$u_t + \nabla \cdot u = 0. \quad (13)$$

Para o caso multi-dimensional, o problema de Cauchy está definido como

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} + \sum_{j=1}^m \frac{\partial}{\partial x_j} f_j(u(x, t)) = 0, \quad u(x, 0) = u_0. \quad (14)$$

Em específico, este trabalho focará no caso particular quando $m = 1$ e $m = 2$, ou seja,

$$u_t + f(u)_x = 0, \quad u(x, 0) = u_0. \quad (15)$$

$$u_t + f(u)_x + h(u)_y = 0, \quad u(x, y, 0) = u_0. \quad (16)$$

Para exemplificar como as leis de conservação hiperbólicas surgem em problemas físicos, segue a dedução da equação de conservação da massa para um problema de dinâmica de gases unidimensional em um tubo.

Seja x a distância ao longo do tubo, $\rho(x, t)$ a densidade do gás no ponto x e tempo t . Assumindo que a velocidade e densidade do fluido são constantes ao longo de cada secção do tubo. Então, a massa entre dois pontos x_1 e x_2 é dada por

$$\text{massa em } [x_1, x_2] \text{ no tempo } t = \int_{x_1}^{x_2} \rho(x, t) dx. \quad (17)$$

Como se assume que não há perda ou ganho de massa ao longo do tubo, i.e., é um sistema isolado, a causa da variação da massa ao longo de uma secção só pode ser causada pelo deslocamento do gás entre os pontos x_1 e x_2 . Então, seja $v(x, t)$ a velocidade do fluido no ponto x e tempo t , o fluxo de massa entre os pontos é

$$\text{fluxo da massa em } (x, t) = \rho(x, t)v(x, t). \quad (18)$$

Assim, a variação da massa neste intervalo é dada pela diferença entre os fluxos

$$\frac{d}{dt} \int_{x_1}^{x_2} \rho(x, t) dx = \rho(x_1, t)v(x_1, t) - \rho(x_2, t)v(x_2, t). \quad (19)$$

Note que esta é uma formulação integral da lei de conservação. Pode-se também integrar 19, entre os tempos t_1 e t_2 , com $t_2 > t_1$, obtendo a massa no intervalo $[x_1, x_2]$

$$\int_{x_1}^{x_2} \rho(x, t_2) dx = \int_{x_1}^{x_2} \rho(x, t_1) dx + \int_{t_1}^{t_2} \rho(x_1, t)v(x_1, t) dt - \int_{t_1}^{t_2} \rho(x_2, t)v(x_2, t) dt. \quad (20)$$

Para se obter a formulação diferencial da lei de conservação, assume-se que v e ρ são diferenciáveis. Então, utilizando

$$\rho(x, t_2) - \rho(x, t_1) = \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) dt, \quad (21)$$

e

$$\rho(x_1, t)v(x_1, t) - \rho(x_2, t)v(x_2, t) = \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial}{\partial x} (\rho(x, t)v(x, t)) dx, \quad (22)$$

tem-se que

$$\int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho(x, t)v(x, t)) \right\} dx dt = 0. \quad (23)$$

Como esta condição precisa ser válida para todo espaço e tempo nos intervalos de integração, obtém-se

$$\rho_t + (\rho v)_x = 0. \quad (24)$$

Raciocínios análogos podem ser utilizados para se obter a conservação de momento deste gás, bem como a sua conservação de energia, chegando nas seguintes equações:

$$(\rho v)_t + (\rho v^2 + p)_x = 0 \quad \text{conservação de momento} \quad (25)$$

$$E_t + (v(E + p))_x = 0 \quad \text{conservação de energia} \quad (26)$$

com p sendo a pressão e E a energia interna no gás.

A principal equação a ser estudada neste trabalho será a equação de Burgers inviscida, dado que suas soluções modelam dois dos principais fenômenos presentes em leis de conservação: ondas de choque e rarefação. No formato canônico da lei de conservação, a equação tem a função de fluxo convexa igual a $f(u) = u^2/2$, ou seja,

$$u_t + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{u^2}{2} \right) = u_t + uu_x = 0. \quad (27)$$

Note que esta é uma equação diferencial parcial quasilinear. Retomando a classificação de EDPs quanto sua linearidade, para uma função não homogênea de duas variáveis x e t a forma geral pode ser escrita como

$$a(x, t, u)u_t + b(x, t, u)u_x = c(x, t, u). \quad (28)$$

Caso a derivada de maior ordem seja linear, então a equação é dita quasilinear; além disto, caso a e b não dependam de u a equação é dita semi-linear; e, além disto, caso c também não dependa de u , então a equação é dita linear.

Em uma primeira abordagem, pode-se procurar obter a solução da equação a partir de suas curvas características. Assim, seja Γ uma curva em \mathbb{R}^3 parametrizada por $(t(y), x(y), z(y))$ para y em algum intervalo. A superfície $S = \{(t, x, u(x, t)) \in \mathbb{R}^3 | (t, x) \in \mathbb{R}^2\}$ em \mathbb{R}^3 precisa satisfazer $u = u(x, t)$ e $\Gamma \in S$. Parametrizando S em novas variáveis (s, y) , tal que $t = t(s, y), x = x(s, y), z = z(s, y)$ de tal forma que $u(x, t) = z(s, y)$, obtém-se o seguinte sistema de EDOs

$$\frac{\partial t}{\partial s} = a, \quad \frac{\partial x}{\partial s} = b, \quad \frac{\partial z}{\partial s} = c, \quad (29)$$

com

$$t(s_0, y) = t(y), \quad x(s_0, y) = x(y), \quad z(s_0, y) = z(y). \quad (30)$$

Assumindo que seja possível inverter as relações de parametrização, então $u(x, t) =$

$z(s(x, t); y(x, t))$, ou seja,

$$c = \frac{\partial z}{\partial s} = \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial s} + \frac{\partial u}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial s} = u_x b + u_t a. \quad (31)$$

Entretanto, quando a solução é dada apenas localmente, nem sempre será possível realizar esta inversão.

Encontrando as curvas características para a equação de Burgers com dado inicial $u(x, 0) = u_0(x)$, obtém-se

$$\frac{\partial t}{\partial s} = 1, \quad \frac{\partial x}{\partial s} = z, \quad \frac{\partial z}{\partial s} = 0, \quad (32)$$

com condições iniciais $t(0, y) = 0, x(0, y) = y, z(s, y) = u_0(y)$. Integrando as EDOs

$$t(s, y) = s, x(s, y) = y + sz = y + su_0(\eta), z(s, y) = u_0(y). \quad (33)$$

Pode-se escrever isto como

$$x = y + u_0(y)t, \quad (34)$$

resolvendo em termos de $y = y(x, t)$, e utilizando y para obter $u(x, t) = z(s, y) = u_0(y(x, t))$, tem-se a seguinte relação implícita

$$u(x, t) = u_0(x - u(x, t)t). \quad (35)$$

Dado um ponto (x, t) , pode-se determinar a solução $u = u(x, t)$ pela equação 35. Diferenciando a equação 34, encontra-se

$$\frac{\partial x}{\partial y} = 1 + tu'_0(y). \quad (36)$$

Note que se a função não é estritamente crescente, i.e., existe $u'_0(x) < 0$, a solução por características só pode ser encontrada para $t < t^* = -1/u'_0(x)$. O resultado pode ser generalizado para todas as funções de fluxo convexas.

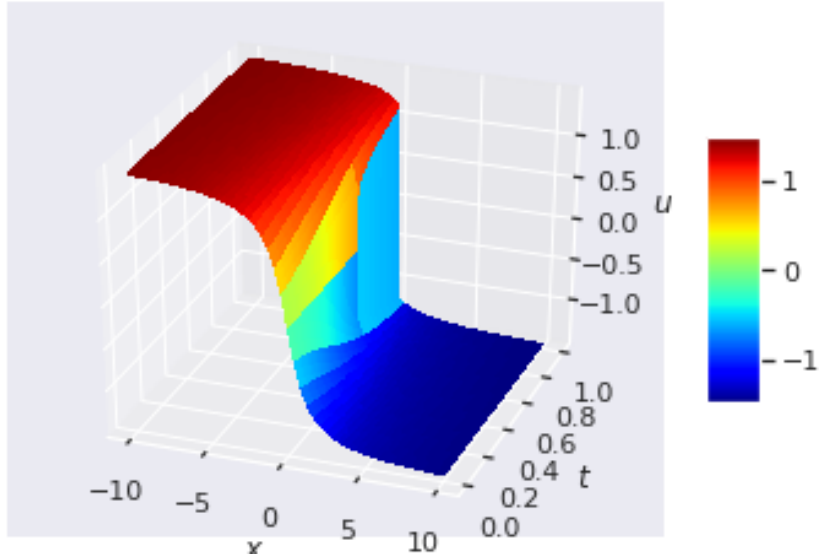


Figure 1: Solução da equação de Burgers' inviscida para $u_0 = -\arctan(x)$.

