

Redes neuronales de grafos informadas localmente por la termodinámica

Alicia Tierz¹, Icíar Alfaro¹, David González¹, Francisco Chinesta², Elías Cueto¹

¹ Applied Mechanics and Bioengineering (AMB)

Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón (I3A)

Universidad de Zaragoza, Mariano Esquillor s/n, 50018, Zaragoza, Spain.

Tel. +34-976762707, e-mail: atierz@unizar.es

²ESI Group Chair PIMM Lab. ENSAM Institute of Technology. Paris, France

Resumen

El objetivo de este trabajo es predecir la evolución temporal de sistemas físicos fuera de equilibrio a través de redes neuronales de grafos (GNN). Estas GNN a demás de tener un sesgo inductivo geométrico van a estar guiadas por los principios de la termodinámica a través de otro sesgo basado en una nueva implementación local del formalismo GENERIC

Introducción

La simulación computacional es una herramienta fundamental en diversas disciplinas científicas, facilitando la predicción de fenómenos físicos y permitiendo perfeccionar diseños antes de recurrir a costosos montajes experimentales. Estas herramientas han estado en desarrollo durante los últimos 80 años, comenzando con formulaciones matemáticas complejas expresadas a través de ecuaciones diferenciales parciales (PDEs). En la actualidad, se están incorporando algoritmos de aprendizaje profundo, que son cada vez más sofisticados y que están empezando a incluir sesgos inductivos. Estos sesgos tienen como objetivo lograr soluciones más rápidas, sencillas y con una menor cantidad de datos de entrenamiento. Un sesgo usado por la comunidad científica e implementado en esta investigación es la imposición de leyes físicas en el entrenamiento de la arquitectura neuronal. En particular, existen redes neuronales diseñadas para garantizar los principios básicos de la termodinámica [1,2]. Este trabajo se centra en la aplicación de estos sesgos termodinámicos inductivos a redes neuronales de grafos para sistemas discretizados en una gran cantidad de puntos.

Metodología

El trabajo propone el uso de redes neuronales de grafos para predecir la evolución dinámica de sistemas, pero añadiendo un sesgo termodinámico a

través del formalismo metripléctico GENERIC (*General Equation for the non-Equilibrium Reversible-Irreversible Coupling*) [3,4]

Estructura geométrica: Graph Neural Network (GNN)

Como se ha comentado, el sesgo geométrico se introduce con el uso de una red neuronal de grafos (GNN). Dado que nuestros datasets son sistemas mallados, la transformación en grafos es directa, conteniendo cada nodo las propiedades físicas de sí mismo y cada conexión las propiedades físicas de cada enlace, más concretamente, la distancia relativa entre cada partícula. Así, conseguimos que la red neuronal se centre en las interacciones basadas en la distancia, siendo invariante a traslación y rotación.

Estructura metripléctica: Formalismo GENERIC

Para el sesgo inductivo, se ha hecho uso de una modificación del formalismo metripléctico GENERIC, el cual divide a un sistema cerrado en una parte conservativa y una parte disipativa,

$$\frac{dz}{dt} = L \frac{\partial E}{\partial z} + M \frac{\partial S}{\partial z}$$

siendo L y M los operadores que se encargan de la contribución reversible e irreversible respectivamente, y E y S los potenciales de energía y entropía. Para garantizar que el sistema evoluciona de manera termodinámicamente consistente, tenemos que incluir las condiciones de degeneración que establecen que la entropía no contribuya a la parte reversible y que la energía no contribuya a la parte irreversible.

$$L \frac{\partial S}{\partial z} = M \frac{\partial E}{\partial z} = 0$$

Estas condiciones de degeneración serán incluidas en la función de coste de la GNN como segundo término, siendo el primero la diferencia entre la predicción y la solución real.

La introducción de este formalismo hace que se tenga que construir y guardar en memoria dos matrices de tamaño $(n_v \times n_{dof}) \times (n_v \times n_{dof})$ siendo n_v el número de partículas y n_{dof} el número de variables de estado. Es por ello por lo que para sistemas grandes se ha implementado una formulación local que considera a cada nodo del grafo como un sistema abierto conectado con otros nodos con los que comparte conexiones.

