

Redes neuronales guiadas por física en la ecuación del calor estacionaria: cálculo de soluciones, desentrañado de ecuaciones de estado y revelado de la microestructura de materiales

Rubén Muñoz-Sierra¹, Jacobo Ayensa-Jiménez^{1,2}, Manuel Doblaré^{1,2}

¹Afiliación: TME Lab

Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón (I3A)
Universidad de Zaragoza, Mariano Esquillor s/n, 50018, Zaragoza, Spain.
Tel. +34-976762707, e-mail: 739163@unizar.es

²Afiliación: Instituto de Investigación Sanitaria de Aragón (IISA)
Avda. San Juan Bosco, 13, 50009, Zaragoza, Spain.

Resumen

Este estudio combina algoritmos de aprendizaje automático con principios físicos para resolver la ecuación de calor estacionaria, mejorando la capacidad predictiva de los modelos con respecto a las redes neuronales clásicas, y aportando capacidad explicativa, descubriendo modelos de estado no lineales y revelando la microestructura heterogénea de un material.

Introducción

Históricamente, los métodos predictivos en física han consistido en modelos matemáticos que describen la evolución de un sistema frente a estímulos y restricciones externas específicas. Estos modelos se basan en suposiciones físicas que se presuponen válidas para el sistema bajo ciertas hipótesis de trabajo. Sin embargo, en los últimos años ha surgido una tendencia que busca incorporar la capacidad predictiva de las redes neuronales artificiales a los modelos físicos tradicionales [1, 2].

Un enfoque destacado dentro de esta familia de métodos son las Redes Neuronales con Variables Internas Guiadas por Física [3], donde las leyes físicas se utilizan como restricciones en la arquitectura de las redes, permitiendo que estas se interpreten como variables de estado internas del sistema. Esto confiere a la red la capacidad de desentrañar modelos físicos constitutivos directamente interpretables, además de lograr una convergencia más rápida, una menor dependencia de la cantidad de datos de entrenamiento del modelo y el filtrado del ruido, si se compara con las redes convencionales [3]. Además, durante el proceso de entrenamiento, se emplean exclusivamente datos medibles, ya que las ecuaciones de estado se obtienen como subproducto del entrenamiento, ofreciendo soluciones coherentes con los principios de la física. En este trabajo, esta metodología se extiende a problemas físicos del continuo, aplicándolo a la ecuación del calor estacionaria, demostrando su capacidad para descubrir la ley de Fourier con elementos de heterogeneidad y no linealidad; al mismo tiempo que mantiene su habilidad predictiva en la respuesta del sistema.

Metodología

La metodología de las Redes Neuronales con Variables Internas Guiadas por Física se plantea de la siguiente manera: se establece una red neuronal clásica, denominada Red Predictiva, cuya entrada la forman las variables independientes del problema (en nuestro caso una parametrización de las condiciones de contorno y las fuentes) y cuya salida se corresponde con los valores a predecir (en nuestro caso el campo de temperaturas). Sin embargo, a esta red se le imponen restricciones en capas internas específicas, relacionadas con la física del problema (en nuestro caso la conservación de la energía). De este modo, las neuronas en estas capas adquieren el valor de variables internas con una interpretación física (en nuestro caso flujos de calor). Para el problema genérico, en términos de las variables de entrada \mathbf{x} , de salida \mathbf{y} , e internas \mathbf{v} , se plantea el problema como:

$$\mathbf{y} = \mathbf{Y}(\mathbf{x})$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{H}(\mathbf{y})$$

$$\mathbf{R}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{v}) = \mathbf{0}$$

donde \mathbf{Y} (función predictiva) y \mathbf{H} (función explicativa) son funciones desconocidas las cuales se aprenden mediante aprendizaje profundo, y \mathbf{R} es una función conocida que explicita la física del problema. El proceso de aprendizaje se realiza añadiendo a la función de coste de la red un término de penalización en el que se incluyan las restricciones impuestas:

$$\begin{aligned}\mathcal{L} &= \mathcal{L}_{\text{datos}} + \mathcal{L}_{\text{física}} \\ \mathcal{L}_{\text{datos}} &= \sum_{i=1}^n \|\mathbf{y}_i - \hat{\mathbf{y}}_i\| \\ \mathcal{L}_{\text{física}} &= \sum_{i=1}^n \mathbf{R}_i^T \mathbf{\Pi} \mathbf{R}_i\end{aligned}$$