3.1.2 Condição de Entropia

O objetivo de obter soluções $u = u(x, t)$ na forma fraca, i.e., no sentido distribucional, permite não assumir explicitamente propriedades de continuidade para f . Assim, precisa-se apenas assumir suavidade suficiente para que as seguintes demonstrações façam sentido. Além disto, é bem conhecido que as soluções fracas só recuperem a unicidade com a imposição da entropia de Khruzkov [5].

Partindo da ideia que problemas físicos apresentam alguma difusão, entende-se que as leis de conservação hiperbólicas representam um modelo limite regularizado da seguinte equação

$$u_t^\epsilon + f(u^\epsilon)_x = \epsilon u_{xx}^\epsilon, \quad (37)$$

quando $\epsilon \rightarrow 0^+$. Para que a equação esteja bem posta, ϵ precisa ser não negativo. Então, é imposto que a solução distribucional precisa ser solução limite para a equação 37 quando o termo viscoso desaparece.

Escolhendo uma função convexa $\eta = \eta(u)$ e uma função de teste não negativa $\phi \in C_0^\infty(\mathbb{R} \times (0, \infty))$. Logo, buscando a forma integral da lei de conservação

$$\begin{aligned}
0 &= \int \int (u_t + f(u)_x - \epsilon u_{xx}) \eta' \phi dx dt \\
&= \int \int \eta' u_t \phi dx dt + \int \int f' \eta' u_x \phi dx dt - \epsilon \int \int \eta' u_{xx} \phi dx dt \\
&= \int \int \eta_t \phi dx dt + \int \int q' u_x \phi dx dt - \epsilon \int \int (\eta_{xx} - \eta'' u_x^2) \phi dx dt \\
&= \int \int \eta \phi_t dx dt + \int \int q \phi_x dx dt - \epsilon \int \int \eta \phi_{xx} dx dt + \int \int \eta'' u_x^2 \phi dx dt \\
&\geq \int \int (\eta \phi_t + q \phi_x - \epsilon \eta \phi_{xx}) dx dt,
\end{aligned} \tag{38}$$

em que se define q como

$$\int \int (\eta \phi_t + q \phi_x) dx dt \geq 0 \tag{39}$$

e, subsequentemente usa-se a convexidade de η , i.e., $\eta'' \geq 0$, para remover o termo

$$\epsilon \int \int \eta''(u^\epsilon) (u_x^\epsilon)^2 \phi dx dt. \tag{40}$$

Note que este termo é problemático, já que buscamos soluções fracas de u . E, para que a desigualdade seja satisfeita para $\epsilon \rightarrow 0$, tem-se

$$\int \int (\eta(u) \phi_t + q(u) \phi_x) dx dt \geq 0. \tag{41}$$

No caso particular, considerando

$$\eta(u) = [(u - k)^2 + \delta^2]^{1/2}, \quad \delta > 0 \tag{42}$$

para alguma constante k . Tirando o limite de $\delta \rightarrow 0$, obtém-se

$$\eta(u) = |u - k|, \tag{43}$$

e

$$q(u) = \text{sign}(u - k)(f(u) - f(k)). \tag{44}$$

Sendo a função sign definida como

$$\text{sign}(x) = \begin{cases} 1 & x > 0, \\ -1 & x < 0, \\ 0 & x = 0. \end{cases} \quad (45)$$

Pode-se visualizar o limite de η no gráfico.

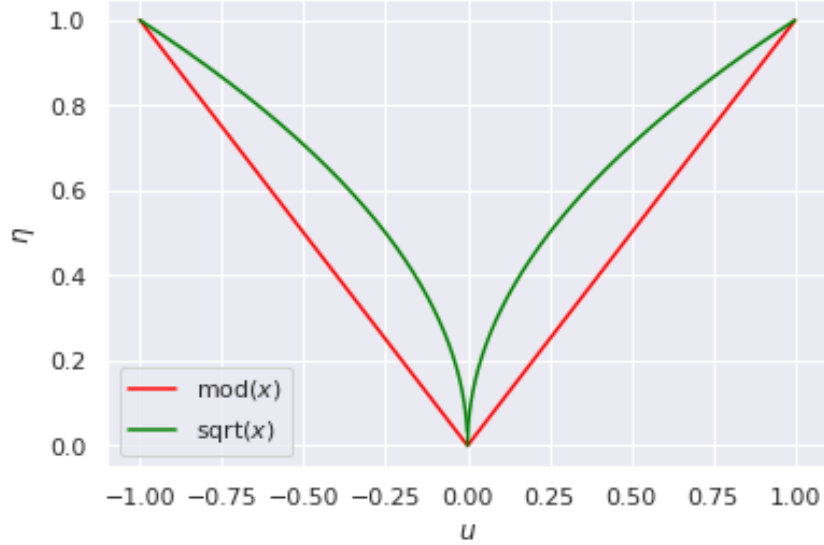


Figure 2: Função η com $c = 0$.

Portanto, uma função é solução entrópica de Kruzhkov se a desigualdade

$$\int \int (|u - k| \phi_t + \text{sign}(u - k)(f(u) - f(k)) \phi_x) dx dt \geq 0 \quad (46)$$

é satisfeita para todas as constantes $k \in \mathbb{R}$.

Estendendo para o caso com soluções no intervalo $[0, T]$, e utilizando funções de teste não negativas $\phi \in C_0^\infty(\mathbb{R} \times [0, T])$, obtém-se

$$\begin{aligned} & \int_0^T \int [|u - k| \phi_t + \text{sign}(u - k)(f(u) - f(k)) \phi_x] dx dt \\ & - \int |u(x, T) - k| \phi(x, T) dx + \int |u_0(x) - k| \phi(x, 0) dx \geq 0 \end{aligned} \quad (47)$$

para todo $k \in \mathbb{R}$.

Assim, a entropia garante a unicidade de soluções fracas para o caso escalar.

Também é possível observar que, para soluções suficientemente regulares, a entropia de Kruzhkov se torna equivalente as entropias da onda viajante e entropia de Oleinik. Portanto, nestes casos pode-se escolher qual entropia é mais conveniente.

3.1.3 Compacidade

A partir desta definição de solução entrópica, i.e., uma solução fraca que satisfaz a condição de entropia de Kruzhkov, pode-se provar a compacidade das soluções. Sejam $f \in C^1$ e $u_0 \in L^\infty \cap L^1$, então existe uma solução entrópica única de 15 e se $\|u_0\|_{TV} < \infty$ então u satisfaz as seguintes relações

$$\|u(t)\|_{L^\infty} \leq \|u_0\|_{L^\infty}, \quad (48)$$

$$\|u(t)\|_{BV} \leq \|u_0\|_{BV}. \quad (49)$$

$$\|u(t) - u(s)\|_{L^1} \leq |t - s| M \|u_0\|_{BV}, \quad (50)$$

com $M = M(u_0) = \max_{\text{ess inf}_x u_0(x) \leq u \leq \text{ess sup}_x u_0(x)} |f'(u)|$.

As demonstrações de cada propriedade se encontram em [4]. A primeira, garante que a aproximação é uniformemente limitada, dado que o esquema será uma combinação convexa de seus pontos, então nenhum mínimo ou máximo é introduzido para além da condição de valor inicial. A segunda, estima a variação total de u particionado pela norma BV , ver os preliminares matemáticos. E, por fim, a terceira inequação garante a continuidade em L^1 no tempo. Com isto, leva a convergência de $u_{\Delta x} \rightarrow u$ quando $\Delta x \rightarrow 0$.

3.1.4 Problemas de Riemann

Em 1859, o matemático alemão Bernhard Riemann introduziu o problema do tubo de choque no contexto de dinâmica de gases. Ele estudou a situação de um tubo cilíndrico preenchido com gás, inicialmente dividido ao meio por uma membrana impermeável. O gás tem maior densidade e pressão em uma das metades do tubo, com

velocidade nula em todo lugar. No tempo $t = 0$, a membrana é instantaneamente retirada e o gás pode se mover livremente. Assumindo um fluxo uniforme, a variação será apenas unidimensional no sentido do lado do tubo com menos pressão.