Esta nueva formulación la evolución temporal de las variables de estado de una partícula queda de la siguiente forma:

$$\dot{\mathbf{z}}_i = \mathbf{L}_i(\mathbf{z}_i) \frac{\partial e_i}{\partial \mathbf{z}_i} + \mathbf{M}_i(\mathbf{z}_i) \frac{\partial S_i}{\partial \mathbf{z}_i} - \sum_j^{n_{neigh}} \left[\mathbf{L}_{ij}(\mathbf{z}_j) \frac{\partial e_j}{\partial \mathbf{z}_j} + \mathbf{M}_{ij}(\mathbf{z}_j) \frac{\partial S_j}{\partial \mathbf{z}_j} \right]$$

Resultados

Para probar la efectividad de esta nueva implementación del formalismo, se ha generado un dataset sintético que simula cómo un fluido con energía cinética en un recipiente se va frenando. Para

ello, se ha entrenado la red neuronal con 30 simulaciones y se han dejado 4 de ellas para la prueba. Los resultados de aplicar la métrica RRMSE sobre estas muestras de prueba indican un error relativo en posiciones de 0.0147, en velocidades de 0.118 y en energía de 0.00056.

Conclusiones

En este trabajo hemos desarrollado una forma local para el sesgo metripléctico que garantiza la corrección termodinámica de las predicciones en la inferencia y mantiene la eficiencia de las GNN superando los cuellos de botella computacionales.

REFERENCIAS

- [1]. HERNANDEZ, Q., BADIAS, A., CHINESTA, F and CUETO, E., 2022. Thermodynamics-informed graph neural networks. ArXiv preprint. arXiv:2203.01874.
- [2]. HERNANDEZ, Q., BADIAS, A., GONZALEZ, D., CHINESTA, F. and CUETO, E., 2020. Structurepreserving neural networks. Journal of Computational Physics.
- [3]. MORRISON, P.J. A paradigm for joined Hamiltonian and dissipative Systems. Physica D: Nonlinear Phenomena. 1986, 18(1-3), 410 - 419.
- [4]. GRMELA, M. and ÖTTINGER, H.C., 1997. Dynamics and thermodynamics of complex fluids. I. Development of a general formalism. Physical Review E, 56(6), p.6633.

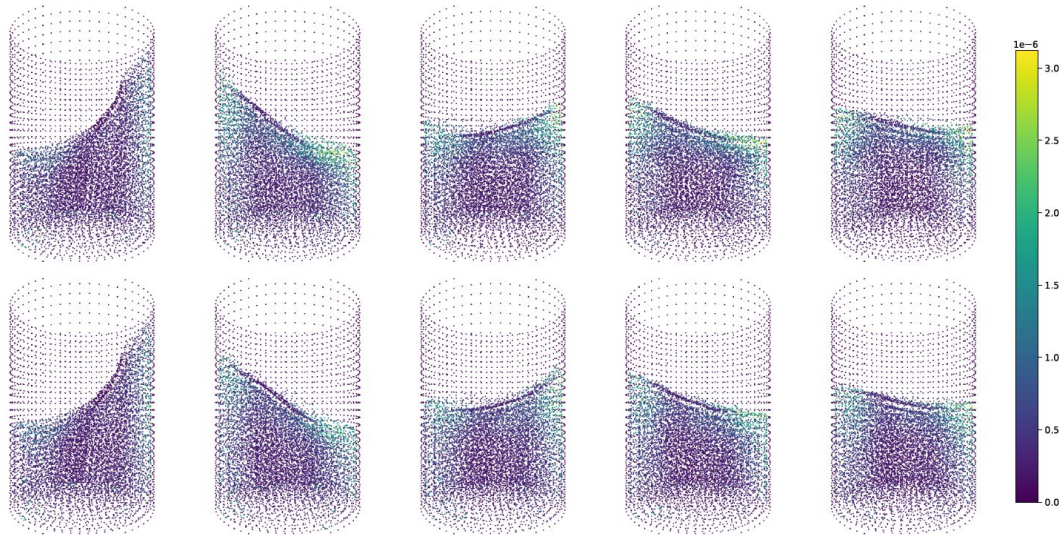


Fig 1: Resultado de una simulación con 200 instantes de tiempo. Se han seleccionado cinco de ellos con los índices 10, 50, 70, 120 y 180. La primera fila corresponde a la inferencia de la red mientras que la segunda es el *ground truth*.