donde $\hat{\mathbf{y}}_i$ es la predicción del modelo para el caso i -ésimo, \mathbf{R}_i la restricción física para ese caso y $\mathbf{\Pi}$ son metaparámetros adicionales de la red. Para el caso de la ecuación de calor, \mathbf{x} son las condiciones de contorno y fuentes térmicas, \mathbf{y} las variables nodales del campo de temperaturas, \mathbf{v} los flujos de calor, \mathbf{H} es la ecuación que relaciona el flujo de calor con las temperaturas nodales y \mathbf{R} es la conservación de la energía de forma que el problema se resuelve combinando el principio fundamental dado por \mathbf{R}

$$\mathbf{R}(\mathbf{q}, f) = \nabla \cdot \mathbf{q} - f = 0,$$

así como con la inclusión de las condiciones de contorno, con la ecuación constitutiva dada por \mathbf{H}

$$\mathbf{q} = \mathbf{H}(\nabla u)$$

donde u es la solución del problema y f el término fuente.

Resultados

Para evaluar la metodología, se realizan varios experimentos numéricos resolviendo la ecuación del calor estacionaria para problemas lineales heterogéneos y anisótropos en los que

$$\mathbf{H}(\nabla u) = \mathbf{K}(\mathbf{x}) \cdot \nabla u$$

siendo \mathbf{K} el tensor de difusión, así como para problemas no lineales en los que

$$\mathbf{H}(\nabla u) = \mathbf{K}(u) \cdot \nabla u$$

En la Figura 1 se muestra como el método es capaz de predecir el valor del campo solución y en la Figura 2 se muestra como con el método se puede hallar el valor del campo de difusividades térmicas $\mathbf{K} = \mathbf{K}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ para un problema bidimensional.

Conclusiones

Uno de los principales desafíos actuales en el mundo del aprendizaje automático es que las redes neuronales funcionan a menudo como cajas negras: predicen de forma precisa un evento, pero no se justifica de forma explícita la predicción. La metodología de las Redes Neuronales con Variables Internas Guiadas por Física permite aprovechar las grandes capacidades predictivas de las redes neuronales, incorporando al mismo tiempo los principios físicos del problema en cuestión. Esto permite, desentrañar de forma explícita la física del problema sin comprometer la fiabilidad de las predicciones.

REFERENCIAS

- [1] XU, Y., et al. ISSN 2666-6758. 2021. Artificial Intelligence: A Powerful Paradigm for Scientific Research. The Innovation. 2(4), pp 100179.
- [2] CUOMO, S., et al. ISSN 1573-7691. 2022. Scientific Machine Learning through Physics-Informed Neural Networks: Where we are and What's Next. Journal of Scientific Computing. 92(3), pp 88.
- [3] AYENSA-JIMÉNEZ, Jacobo, et al. Identification of state functions by physically-guided neural networks with physically-meaningful internal layers. *arXiv preprint arXiv:2011.08567*, 2020.

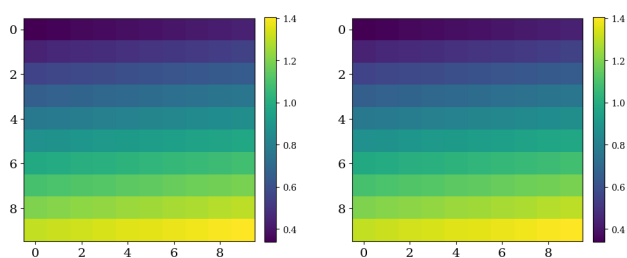


Figura 1: Solución real de la ecuación de calor (izquierda) comparada con la solución predicha por la Red Predictiva (derecha)

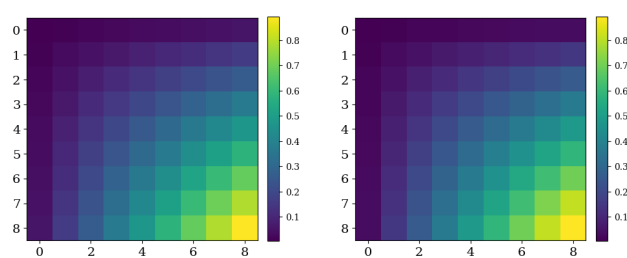


Figura 2: Tensor de difusión real de la ecuación de calor (izquierda) comparado con la solución predicha por la Red Explicativa (derecha)