Ao analisar a estrutura de propagação deste fluxo pode-se chegar a três tipos de ondas diferentes, como mostra na Figura 3. No sentido de menor pressão a onda de choque se propaga, aumentando os valores de pressão e densidade de forma descontínua. Seguido pela descontinuidade de contato, em que a densidade é descontínua mas a velocidade de pressão são constantes. Por fim, no sentido oposto, com todas as variáveis de estado contínuas, a onda de rarefação se propaga com transição suave. Esta onda é chamada de rarefação pois a densidade do gás diminui conforme ela se propaga, intuitivamente o deixando “mais rarefeito”.

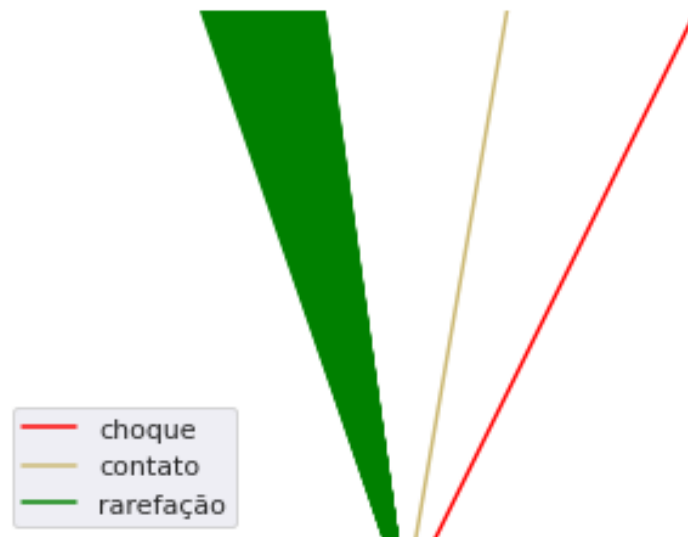


Figure 3: Estrutura da onda no plano $x - t$.

É de grande interesse estudar o comportamento das ondas de choque e rarefação isoladamente, e isto é possível através da condição inicial de Riemann. Seja um dado inicial para a equação de Burgers’ constante por partes com apenas uma descontinuidade, i.e.

$$u(x, 0) = \begin{cases} u_l, & x < 0, \\ u_r, & x > 0. \end{cases} \quad (51)$$

A forma da solução dependerá da relação entre u_l e u_r .

Para o caso em que $u_l > u_r$, a solução fraca será única

$$u(x, t) = \begin{cases} u_l, & x < st, \\ u_r, & x > st, \end{cases} \quad (52)$$

com

$$s = \frac{(u_l + u_r)}{2}. \quad (53)$$

sendo a velocidade do choque, ou seja, a velocidade com que a descontinuidade se propaga.

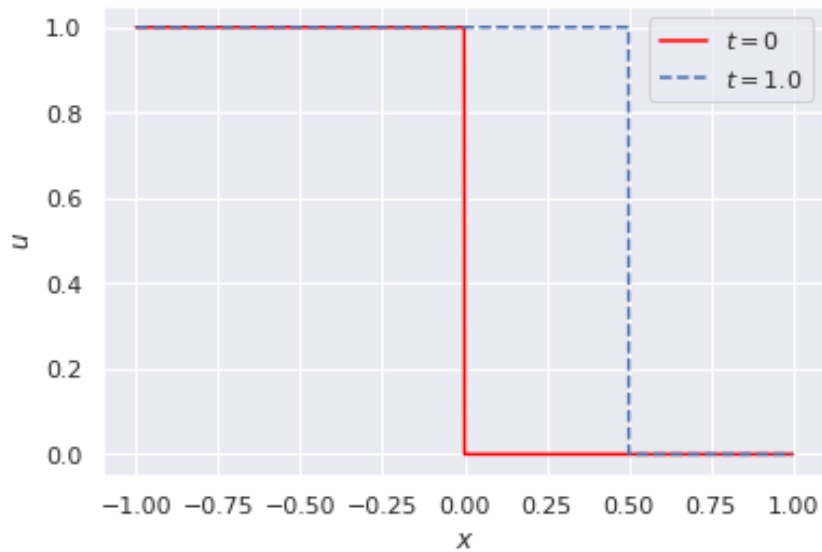


Figure 4: Onda de choque se propagando.

Para o caso em que $u_l < u_r$, existem infinitas soluções fracas em que a descontinuidade se propaga com velocidade s . Porém, estas não são estáveis em perturbações e também não representam a solução com viscosidade limite. O caso de solução generalizada é a onda de rarefação

$$u(x, t) = \begin{cases} u_l, & x < u_l t, \\ x/t, & u_l t \leq x \leq u_r t, \\ u_r, & x > u_r t. \end{cases} \quad (54)$$

A velocidade do choque será dada pela própria conservação. Para um fluxo $f(u)$ arbitrário a seguinte relação é válida

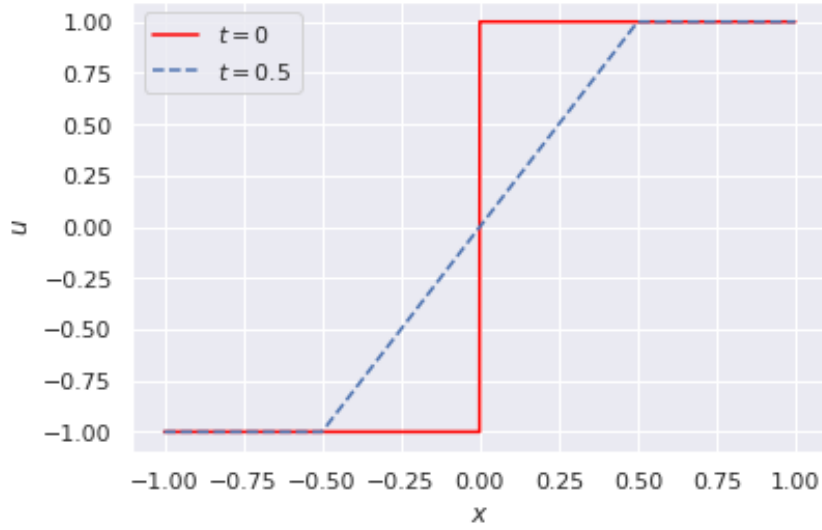


Figure 5: Onda de rarefação se propagando.

$$f(u_l) - f(u_r) = s(u_l - u_r), \quad (55)$$

para problemas escalares

$$s = \frac{f(u_l) - f(u_r)}{(u_l - u_r)} = \frac{[f]}{[u]}. \quad (56)$$

Esta, é conhecida como a condição de salto de Rankine-Hugoniot. Note que $[\cdot]$ indica o salto de alguma quantidade ao longo do choque, sendo qualquer salto válido.

3.2 Redes Neurais

3.2.1 Multi Layer Perceptron

Seja $\mathcal{N}^m : \mathbb{R}^{d_0} \rightarrow \mathbb{R}^{d_m}$ o modelo de uma rede neural totalmente conectada criada para representar a solução de um problema com m camadas e d_k neurônios na k -ésima camada, em que a camada de entrada tem d_0 e a de saída d_m neurônios. Para qualquer $1 \leq k \leq m$, a k -ésima camada de saída é definida como

$$C_k(z_k) = W_k z_k + b_k, \quad \text{para } W_k \in \mathbb{R}^{d_{k+1} \times d_k}, z_k \in \mathbb{R}^{d_k}, b_k \in \mathbb{R}^{d_{k+1}}, \quad (57)$$

onde z_k , W_k e b_k é a entrada, pesos, e bias, respectivamente. Seja $\Theta = \{W_k, b_k\} \in \mathcal{V}$ a coleção de todos os parâmetros treináveis, com \mathcal{V} sendo o espaço dos parâmetros, então, a saída da rede neural pode ser escrita como

$$u_{\Theta}(z_0) = C_m \circ \sigma \circ C_{m-1} \dots \circ \sigma \circ C_2 \circ \sigma \circ C_1(z_0). \quad (58)$$

Aqui, \circ se refere à composição de funções e σ é uma função mensurável $\sigma : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ não linear, chamada de função de ativação. Note que as $m - 1$ camadas da rede neural são chamadas de camadas escondidas, e, se $m \geq 3$, u_{θ} é chamada de rede neural profunda.

O teorema da aproximação universal é um resultado central que justifica a capacidade das redes neurais serem utilizadas na prática. Ele garante que qualquer função real contínua definida em um conjunto compacto pode ser aproximada arbitrariamente por uma rede neural com uma camada escondida. Este resultado foi apresentado inicialmente em 1989 por Cybenko [6] para funções de ativação sigmoide, e, posteriormente, generalizadas para qualquer função de ativação limitada e não-constante por Hornik [8].

