

# Redes neuronales de grafos informadas por termodinámica para la simulación de gemelos digitales anatómicamente precisos

Lucas Tesán<sup>1</sup>, David González<sup>1</sup>, Francisco Chinesta<sup>2</sup>, Elías Cueto<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Applied Mechanics and Bioengineering (AMB)  
ESI Group-UZ Chair of the National Strategy of AI.  
Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón (I3A)  
Universidad de Zaragoza, Mariano Esquillor s/n, 50018, Zaragoza, Spain.

<sup>2</sup> ESI Group Chair. PIMM Lab, Arts et Metiers Institute of Technology, Paris, France.

*CNRS@CREATE LTD, CNRS, Singapore*

## Resumen

Los gemelos digitales han surgido como una forma de simular la fisiología humana, con el objetivo de reducir la necesidad de ensayos clínicos costosos y éticamente desafiantes. Sin embargo, su complejidad, actualmente limita el alcance de lo que se puede simular. Las redes neuronales híbridas presentan una alternativa prometedora y transparente, guiando las metodologías basadas en IA lejos de los modelos opacos y de caja negra.

## Introducción

Generalmente, los métodos numéricos han sido la base para simular en estas representaciones digitales de la anatomía humana. Sin embargo, el estado del arte de la simulación numérica, más específicamente el método de elementos finitos, no ha hecho avances significativos en los últimos años. Este factor, junto con la creciente popularidad y evolución de las unidades de procesamiento gráfico (GPUs), ha impulsado una nueva dinámica de trabajo en la que las redes neuronales buscan reemplazar los métodos numéricos ya establecidos.

Esta tendencia emergente, basada en redes impulsadas por datos, depende en gran medida de grandes conjuntos de datos para garantizar la robustez durante el despliegue. Sin embargo, las redes híbridas [1][2][3] ofrecen una ruta alternativa hacia un futuro sostenible, alejándose de la necesidad de datos de entrenamiento extensivos y de la opacidad asociada con el paradigma de la caja negra.

No obstante, esta tecnología está en su infancia y su robustez es incierta; la línea entre los modelos de caja negra y caja gris es muy delgada. Pero las últimas

líneas de investigación ofrecen alguna esperanza para un futuro donde las redes neuronales y su aprendizaje ya no sean un misterio.

## Métodos

### IA Híbrida

El estudio presentado aquí investiga la efectividad de las redes neuronales de gráficos informadas por la física en la captura de la dinámica no lineal de un hígado sano, manteniéndose adaptables a cambios en las condiciones de contorno y en la geometría anatómica. Alejándonos de los modelos opacos de caja negra, nuestra metodología implica evaluar cómo los sesgos físicos y geométricos impactan en la resiliencia del modelo, asegurando al mismo tiempo el cumplimiento de los principios de la termodinámica en los intercambios de energía. El sesgo geométrico se induce a través del paso de mensajes en las redes de grafos, estableciendo paralelismos entre la estructura del grafo y las mallas de elementos finitos. Mientras tanto, el sesgo físico se genera con la imposición formalismo GENERIC localmente, tanto en el paso hacia adelante como el entrenamiento de la red [1].

La inclusión del formalismo GENERIC permite el análisis de sistemas en desequilibrio mediante el seguimiento de la evolución de la energía y la entropía. Esta metodología facilita el desarrollo de integradores temporales para las variables de estado que definen la energía del sistema, proporcionando un marco poderoso para comprender y modelar los fenómenos complejos asociados a la mecánica no lineal [2]. Sin embargo, según los recientes avances en redes hamiltonianas, se puede conceptualizar cada nodo como un sistema cerrado, cuyo flujo de energía

y entropía se describe a través de los operadores de frontera, definiendo el formalismo localmente [4].

## Database and architecture

La base de datos comprende 540 simulaciones de alta fidelidad que presentan estados de carga arbitrarios definidos como desplazamientos impuestos entre uno y tres nodos. El diez por ciento de este conjunto de datos se utiliza para la validación del modelo y otro diez por ciento para testeo, asegurando que todas las inferencias se realicen sobre estados de carga no vistos. El objetivo de la red neuronal es aprender la relación no lineal entre las variables de estado, permitiendo la construcción de todos los componentes necesarios para un integrador termodinámicamente correcto utilizando un esquema de Euler hacia adelante.

Esto se logra codificando la información del sistema dentro de los elementos de la red: capturando las deformaciones relativas a lo largo de los bordes, mientras que los nodos almacenan datos sobre las tensiones, velocidades y condiciones de contorno. Se optimiza la transmisión de datos desde un actuador virtual hacia la red receptora, formando un flujo de información que recorre los nodos del grafo. Al llegar al final del proceso, cuatro decodificadores se encargan de extraer los operadores lineales, así como los gradientes de energía y entropía para cada nodo. Finalmente, se opera sobre la información decodificada, teniendo en cuenta la conectividad específica de cada subsistema nodal.

