

Redes Neurais Consistentes com Leis Físicas: Modelagem e Controle de EADs

Proposta de Dissertação de Mestrado

Orientadores: Eduardo Camponogara
Eric Antonelo

1 Introdução

A disponibilização crescente de dados combinada com recursos computacionais poderosos, em hardware e software, tem promovido o desenvolvimento de novas abordagens de aprendizado de máquina e análise de dados com impactos na indústria e sociedade. Podemos citar aplicações de reconhecimento de imagem, ferramentas de processamento de linguagem natural, e protótipos de veículos autônomos, entre outros.

Dentro deste contexto moderno de aprendizado de máquina, surgiram as redes neurais artificiais consistentes com leis físicas (do inglês, *Physics-Informed Neural Networks*, PINNs) [8, 6, 7]. Tais redes são treinadas para resolver problemas de aprendizado supervisionado, porém respeitando uma lei física caracterizada por Equações Diferenciais Ordinárias (EDOs) e Equações Diferenciais Parciais (EDPs) não lineares. PINNs é uma metodologia de aprendizado de máquina proposta recentemente que vem despertando interesse, tanto no contexto científico quanto de engenharia e aplicações. Duas classes principais de problemas são abordadas com PINNs: a solução de equações diferenciais orientada a dados; e a descoberta de modelos orientada a dados.

Da mesma forma que redes neurais convencionais, particularmente redes profundas, as PINNs podem ser empregadas no aprendizado de uma relação de entrada e saída no tempo, que representa um sistema dinâmico. Em situações em que a disponibilidade de dados é limitada, mas existindo um modelo físico dado por equações diferenciais, as PINNs são treinadas para minimizar o erro de dados (relação entrada e saída) e o erro de modelo (solução da equação diferencial) que serve como uma estratégia de regularização. Surge assim uma nova classe de aproximadores de funções universais, baseados em

dados e capazes de codificar quaisquer leis físicas subjacentes com informação prévia.

Dependendo da natureza e forma dos dados disponíveis, surgem duas classes distintas de algoritmos, a saber os modelos de tempo contínuo e de tempo discreto. Os modelos de tempo contínuo são mais fáceis de serem compreendidos e aplicados, porém exigem maior número de pontos de colocação para assegurar a solução das equações diferenciais. Os modelos de tempo discreto, por outro lado, asseguram maior precisão mesmo com um número reduzido de pontos, porém são mais complexos de serem aplicados.

2 Objetivos

Os trabalhos disponíveis na literatura tratam da solução e descoberta de modelos baseados em Equações Diferenciais Ordinárias e Equações Diferenciais Parciais, não sendo encontradas abordagens para resolver Equações Algébrico-Diferenciais (EADs) e modelos com entradas de controle ou com graus de liberdade. Uma vantagem das EADs está na flexibilidade de modelagem que, por meio do uso de variáveis adicionais (algébricas) definidas em uma equação complementar, permite manter o significado físico das variáveis e a estrutura do sistema. Por exemplo, no contexto de sistemas complexos, um sistema pode ser construído de forma simplificada com base na interconexão de subsistemas por meio de variáveis algébricas. O problema de controle ótimo de EADs [5] é definido como segue:

$$\min_u \int_{t=0}^{\infty} L(x, y, u, t) dt \quad (1a)$$

$$\text{s.t. : } \dot{x} = f(x, y, u, t) \quad (1b)$$

$$0 = g(x, y, u, t) \quad (1c)$$

$$x(0) = x_0 \quad (1d)$$

em que x é a variável de estado, u a variável de controle, y é a variável algébrica, f a função dinâmica, g a restrição algébrica, e L o custo dinâmico. Controle ótimo tem aplicações diversas em ciência e engenharia. Por exemplo, o sistema dinâmico de uma cápsula espacial controlada por propulsores, com objetivo de chegar até a Lua com consumo mínimo de combustível.

É dentro desta temática que o presente projeto de mestrado está inserido. O projeto objetiva realizar estudos, implementações computacionais e ensaios com PINNs para resolver uma EAD, dada por (1b)-(1d), com e sem entradas de controle. Estes estudos irão dar suporte ao desenvolvimento

de novos algoritmos com potencial para aplicações em controle de sistemas dinâmicos, por exemplo na modelagem e controle de compressores, bombas centrífugas submersas e circuitos elétrico-eletrônicos, entre outros.

3 Plano de Atividades

O candidato ao mestrado irá se capacitar em modelagem com redes neurais artificiais, solução numérica de equações algébrico-diferenciais, implementação e teste de algoritmos de aprendizado supervisionado para Redes Neurais Artificiais (RNAs) consistentes com leis físicas. Esta capacitação irá potencializar aplicações relevantes envolvendo modelagem e controle de EADs.