Uma função é dita sigmoide se

$$\sigma(x) = \begin{cases} 1, & x \rightarrow +\infty, \\ 0 \text{ ou } -1, & x \rightarrow -\infty. \end{cases} \quad (59)$$

Note que tanto

$$\text{sigmoid}(x) = \frac{1}{1 + \exp(-x)}, \quad (60)$$

como

$$\tanh(x) = \frac{\exp(x) - \exp(-x)}{\exp(x) + \exp(-x)}, \quad (61)$$

são sigmoideais. Além disso, seja I_n o cubo unitário n -dimensional, i.e., $[0, 1]^n$, o espaço de todas as funções contínuas em I_n é denotado por $C(I_n)$. Então, uma função σ é dita discriminatória se, para uma medida $\mu \in M(I_n)$,

$$\int_{I_n} \sigma(Wx + b) d\mu = 0, \quad (62)$$

para todo $W \in \mathbb{R}^n$ e $b \in \mathbb{R}$ implica que $\mu = 0$.

Pelo teorema da aproximação universal, seja σ uma função contínua discriminatória. Então, a soma finita na forma

$$G(x) = \sum_{j=1}^N \sigma(Wx + b), \quad (63)$$

é densa em $C(I_n)$. Em outras palavras, dado quaisquer $f \in C(I_n)$ e $\epsilon > 0$, existe uma soma, $G(x)$, da forma acima, para a qual

$$|G(x) - f(x)| < \epsilon, \quad \forall x \in I_n. \quad (64)$$

A prova deste teorema é feita por contradição. Seja $S \cap C(I_n)$ o conjunto das funções da forma de $G(x)$ como em 63. Claramente S é um sub-espço linear de $C(I_n)$. Afirma-se que o fecho de S é todo $C(I_n)$.

Assumindo que o fecho de S não é todo $C(I_n)$, então o fecho de S , diga-se R , é um sub-espço fechado de $C(I_n)$. Pelo teorema de Hahn-Banach, existe um funcional linear limitado em $C(I_n)$, diga-se L , com a propriedade que $L \neq 0$ mas $L(R) = L(S) = 0$.

Pelo teorema de representação de Riesz, este funcional limitado, L , é da forma

$$L(h) = \int_{I_n} h(x) d\mu(x), \quad (65)$$

para algum $\mu \in M(I_n)$ e para todo $h \in C(I_n)$. Em particular, como $\sigma(Wx + b)$ está em R para todo W e b , tem-se obrigatoriamente que

$$\int_{I_n} \sigma(Wx + b) d\mu(x) = 0, \quad (66)$$

para todo W e b .

Porém, assumiu-se que σ era discriminatória, de modo que esta condição implica $\mu = 0$, contradizendo a suposição. Logo, o sub-espço S é denso em $C(I_n)$.

Recentemente, muitos pesquisadores também estenderam os resultados de aproximação de redes neurais para funções de ativação lineares por partes [7], sendo seu principal exemplo a unidade linear retificada,

$$\text{ReLU}(x) = \max(0, x). \quad (67)$$

3.2.2 PINN Clássico

Dado uma equação diferencial parcial na forma

$$u_t + \mathcal{D}(u) = 0, \quad (x, y) \in \Omega, t \in [0, T], \quad (68)$$

onde $\mathcal{D}(\cdot)$ é um operador diferencial e $u(x, y, t)$ é a solução desejada. Então, constrói-se o método PINN (em sua forma forte) baseado na otimização de uma rede neural sob a restrição de satisfazer o funcional da EDP e sua condição de valor inicial.

Assim, duas funções de perda quadrática são definidas sobre f , u e a condição de valor inicial u_0 :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_f(u) &= \frac{1}{N_f} \sum_{i=1}^{N_f} |f(x_f^i, y_f^i, t_f^i)|^2, \\ \mathcal{L}_{u_0}(u, u_0) &= \frac{1}{N_u} \sum_{i=1}^{N_u} |u(x_u^i, y_u^i, t_u^i) - u_0^i|^2, \end{aligned} \quad (69)$$

em que $\{x_f^i, y_f^i, t_f^i\}_{i=1}^{N_f}$ corresponde aos pontos de colocação sobre f , enquanto $\{x_u^i, y_u^i, t_u^i, u_0^i\}_{i=1}^{N_u}$ corresponde aos pontos de valores iniciais pré-definidos, com f sendo a parte esquerda de cada EDP, i.e., $f := u_t + \mathcal{D}(u)$.

Finalmente, a solução $u(x, y, t)$ é aproximada minimizando-se a soma de ambas as funções objetivo ao mesmo tempo, ou seja,

$$u(x, y, t) \approx \arg \min[\mathcal{L}_f(u) + \mathcal{L}_{u_0}(u, u_0)]. \quad (70)$$

Podemos ver uma ilustração esquemática representando a arquitetura empregada na Figura 6.

A arquitetura PINN aqui proposta é composta por 4 camadas ocultas, cada uma com 20 neurônios e uma tangente hiperbólica utilizada como função de ativação. A função de perda é definida na forma forte, seguindo a mesma abordagem originalmente usada em [22]. Em contraste, aqui não temos uma condição de contorno explícita e a rede

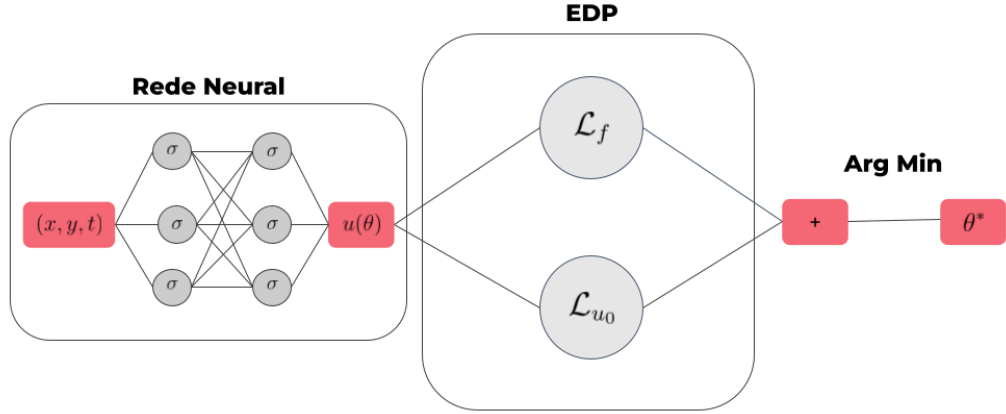


Figure 6: Ilustração da abordagem *physics-informed deep learning*

neural é otimizada apenas sobre as condições iniciais, ou seja, um problema de Cauchy.

Dado que a função de perda é não-linear e não-convexa, o processo de encontrar um mínimo global no método não supervisionado é crucial. Assim, para a escolha do otimizador, optou-se pela utilização do *Adaptive moment estimation* (Adam), pois é bem estabelecida sua capacidade de não cair em mínimos locais dado seu comportamento de otimização pendular [9]. Esta é uma modificação em relação à proposta inicial utilizada em [22], em que se usa L-BFGS-B.

Os parâmetros m_t e v_t correspondem ao primeiro e segundo momento do pêndulo, enquanto β_1 e β_2 são suas respectivas taxas de decaimento exponencial,

$$m_t = \beta_1 m_{t-1} + (1 - \beta_1) g_t, \quad (71)$$

$$v_t = \beta_2 v_{t-1} + (1 - \beta_2) g_t^2. \quad (72)$$

A correção do viés é feita posteriormente por

$$\hat{m}_t = \frac{m_t}{1 - \beta_1^t}, \quad (73)$$

$$\hat{v}_t = \frac{v_t}{1 - \beta_2^t}. \quad (74)$$

e, por fim, os parâmetros θ são atualizados por

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \frac{\eta}{\sqrt{\hat{v}_t} + \epsilon} \hat{m}_t. \quad (75)$$

Quanto aos hiper-parâmetros, utilizaram-se os valores padrão de taxa de aprendizado 0,001, $\beta_1 = 0,9$, $\beta_2 = 0,999$ e $\epsilon = 10^{-8}$. Estes foram empiricamente encontrados para ser valores adequados em nossos experimentos.

Para a distribuição dos pontos de colocação empregamos amostragem em hipercubo latino, seguindo o procedimento anteriormente adotado em [22]. Nos testes, o número de pontos de colocação para os valores iniciais foi fixado em $N_u = 256$.

