

# Estimación del flujo sobre geometrías arbitrarias mediante redes neuronales informadas por la termodinámica

Carlos Bermejo-Barbanoj<sup>1</sup>, Alberto Badías<sup>2</sup>, David González<sup>1</sup>, Francisco Chinesta<sup>3,4</sup>,  
Elías Cueto<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Applied Mechanics and Bioengineering (AMB).  
ESI Group-UZ Chair of the National Strategy on Artificial Intelligence.  
Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón (I3A).  
Universidad de Zaragoza, Mariano Esquillor s/n, 50018, Zaragoza, Spain.  
Tel. +34-976762707, e-mail: [cbarbanoj@unizar.es](mailto:cbarbanoj@unizar.es)

<sup>2</sup>School of Aeronautical and Space Engineering (ETSIAE). Universidad Politécnica de Madrid. Madrid, Spain.

<sup>3</sup>ESI Group Chair. PIMM Lab. ENSAM Institute of Technology. Paris, France

<sup>4</sup> CNRS@CREATE LTD. Singapore

## Resumen

El objetivo de este trabajo es la utilización de redes neuronales para obtener la predicción de la dinámica de un sistema en tiempo real. Para guiar a la red hacia una predicción físicamente consistente se utilizan sesgos inductivos que aplican los principios de la termodinámica.

## Introducción

El uso de redes neuronales para modelar problemas dinámicos complejos permite reducir el coste computacional frente a los *solvers* tradicionales, logrando obtener resultados incluso en caso de que se requieran predicciones en tiempo real. Sin embargo, estos métodos presentan un gran inconveniente: confían en datos de entrenamiento, ignorando el conocimiento existente de la física del problema. Para solventar este problema, la comunidad científica ha trabajado en desarrollar arquitecturas que incluyan la física en la red neuronal, centrándose gran parte de este trabajo en la aplicación de sesgos inductivos. Un buen ejemplo de estas arquitecturas son las redes termodinámicamente consistentes [1, 2]. Este trabajo tiene por objetivo el aprendizaje de sistemas dinámicos complejos mediante el uso de este tipo de sesgos.

## Metodología

El trabajo combina el uso de dos redes neuronales. La primera de ellas se trata de un autoencoder. Esta red aprende una codificación del problema en un espacio de baja dimensionalidad. La segunda red es la encargada de la predicción de la dinámica del sistema. Para garantizar la consistencia física de la predicción, esta red utiliza sesgos inductivos que garantizan el cumplimiento de los principios básicos de la termodinámica. Finalmente, el autoencoder

realiza la reproyección de las variables del espacio reducido a la dimensionalidad original. En la Fig. 1 se muestra el esquema del método propuesto.

## Autoencoder antagonista (AAE)

Un autoencoder es un tipo de red neuronal que permite la reducción de dimensionalidad de un problema mediante la codificación de la información a un espacio reducido. El tipo de autoencoder utilizado en este trabajo es un Adversarial Autoencoder (AAE) [3]. Este tipo de autoencoders cuentan con una red adicional llamada discriminador, encargada de que las variables en el espacio reducido sigan un *prior* o una distribución deseada. Gracias a ello, estas redes actúan como modelos generativos, permitiendo obtener nuevas soluciones a partir de variaciones en el espacio reducido.

## Structure Preserving Neural Network (SPNN)

La dinámica del sistema se predice utilizando una *Structure Preserving Neural Network* (SPNN) [2]. Esta arquitectura de red aplica sesgos inductivos basados en los principios de la termodinámica a la predicción, lo que garantiza la consistencia física de la misma. Estos sesgos se aplican mediante el uso de una estructura metripléctica [4], por medio del formalismo GENERIC (*General Equation for Non-Equilibrium Reversible-Irreversible Coupling*) [5]. El sistema se divide en una parte conservativa, relacionada con la energía, y una parte disipativa, relacionada con la entropía:

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

Adicionalmente, se incluyen las condiciones de degeneración que, junto con las propiedades de  $L$  y  $M$ , garantizan que la predicción satisfaga la primera y segunda ley de la termodinámica.

