

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-Jiménez¹, Manuel Doblaré¹

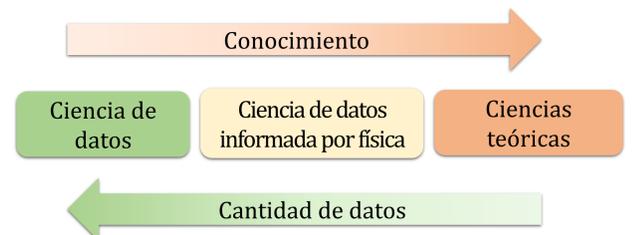
¹Tissue Microenvironment Lab (TME Lab), Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón (I3A), Universidad de Zaragoza

INTRODUCCIÓN

- Retos en el modelado no lineal de materiales en ingeniería:
- Experimentos reales costosos (tiempo y dinero)
 - Datos bajo ciertas condiciones experimentales específicas
 - Simulaciones computacionalmente costosas

OBJETIVO

- Combinar aprendizaje profundo con principios universales
- Inteligencia Artificial eXplicable (XAI):
 - Explicar relaciones físicas entre variables
 - Predecir nuevas situaciones
 - Obtener el valor de variables no medibles



METODOLOGÍA

Idea del problema

u : Variables de estado medibles
 v : Variables internas de estado
 f : Término fuente
 g : Condiciones de contorno

$x = I(u, v, f, g)$ Entrada de la red
 $y = O(u, v, f, g)$ Salida de la red
 $v = h(u)$ Red explicativa
 $y = y(x)$ Red predictiva

Ecuación física
 $R(u, v, f, g) = 0$

Aprendizaje automático
 $v = h(u; \lambda)$
 $y = y(x; \lambda)$

El problema:

- Predecir la respuesta del material frente a una fuente de calor
- Desentrañar la ecuación constitutiva para la conductividad térmica

Datos:

- Material con difusividad térmica **lineal** → Problema heterogéneo
- Material con difusividad térmica **tensorial** → Problema anisótropo
- Material con difusividad **no lineal**

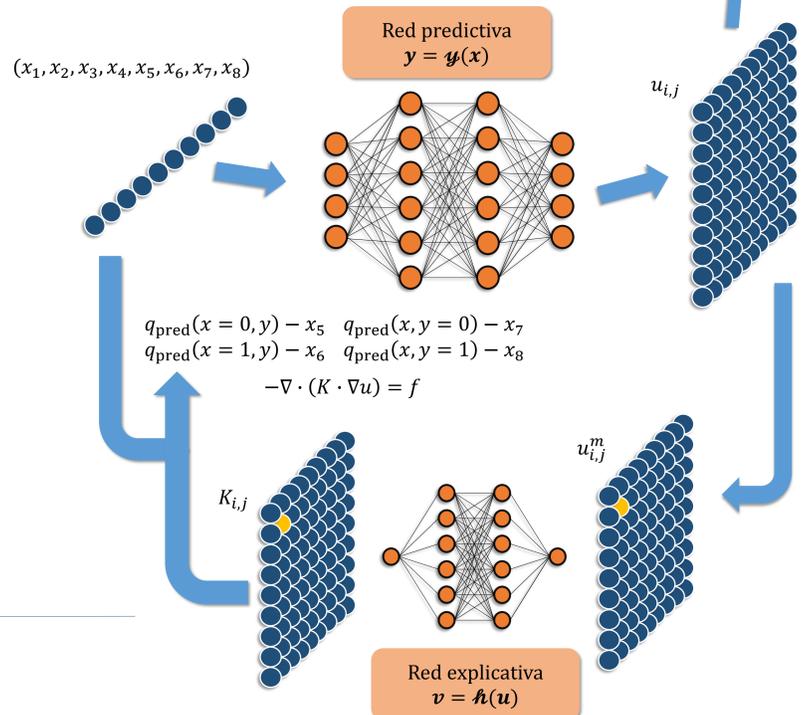
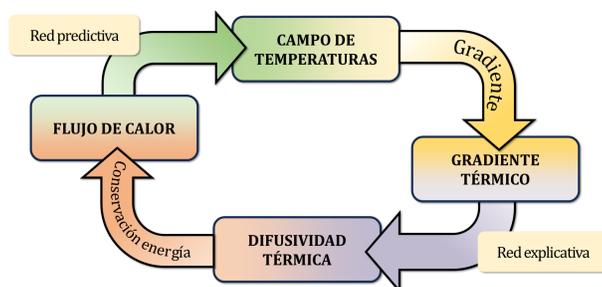
$u_{pred}(x=0, y) - x_1$
 $u_{pred}(x=1, y) - x_2$
 $u_{pred}(x, y=0) - x_3$
 $u_{pred}(x, y=1) - x_4$