3.2.3 PINN Weak

O método PINN em sua formulação fraca busca soluções no sentido distribucional. Sendo assim, para $u \in (L^\infty \cap L^1)(D \times [0, T])$, $\phi \in W_0^{1,\infty}(D \times [0, T])$ e $c \in \mathbb{R}$, então o resíduo entrópico de Kruzhkov é

$$\mathcal{L}(u, \phi, c) = - \int_D \int_{[0,T]} (|u(x, t) - c| \partial_t \phi(x, t) + Q[u(x, t); c] \partial_x \phi(x, t)) dx dt. \quad (76)$$

com

$$Q : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R} : (u, c) \rightarrow \text{sgn}(u - c)(f(u) - f(c)). \quad (77)$$

Note que se u é uma solução entrópica, então $\mathcal{L}(u, \phi, c) \leq 0$. Isto sugere a resolução do problema de otimização min-max para encontrar

$$\theta^* := \underset{\theta}{\text{argmin}} \max_{\phi} (\mathcal{L}(u_\theta, \phi, c) + \lambda \|\mathcal{L}_{u_0}(u_\theta, u_0)\|^2). \quad (78)$$

com \mathcal{L}_{u_0} definido como

$$\mathcal{L}_{u_0}(u, u_0) = \frac{1}{N_u} \sum_{i=1}^{N_u} |u(x^i, t^i) - u_0^i|^2. \quad (79)$$

A rede neural associada com u_θ é definida como a forma fraca do PINN, ou wPINN, que obtém soluções entrópicas para u .

Observe que o espaço de Sobolev $W_0^{1,\infty}$ associado à função de teste precisa ser substituído na prática por uma aproximação finita. Uma possibilidade é utilizar polinômios ortogonais, como os de Legendre. Esta escolha leva ao que usualmente se conhece por PINN variacional. Porém, neste trabalho, utilizou-se a propriedade de aproximação universal de redes neurais para aproximar tal espaço, i.e., ϕ é uma rede neural em um compacto. Assim o problema de maximização está associado a ϕ e, o de minimização, associado a u .

A família das funções de teste consideradas no estudo são parametrizadas tal que $\phi_\eta(x, t) = \omega(x, t)\xi_\eta(x, t)$. Aqui, $\omega : D \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função de corte que satisfaz as seguintes propriedades:

$$\omega(x) = \begin{cases} 1, & x \in D_\zeta, \\ 0, & x \in \partial D \end{cases} \quad (80)$$

com $D_\zeta = \{x \in D : \text{dist}(x, \partial D) < \zeta\}$, e $\xi_\eta(x, t)$ é uma rede neural com parâmetros η . A escolha da função de corte garante o suporte compacto da função de teste.

Para o cálculo numérico da integral presente no funcional fraco utilizou-se a aproximação de Monte Carlo da semi-norma H^1 de ϕ_η , mantendo a derivada parcial temporal na rede neural, obtendo

$$\mathcal{L}_f(u_\theta) = \frac{(\text{ReLU}(\sum_{i=1}^{N_f} \phi_\eta \partial_t |u_\theta - c| - Q \partial_x \phi_\eta))^2}{\sum_{i=1}^{N_f} \partial_x \phi_\eta^2}. \quad (81)$$

Assim, o algoritmo para wPINN pode ser sintetizado no pseudo-código que segue abaixo. Sua implementação no presente trabalho foi feita em Python3 e se baseia na modificação do código livre disponível em <https://github.com/mroberto166/wpinn>.

Algorithm 1 Treinamento wPINNs

Resultado: θ^*, η^*, c^* ;
Inicializar as redes neurais $u_\theta, \phi_\eta : \mathcal{D} \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ e C ;
FOR $e = 1, \dots, N$ **DO**
 FOR $k = 1, \dots, N_{\max}$ **DO**
 Computar $\max J_{\max}(\theta, \eta, c_i)$;
 Atualizar $\eta \leftarrow \eta + \tau_\eta \nabla J_{\max}$;
 END
 FOR $k = 1, \dots, N_{\min}$ **DO**
 Computar $\max J_{\max}(\theta, \eta, c_i)$;
 Atualizar $\theta \leftarrow \theta + \tau_\theta \nabla (\lambda J_{\max} + J_u)$;
 END
END

4 Experimentos Numéricos

4.1 PINN Clássico

Para a resolução das equações na forma forte, concentrou-se na equação de advecção linear bidimensional com condição inicial periódica e na equação invíscida não linear bidimensional de Burgers com condição de Riemann.

Na equação de advecção linear bidimensional temos

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} = 0, \quad (x, y, t) \in [0, 1]^2 \times [0, 1], \quad (82)$$

com condição inicial senoidal periódica

$$u(x, y, 0) = \sin^2(\pi x) \sin^2(\pi y), \quad (83)$$

e solução exata

$$u(x, y, t) = \sin^2(\pi(x - t)) \sin^2(\pi(y - t)). \quad (84)$$

Na equação invíscida não linear bidimensional de Burgers temos

$$u_t + \left(\frac{u^2}{2}\right)_x + \left(\frac{u^2}{2}\right)_y = 0, \quad (85)$$

com o dado de Riemann dado por

$$u(x, y, 0) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ -1, & x < 0, \end{cases} \quad (86)$$

em que a solução é uma onda de rarefação evoluindo no domínio $(x, y, t) \in [-6, 6] \times [-1.5, 1.5] \times [0, 2.5]$. O salto é definido de tal forma que a mudança no sinal da velocidade da onda ocorre quando $x = 0$; a condição inicial do problema de Riemann

$$u(x, y, 0) = \begin{cases} 2, & x < 0.25, y < 0.25, \\ 3, & x > 0.25, y > 0.25, \\ 1, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (87)$$

no domínio $(x, y, t) \in [0, 1]^2 \times [0, 1/12]$, e a condição inicial oblíqua de Riemann

$$u(x, y, 0) = \begin{cases} -1.0, & x > 0.5, y > 0.5, \\ -0.2, & x < 0.5, y > 0.5, \\ +0.5, & x < 0.5, y < 0.5, \\ +0.8 & x > 0.5, y < 0.5, \end{cases} \quad (88)$$

no domínio $(x, y, t) \in [0, 1]^2 \times [0, 0.5]$. Em cada problema de Riemann, a predominância de rarefação ou ondas de choque é dada pelos maiores saltos na condição inicial. Isso significa que, para a condição inicial dada pela Equação (87) a rarefação é predominante. Em contraste, para o caso oblíquo, dado pela Equação (88), choque é o fenômeno predominante.

A seguir, apresentamos as soluções para os problemas hiperbólicos investigados obtidas pelo modelo de rede neural. Gostaríamos de salientar que nenhuma comparação é feita aqui com a abordagem mais geral em [10] já que o foco principal do trabalho atual é um estudo computacional PINN para um modelo escalar 2D invíscido de Burgers com alguns dados específicos de Riemann. Usamos apenas o método descrito em [10] para produzir as soluções pertinentes corretas de entropia fraca para a equação 2D escalar invíscida específica de Burgers, juntamente com os dados iniciais sob investigação.

Um minucioso processo de ajuste fino foi explorado para os modelos, al-

cançando uma arquitetura ótima com 4 camadas ocultas, 20 neurônios em cada uma e $N_f = 4 \cdot 10^6$ pontos de colocação para o funcional. Para ilustrar o efeito dos hiperparâmetros, mostramos os resultados para a equação de Burgers invíscidos com uma onda de rarefação na solução conforme apresentado nos gráficos da Figura 8 até a Figura 10, mas o mesmo aconteceu para todos os casos. Priorizamos maximizar o número de pontos de treinamento aplicando ao funcional da EDP, inspirado por resultados recentes em [14]. O problema de determinar a relação ótima entre o erro e os valores desses parâmetros não é trivial.

Para o caso de advecção linear bidimensional (veja a Figura 7), 15000 épocas foram suficientes para obter resultados promissores. Em ambos os modelos, invíscido e aumentado, as soluções são semelhantes. Destacamos também que os modelos não mostraram efeitos espúrios como difusão numérica excessiva como é a situação típica para o conhecido esquema de Lax-Friedrichs.