Atividades Previstas:

1. Estudo sobre a linguagem Python e ferramenta Tensorflow. Busca capacitar o estudante em ferramentas computacionais necessárias aos estudos numéricos. Estudos serão realizados com a linguagem Python e a ferramenta Tensorflow que oferece diversas facilidades para treinamento de sistemas heterogêneos, incluindo redes neurais artificiais.
2. Estudo e fundamentação em redes neurais artificiais. Prevê o estudo da teoria básica de RNAs, com enfoque em redes tipo “feedforward,” algoritmos de treinamento (“gradient descent” e “back propagation”) e aplicações. Estudos numéricos deverão ser realizados com Python e Tensorflow.
3. Estudo e fundamentação em solução numérica de EDOs e EADs. Uma revisão das metodologias fundamentais para solução numérica de equações diferenciais e algébrico-diferenciais será realizada, com ênfase no método fundamental de Euler e Runge-Kutta [5, 1, 4]. Ensaios computacionais serão conduzidos em Python, promovendo entendimento e suporte a ensaios mais avançados a serem realizados.
4. Estudo e fundamentação em redes neurais artificiais consistentes com leis físicas [8, 6, 7]. Serão estudados artigos introdutórios sobre RNAs consistentes com a física, tomando como base os estudos realizados com RNAs convencionais e a solução numérica de EDOs/EADs. A ferramenta Tensorflow será aplicada em exemplos simples para assegurar o entendimento de PINNs e suas aplicações.

5. Identificação de sistema dinâmico representativo. Será realizado um levantamento de sistemas dinâmicos simples, mas representativos modelados por EADs. Uma alternativa é um sistema de elevação de fluidos para poços de petróleo com bomba centrífuga submersa (“electrical submersible pump”, ESP) [2, 3].
6. Implementação de simulação numérica do sistema. Implementar em Python modelo de simulação numérica do sistema dinâmico (e.g., ESP).
7. Implementação de PINNs para modelagem do sistema dinâmico representativo. Implementar em Python e Tensorflow PINNs para modelagem e controle do sistema dinâmico representativo (e.g., ESP).
8. Estudo e aplicação de controle preditivo não-linear [1] com PINNs para o sistema dinâmico representativo.
9. Ensaio computacionais e análises de PINNs aplicadas ao sistema dinâmico representativo, tanto para estudos de simulação quanto em controle preditivo não-linear.

4 Resultados Esperados

Além da formação de um pesquisador em nível de mestrado, são esperados os seguintes resultados específicos:

- Metodologia para síntese de redes neurais consistentes com a física para modelagem e controle de sistemas dinâmicos caracterizados por equações algébrico-diferenciais.
- Ferramenta computacional desenvolvida em Python e Tensorflow para aplicação de PINNs na modelagem e controle de EADs.
- Análise de ensaios numéricos da aplicação da ferramenta a um sistema dinâmico representativo (e.g., ESPs).

5 Perfil do Candidato

É indispensável disposição para estudos avançados, bem como capacidade de estudar e conduzir pesquisa individualmente e em grupo. Também é desejável:

- habilidade para leitura e redação na língua inglesa;
- experiência em linguagem Python, ferramentas de modelagem e treinamento de redes neurais (tensorflow/pytorch), solução numérica de equações diferenciais, e ferramentas para otimização, controle e diferenciação automática (CasADI).

Bibliografia de Referência

- [1] L. T. Biegler. *Nonlinear Programming: Concepts, Algorithms, and Applications to Chemical Process*. SIAM, 2010.
- [2] Benjamin J. T. Binder, Alexey Pavlo, and Tor A. Johansen. Estimation of flow rate and viscosity in a well with an electric submersible pump using moving horizon estimation. *IFAC PapersOnLine*, 48(6):140–146, 2015.
- [3] Pedro de A. Delou, Julia P. A. de Azevedo, Dinesh Krishnamoorthy, Maurício B. de Souza Jr., and Argimiro R. Secchi. Model predictive control with adaptive strategy applied to an electric submersible pump in a subsea environment. *IFAC PapersOnLine*, 52(1):784–789, 2019.
- [4] Arieh Iserles. *A First Course in the Numerical Analysis of Differential Equations*. Cambridge University Press, 2008.
- [5] D. E. Kirk. *Optimal Control Theory: An Introduction*. Prentice-Hall, 1970.
- [6] M. Raissi, P. Perdikaris, and G. E. Karniadakis. Physics informed deep learning (Part I): data-driven solutions of nonlinear partial differential equations. Preprint, 2017.
- [7] M. Raissi, P. Perdikaris, and G. E. Karniadakis. Physics informed deep learning (Part II): data-driven solutions of nonlinear partial differential equations. Preprint, 2017.

- [8] M. Raissi, P. Perdikaris, and G. E. Karniadakis. 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, 2019.