Implementación

$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{data} + \mathcal{L}_{phys}$
 $\mathcal{L}_{phys} = \text{MSE}[R(x, \hat{y})^T \Pi R(x, \hat{y})]$
 $\mathcal{L}_{data} = \text{MSE}[\|\hat{y} - y\|^2]$
 $\lambda \equiv$ Parámetros del modelo

Solución
 $\min_{\lambda} \mathcal{L}(\lambda)$

PGNNIV para la transferencia de calor



RESULTADOS

Capacidad predictiva

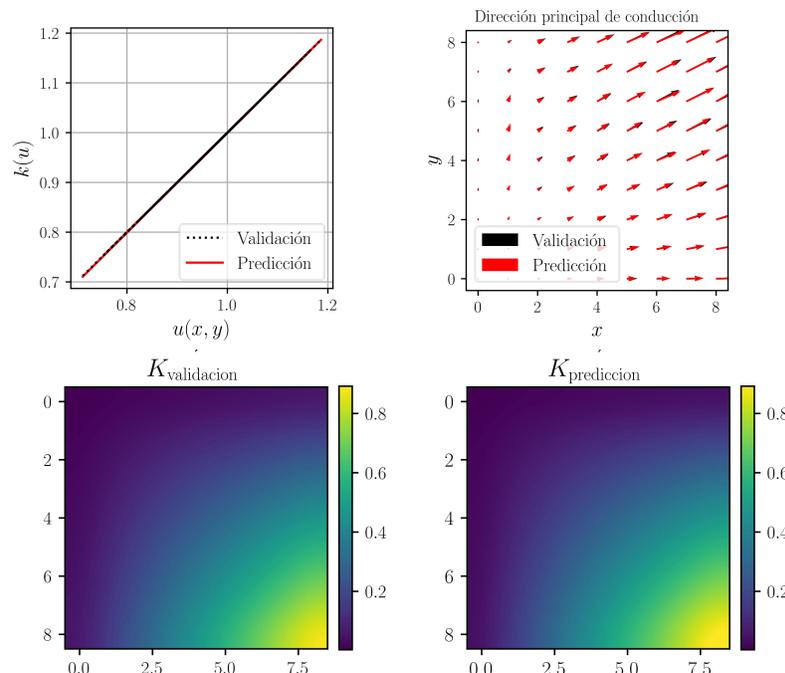
Problema	$E_r^2[u]$		
	Q_1	Q_2	Q_3
Heterogéneo	6.08×10^{-8}	1.12×10^{-8}	2.13×10^{-8}
Anisótropo	3.45×10^{-9}	7.10×10^{-9}	1.38×10^{-8}
No lineal	2.26×10^{-9}	3.52×10^{-9}	4.87×10^{-9}

Problema	$E_r^2[q_x]$		
	Q_1	Q_2	Q_3
Heterogéneo	7.83×10^{-4}	7.90×10^{-4}	8.00×10^{-4}
Anisótropo	3.61×10^{-3}	4.97×10^{-3}	7.54×10^{-3}
No lineal	3.21×10^{-7}	7.13×10^{-7}	2.14×10^{-6}

Problema	$E_r^2[q_y]$		
	Q_1	Q_2	Q_3
Heterogéneo	7.86×10^{-4}	7.92×10^{-4}	8.05×10^{-4}
Anisótropo	2.57×10^{-2}	3.05×10^{-2}	3.99×10^{-2}
No lineal	9.92×10^{-7}	1.86×10^{-6}	4.45×10^{-6}

Problema	$E_r^2[K]$		
	Q_1	Q_2	Q_3
Heterogéneo	7.95×10^{-4}	7.95×10^{-4}	7.95×10^{-4}
Anisótropo	1.57×10^{-2}	1.57×10^{-2}	1.57×10^{-2}
No lineal	3.71×10^{-7}	7.34×10^{-7}	1.68×10^{-6}

Capacidad explicativa



CONCLUSIONES

- Capacidad de realizar predicciones rápidas frente a fuentes de calor externas arbitrarias.
- Capacidad de resolver problemas heterogéneos, anisótropos y no lineales en dos dimensiones.
- Capacidad explicativa de los modelos.
- Metodología enmarcada en la categoría de Inteligencia Artificial Explicable