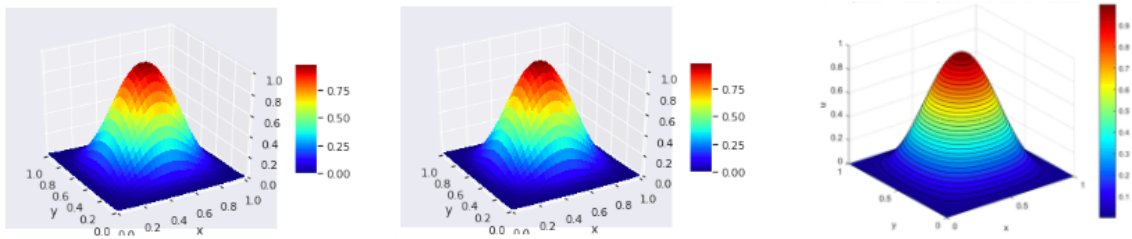


Figure 7: Solução de rede neural para equação de advecção linear bidimensional com condição inicial periódica. A arquitetura empregada foi composta por 4 camadas ocultas, 20 neurônios cada, $N_f = 4 \cdot 10^6$ e 15.000 épocas. Esquerda: sem viscosidade. Meio: $2,5 \cdot 10^{-3}$ viscosidade. Direita: Solução SDLE para equação de advecção linear bidimensional com condição inicial periódica.

Na Figura 10 o modelo de rede neural produz aproximações qualitativamente corretas como esperado da literatura clássica. Embora a equação de Burgers invíscida não seja linear, para esses casos, apenas 5000 épocas foram necessárias para um bom resultado, em contraste com o problema de advecção linear. Um aspecto muito importante a ser analisado em problemas com onda de rarefação é a presença de uma “linha sônica” no sentido de um ponto sônico (*glitch effect*) como discutido, por exemplo, na obra [16]. Esse é um efeito não físico gerado pela mudança no sinal da velocidade da onda, e está presente em alguns esquemas numéricos, como o esquema de Godunov; para mais detalhes veja [16] e Seção 3.2.3 em [29]. Nota-se que as redes neurais não apresentam esse efeito espúrio.

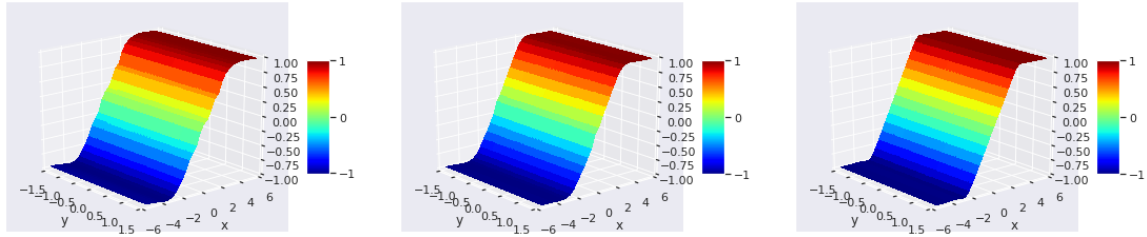


Figure 8: Solução de rede neural para equação bidimensional de Burgers invíscida com onda de rarefação, com $N_f = 10^4$ e 5.000 épocas. Esquerda: 2 camadas ocultas, 20 neurônios cada. Meio: 2 camadas ocultas, 40 neurônios cada. Direita: 4 camadas ocultas, 20 neurônios cada.

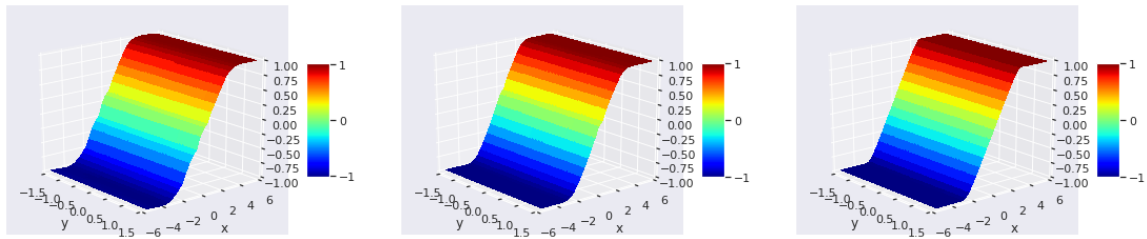


Figure 9: Solução de rede neural para equação bidimensional de Burgers invíscida com onda de rarefação, com $N_f = 10^4$, $2,5 \cdot 10^{-3}$ viscosidade e 5.000 épocas. Esquerda: 2 camadas ocultas, 20 neurônios cada. Meio: 2 camadas ocultas, 40 neurônios cada. Direita: 4 camadas ocultas, 20 neurônios cada.

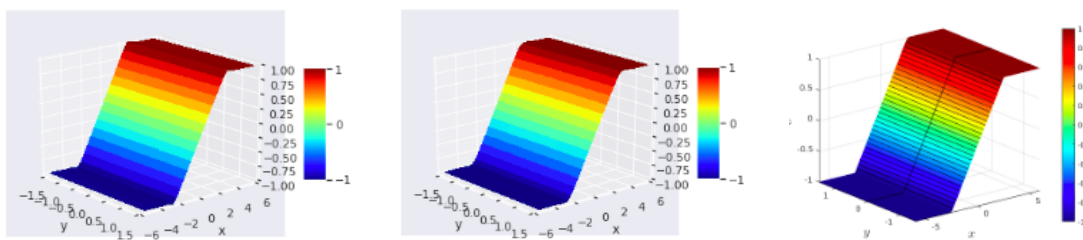


Figure 10: Solução de rede neural para equação bidimensional de Burgers invíscida com onda de rarefação. A arquitetura empregada foi composta por 4 camadas ocultas, 20 neurônios cada, $N_f = 4 \cdot 10^6$ e 5.000 épocas. Esquerda: Sem viscosidade. Meio: $2,5 \cdot 10^{-3}$ viscosidade. Direita: Solução SDLE para equação bidimensional de Burgers invíscidos com ventilador de rarefação.

No problema de Riemann em duas dimensões, as ondas de choque e rarefação interagem durante a propagação, complexificando a física a ser capturada pelo modelo PINN. É importante afirmar que, neste caso, a onda de rarefação é *predominante* sobre o choque. Para ambas as abordagens, invíscida ($\epsilon = 0$) e aumentada ($\epsilon > 0$), precisávamos aumentar o número de épocas de 15.000 para 30.000. No entanto, a rede neural apresenta dificuldades em aproximar a parte com choque conforme mostrado na Figura 11. A introdução do termo difusivo na EDP, na Figura 12, reduziu a altura do nível de choque para mais perto de 2, que é a solução correta esperada da literatura, mas, como consequência, “suaviza ” a descontinuidade, também como esperado.

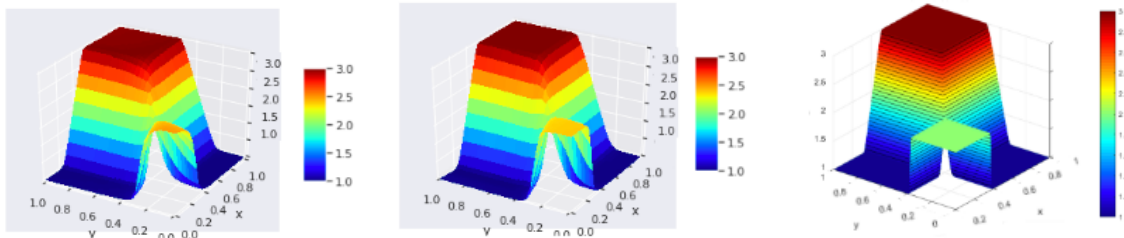


Figure 11: Solução de rede neural para a equação bidimensional de Burgers invíscida com condição de Riemann. A arquitetura empregada foi composta por 4 camadas ocultas, 20 neurônios cada, $N_f = 4 \cdot 10^6$. Esquerda: épocas de 15.000. Médio: épocas de 30.000. Direita: Solução SDLE para equação bidimensional de Burgers invíscida com condição de Riemann.

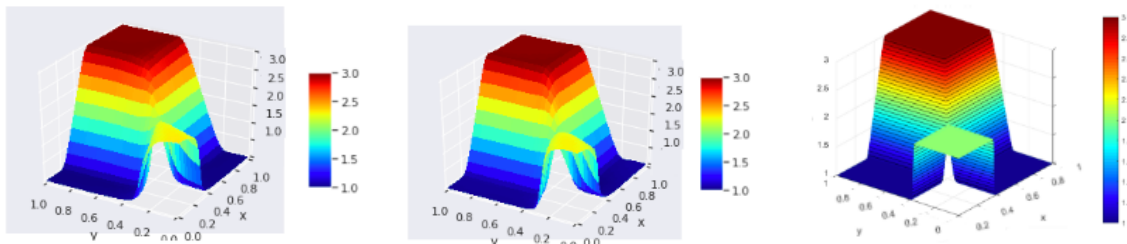


Figure 12: Solução de rede neural para a equação bidimensional da equação de Burgers invíscida com condição de Riemann. A arquitetura empregada foi composta por 4 camadas ocultas, 20 neurônios cada, $N_f = 4 \cdot 10^6$, $2.5 \cdot 10^{-3}$ viscosidade. Esquerda: épocas de 15.000. Médio: épocas de 30.000. Direita: Solução SDLE para equação bidimensional de Burgers invíscida com condição de Riemann.