## Resultados y discusión

Los resultados preliminares del proyecto muestran que la red neuronal tiene una fuerte comprensión de los principios viscoelásticos dentro y fuera del marco geométrico entrenado, lo que le permite predecir con precisión posiciones y velocidades incluso en nuevos escenarios de carga, con errores mínimos. Adicionalmente, la red se mantiene robusta a diferentes geometrías y condiciones de carga, produciendo consistentemente representaciones 3D de alta fidelidad tanto para geometrías conocidas como nuevas, Figura 1.

## Conclusiones

En conclusión, la exploración de gemelos digitales y su aplicación en la simulación de procesos fisiológicos dentro del cuerpo humano presenta una vía prometedora para reducir la dependencia de los ensayos clínicos tradicionales. La aparición de la inteligencia artificial híbrida, particularmente en la forma de redes neuronales de gráficos informadas por la física, representa un avance significativo en este campo. Donde estos modelos híbridos no solo capturan dinámicas no lineales de manera efectiva, sino que también muestran resiliencia y adaptabilidad a cambios en las condiciones de contorno y en las geometrías de las mallas.

## Agradecimientos

Los autores agradecen el apoyo del ESI Group a través de las cátedras en la Universidad de Zaragoza y en el ENSAM Institute of Technology.

## Financiación

Este material se basa en parte en el trabajo apoyado por el Laboratorio de Investigación del Ejército y la Oficina de Investigación del Ejército bajo el número de contrato/subvención W911NF2210271.

Este trabajo también fue apoyado por el Ministerio de Ciencia e Innovación de España, AEI/10.13039/501100011033, a través del número de subvención PID2020-113463RB-C31 y por el Ministerio de Transformación Digital y la Función Pública, a través de las Cátedras ENIA 2022 para la creación de cátedras universidad-industria en IA, a través de la subvención TSI-100930-2023-1.

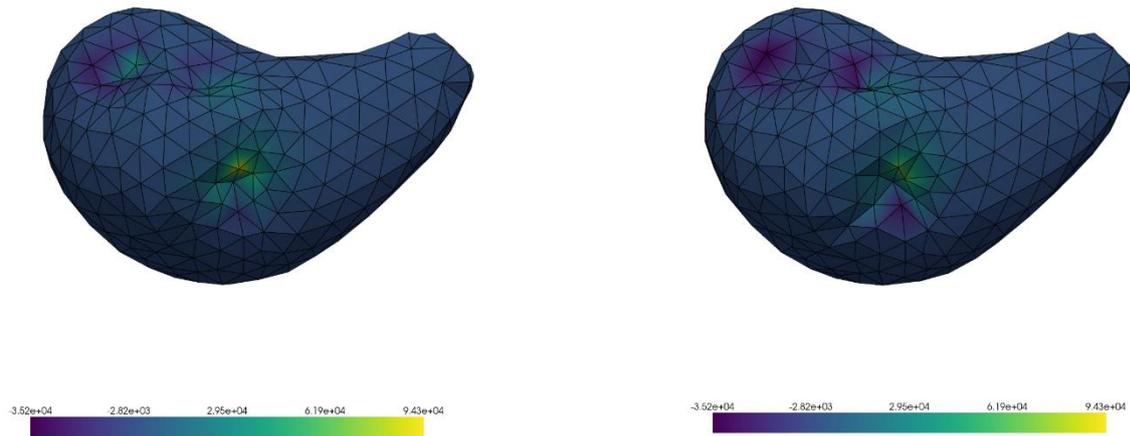
Esta investigación también forma parte del programa DesCartes y está apoyada por la Fundación Nacional de Investigación, Oficina del Primer Ministro, Singapur, en el marco de su programa Campus for Research Excellence and Technological Enterprise (CREATE).

## Declaración de Conflictos de Interés

Los autores declaran no tener conflictos de interés.

## References

- [1]. HERNANDEZ, QUERCUS, et al. Thermodynamics-informed graph neural networks. arXiv preprint arXiv:2203.01874, 2022.
- [2]. HERNANDEZ, QUERCUS, et al. Deep learning of thermodynamics-aware reduced-order models from data. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 379, 2021, 113763.
- [3]. MOYA, BEATRIZ, et al. Computational Sensing, Understanding, and Reasoning: An Artificial Intelligence Approach to Physics-Informed World Modeling. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 2023, 1-18.
- [4]. TIERZ, A, et al. Graph Neural Networks Informed Locally by Thermodynamics. Preprint, 2024.



**Figura 1.** Comparativa renderizada en una malla de elementos finitos para un estado de tres cargas no visto durante el entrenamiento. A la izquierda la inferencia de la red para el ultimo paso temporal y la derecha la solución numérica.