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

## Resultados

Se ha generado un base de datos sintéticos del flujo sobre diferentes geometrías primitivas mediante el software OpenFOAM. Las variables de estado que caracterizan el problema analizado son la presión y la velocidad ( $P, \mathbf{u}$ ). En la Fig. 2.a. se muestran los resultados obtenidos por el AAE. El error relativo medio para las variables de estado que caracterizan el problema se sitúa por debajo del 3%. En la Fig. 2.b. se muestra la comparación entre las variables del espacio reducido obtenidas por el AAE y la predicción obtenida por la SPNN, observándose que la red es capaz de reconstruir la evolución de estas.

## Conclusiones

En el presente trabajo se ha conseguido realizar la predicción del flujo sobre diferentes formas geométricas en tiempo real partiendo del instante

inicial. Los sesgos inductivos basados en la termodinámica contribuyen a la obtención de un resultado físicamente consistente, dotando a la red de una mayor robustez y capacidad de generalización que aquellas basadas en modelos de caja negra.

## 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. Structure-preserving neural networks. *Journal of Computational Physics*.
- [3]. MAKHZANI, A., SHLENS, J., JAITLY, N., GOODFELLOW, I. 2016. Adversarial autoencoders. In *International Conference on Learning Representations*.
- [4]. MORRISON, P.J. A paradigm for joined Hamiltonian and dissipative Systems. *Physica D: Nonlinear Phenomena*. 1986, 18(1-3), 410 - 419.
- [5]. 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.

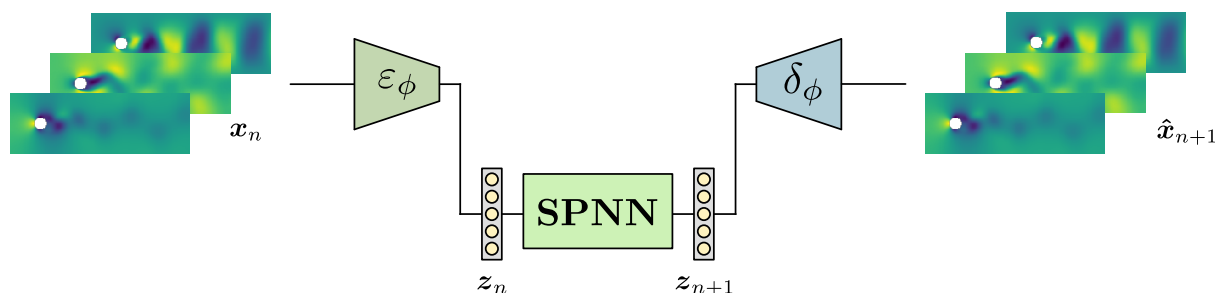


Figura 1. Esquema del método utilizado. El autoencoder realiza la reducción de dimensionalidad del problema. La SPNN realiza la predicción de la dinámica del sistema en el espacio reducido. Finalmente, el autoencoder devuelve el problema a su dimensionalidad original.

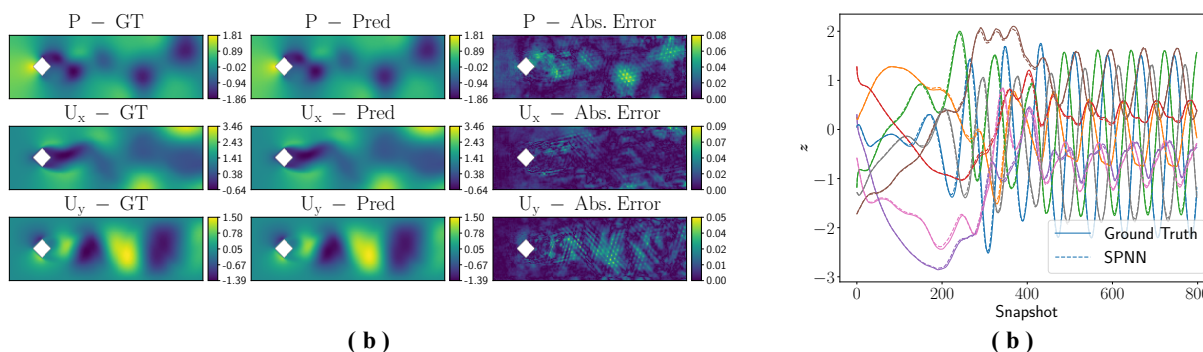


Figura 2. Comparación entre el ground truth (GT), la predicción del AAE y el error absoluto para un snapshot de una de las simulaciones (a). Valor de las variables del problema en el espacio reducido (línea continua) y predicción de la SPNN (línea discontinua). Cada variable se ha representado en diferente color para facilitar su identificación (b).