Outro caso dos problemas de Riemann é a *condição inicial do tipo oblíquo*, também contendo ondas de choque e rarefação, mas sendo o choque o *fenômeno não linear predominante*. Este problema potencializa as dificuldades do modelo já mostrado

para os problemas anteriores de Riemann. Investigamos as épocas de 15.000 e 30.000 e variamos o ϵ entre $2,5 \cdot 10^{-4}$ e $2,5 \cdot 10^{-3}$. Em particular, os resultados aumentados (ou seja, $\epsilon > 0$) se assemelham vagamente à solução desejada, na Figura 14. À medida que a viscosidade diminui vemos claramente a recuperação da solução invíscida, que não é entrópica para a abordagem proposta, veja a Figura 13.

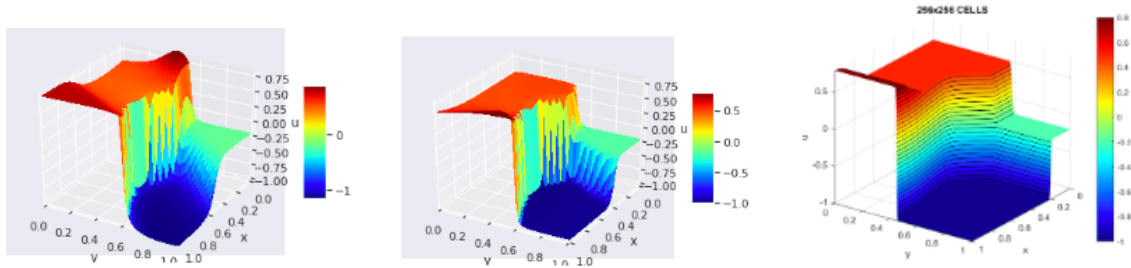


Figure 13: Solução de rede neural para a equação de Burgers invíscida bidimensional com condição de Riemann oblíqua. A arquitetura empregada foi composta por 4 camadas ocultas, 20 neurônios cada, $N_f = 4 \cdot 10^6$. Esquerda: épocas de 15.000. Médio: épocas de 30.000. Direita: Solução SDLE para equação bidimensional de Burgers invíscida com condição oblíqua de Riemann.

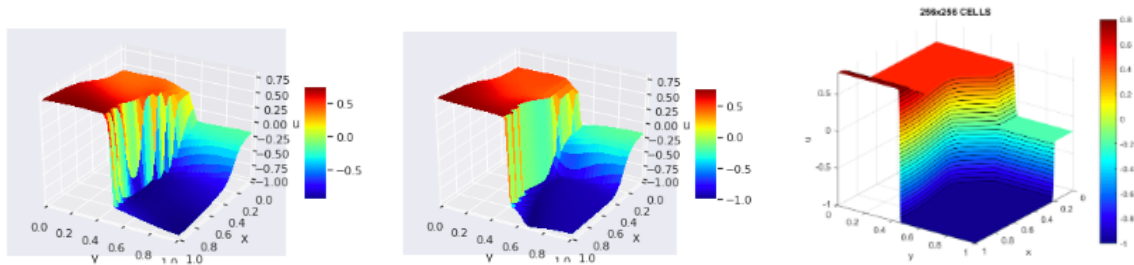


Figure 14: Solução de rede neural para a equação de Burgers invíscida bidimensional com condição de Riemann oblíqua. A arquitetura empregada foi composta por 4 camadas ocultas, 20 neurônios cada, $N_f = 4 \cdot 10^6$ e 15.000 épocas. Esquerda: $2,5 \cdot 10^{-3}$ viscosidade. Meio: $2,5 \cdot 10^{-4}$ viscosidade. Direita: Solução SDLE para equação bidimensional de Burgers invíscida com condição oblíqua de Riemann.

Em geral, observamos pelos resultados que o modelo guiado pela física na forma forte investigado até aqui, e especialmente ajustado para tais condições desafiadoras, forneceu resultados promissores, especialmente na advecção linear e na equação de Burgers invíscida com onda de rarefação. Mais estudos são necessários para os problemas de Riemann, principalmente quando o choque é predominante.

4.2 PINN Weak

Para o caso do wPINN focamos nos seguintes problemas unidimensionais: no domínio $[-1, 1] \times [0, 1.0]$ e condição de valor inicial

$$u_0(x) = \begin{cases} 1, & x \leq 0, \\ 0, & x > 0. \end{cases} \quad (89)$$

o que resulta no choque em movimento com velocidade igual a 0.5. E com respectiva solução analítica dada por

$$u(x, t) = \begin{cases} 1, & x \leq t/2, \\ 0, & x > t/2. \end{cases} \quad (90)$$

E, no domínio $[-8, 8] \times [0, 8.0]$,

$$u_0(x) = \begin{cases} -1, & x \leq 0, \\ 1, & x > 0, \end{cases} \quad (91)$$

que representa a onda de rarefação. Sua solução exata é dada por,

$$u(x, t) = \begin{cases} -1, & x \leq -t, \\ x/t, & -t < x \leq t, \\ 1, & x > t. \end{cases} \quad (92)$$

Para o treinamento da wPINN é necessário realizar uma abordagem baseada em *ensemble*, ou seja, para cada configuração de hiper-parâmetros a rede neural é re-treinada buscando escolher a configuração que minimiza o funcional total. Assim, adotou-se para u : 6 camadas escondidas com 20 neurônios cada e 5000 épocas de treino; Já, para ϕ : 4 camadas escondidas com 10 neurônios cada e 5000 épocas. A função de ativação escolhida para ambas as redes foi a tanh. A implementação se baseou na modificação do código livre disponível em <https://github.com/mroberto166/wpinnns>.

A partir da Figura 15, observamos que a previsão média dos resultados aproxima com precisão tanto o choque em movimento, quanto a rarefação. Dada a não-

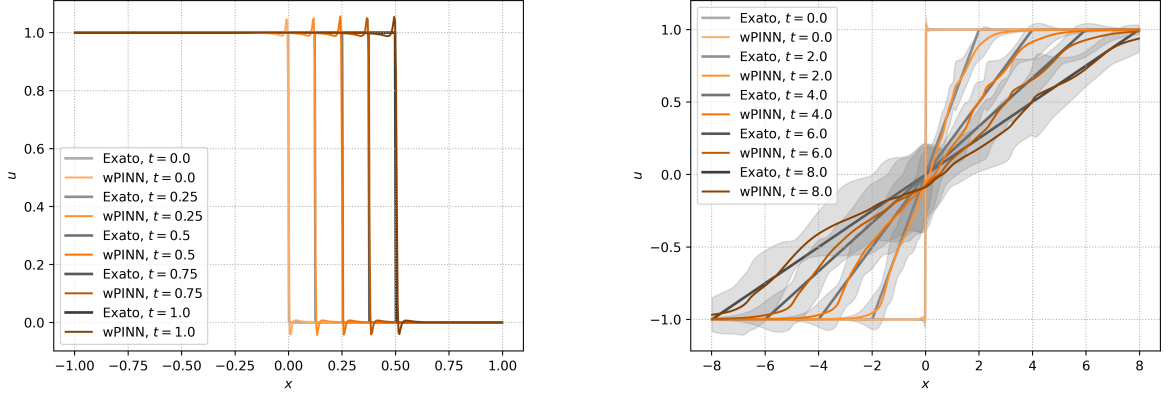


Figure 15: Solução de rede neural para a equação de Burgers invíscida unidimensional na forma fraca. Esquerda: Condição inicial de choque em movimento. Direita: Condição inicial de rarefação.

convexidade do problema de otimização min-max, nota-se uma variação nas previsões, provavelmente por estarem presos em mínimos locais. Além disso, no caso do choque, existe a presença de uma oscilação espúria ao redor da descontinuidade. Na rarefação, não há presença de ponto sônico de *glitch* [3] e as pequenas oscilações provavelmente podem ser resolvidas adicionando a norma BV no funcional a ser minimizado.

Estendendo os resultados obtidos em [2], os experimentos numéricos presentes neste trabalho simulam a propagação das ondas para tempos maiores. No caso do choque, passou de 0.4 para 1.0; e, na rarefação, de 0.45 para 8.0. Isto contribui para demonstrar a robustez da abordagem, mesmo para tempos mais longos. Ainda, a partir dos casos unidimensionais, vislumbra-se uma alternativa para contornar os problemas apresentados na seção anterior, potencialmente capturando corretamente os efeitos de interação entre ondas em duas dimensões.

4.3 Comparação das Abordagens

Ao comparar a formulação fraca do método PINN com sua versão clássica, adiciona-se a dificuldade do problema de otimização min-max, que é mais caro computacionalmente. No entanto, dado que PINNs convencionais podem falhar em aproximar com precisão soluções descontínuas de leis de conservação hiperbólicas, é imperativo usar wPINNs neste contexto. Futuramente pode-se explorar técnicas de otimização mais

avançadas para reduzir o tempo de treino e não cair em mínimos locais.

Uma das principais vantagens das abordagens de aprendizado de máquina para resolver equações diferenciais, como PINN clássico e forma fraca, é sua capacidade de, uma vez que a rede neural tenha sido treinada para uma amostragem (aleatória) do domínio da EDP, ser possível a inferência de soluções em relação a outros pontos com custo computacional praticamente zero. Além disso, pode-se também usar wPINNs dentro de uma estrutura de aprendizado de operadores guiados por física para aproximar o semigrupo do operador de solução subjacente.

5 Conclusão

Este trabalho apresentou uma aplicação computacional baseada na forma fraca de redes neurais fisicamente guiadas (wPINN) para resolver problemas hiperbólicos desafiadores em modelos de transporte unidimensionais. Mais especificamente, resolvemos a equação de Burgers invíscida para várias configurações dentro dos problemas de Riemann, que levam às soluções conhecidas com descontinuidades. Nossa rede foi ajustada experimentalmente de acordo com cada problema e foram observadas descobertas interessantes, com base no conhecimento estudado em [11; 1].

A abordagem baseada em aprendizado, que incorpora as propriedades físicas das equações governantes, supera os métodos do tipo exclusivamente orientados a dados. Já vislumbramos o desenvolvimento de um método guiado por EDPs aprimorado para melhorar os resultados insatisfatórios sendo aplicado para melhorar a simulação de problemas hiperbólicos em modelos de transporte. Em resumo, os resultados obtidos compartilham implicações práticas e teóricas. Em termos práticos, os resultados confirmam o potencial de um modelo de *deep learning* relativamente simples na solução de um intrincado problema numérico unidimensional. Em termos teóricos, isso também abre caminho para estudos formais e rigorosos sobre essas redes como métodos numéricos matematicamente válidos e eficazes.

References

- [1] Carniello R., Florindo J.B., Abreu E. A PINN computational study for a scalar 2D inviscid Burgers model with Riemann data. (Manuscrito de conferência em revisão).
- [2] De Ryck T., Mishra, S., Molinaro R. wPINNS: Weak Physics informed neural networks for approximating entropy solutions of hyperbolic conservation laws. Available at arXiv preprint: <https://arxiv.org/abs/2207.08483>, (2022).
- [3] Jean Renel François. A multidimensional semi-discrete Lagrangian-Eulerian scheme for scalar and systems of hyperbolic conservation laws with a positivity principle (Um esquema Lagrangiano-Euleriano semi-discreto multidimensional para leis de conservação hiperbólicas escalares e sistemas com um princípio de positividade), (2021). Tese (Doutorado em Matemática Aplicada) - Universidade Estadual de Campinas Inst. financiadora: Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior.
- [4] H. Holden and N. H. Risebro. Front tracking for hyperbolic conservation laws, volume 152. Springer, 2015.
- [5] Kruzhkov, S. N. First Order Quasilinear Equations in Several Independent Variables. Sbornik: Mathematics, Volume 10, Issue 2, pp. 217-243 (1970).
- [6] Cybenko, G. Approximation by superpositions of a sigmoidal function. Mathematics of Control, Signals and Systems 2:4, 2(4):303–314, (1989).
- [7] Yarotsky, D. Error bounds for approximations with deep ReLU networks. Neural Networks, 94:103–114, (2017).
- [8] Hornik, K. Approximation capabilities of multilayer feedforward networks. Neural Networks, 4(2):251–257, (1991).
- [9] Diederik P. Kingma, Jimmy Ba Adam: A Method for Stochastic Optimization. Available at arXiv preprint: <https://arxiv.org/abs/1412.6980>, (2017).
- [10] Abreu, E., François, J., Lambert, W. and Pérez, J. A semi-discrete Lagrangian–Eulerian scheme for hyperbolic-transport models. Journal of Scientific Computing, (2022). DOI <https://doi.org/10.1016/j.cam.2021.114011>.

- [11] Abreu, E. and Florindo, JB. A study on a feedforward neural network to solve partial differential equations in hyperbolic-transport problems. *International Conference on Computational Science*, pp. 398–411, (2021).
- [12] Shin, Y., Darbon, J. and Karniadakis, G.E. On the convergence of physics informed neural networks for linear second-order elliptic and parabolic type PDEs. *Communications in Computational Physics*, (2020). DOI 10.4208/cicp.OA-2020-0193.
- [13] Shin, Y., Zhang, Z. and Karniadakis, G.E. Error estimates of residual minimization using neural networks for linear equations. Available at arXiv preprint: 2010.08019, (2020).
- [14] Mishra, S. and Molinaro, R. Estimates on the generalization error of physics-informed neural networks for approximating a class of inverse problems for PDEs. *IMA Journal of Numerical Analysis*, (2021).
- [15] Alibaud, N., Andreianov, B. and Ouédraogo, A. Nonlocal dissipation measure and \mathcal{L}^1 kinetic theory for fractional conservation laws. *Communications in Partial Differential Equations*, **45**(9), pp. 1213–1251, (2020).
- [16] Tang, H. On the sonic point glitch. *Journal of Computational Physics*, **202**(2), pp. 507–532, (2005).
- [17] Brunton, S.L., Noack, B.R. and Koumoutsakos, P. Machine learning for fluid mechanics. *Annual Review of Fluid Mechanics*, **52**(1), pp. 477–508, (2020).
- [18] Chen, C., Seff, A., Kornhauser, A. and Xiao, J. Deep-Driving: Learning Affordance for Direct Perception in Autonomous Driving. *IEEE International Conference on Computer Vision*, pp. 2722–2730, (2015).
- [19] He, K., Zhang, X., Ren, S. and Sun, J. Deep Residual Learning for Image Recognition. *IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*, pp. 770–778, (2016).
- [20] Kepuska, V. and Bohouta, G. Next-Generation of Virtual Personal Assistants (Microsoft Cortana, Apple Siri, Amazon Alexa and Google Home). *IEEE 8TH Annual Computing and Communication Workshop and Conference*, pp. 99–103, (2018).

- [21] Litjens, G., Kooi, T., Bejnordi, B.E., Setio, A.A.A., Ciompi, F., Ghafoorian, M., van der Laak, J.A.W.M., van Ginneken, B. and Sanchez, C.I. A survey on deep learning in medical image analysis. *Medical Image Analysis*, **42**, pp. 60–88, (2017).
- [22] Raissi, M., Perdikaris, P. and Karniadakis, G. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, **378**, pp. 686–707, (2019).
- [23] Raissi, M., Yazdani, A., and Karniadakis, G. E. Hidden fluid mechanics: Learning velocity and pressure fields from flow visualizations. *Science*, 367(6481) (2020) 1026-1030.
- [24] Karniadakis, G. E., Kevrekidis, I. G., Lu, L., Perdikaris, P., Wang, S., Yang, L. Physics-informed machine learning. *Nature Reviews Physics*, 3(6) (2021) 422-440.
- [25] Roscher, R., Bohn, B., Duarte, M.F. and Garcke, J. Explainable machine learning for scientific insights and discoveries. *IEEE Access*, **8**, pp. 42200–42216, (2020). DOI <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2020.2976199>.
- [26] Rudy, S.H., Brunton, S.L., Proctor, J.L. and Kutz, J.N. Data-driven discovery of partial differential equations. *Science Advances*, **3**(4), (2017).
- [27] Tang, M., Liu, Y. and Durlofsky, L.J. A deep-learning-based surrogate model for data assimilation in dynamic subsurface flow problems. *Journal of Computational Physics*, **413**(109456), pp. 1–28, (2020).
- [28] Young, T., Hazarika, D., Poria, S., Cambria, E. Recent Trends in Deep Learning Based Natural Language Processing. *IEEE Computational Intelligence Magazine*, **13**(3), pp. 55–75, (2018).
- [29] E. Godlewski and P-A. Raviart, *Numerical Approximation of Hyperbolic Systems of Conservation Laws* (2nd ed. 2021) Springer.