Instituto Universitario de Investigación en Ingeniería de Aragón Universidad Zaragoza

HACIA UN CIENTÍFICO DIGITAL

Q. Hernández[1]*, A. Badías[1], D. González[1], F. Chinesta[2], E. Cueto[1]

[1] Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón (I3A), Universidad de Zaragoza

[2] PIMM Lab, Arts et Metiers Institute of Technology

*email: quercus@unizar.es

Universidad Zaragoza 1542

INTRODUCCIÓN

- La modelización de sistemas físicos es fundamental en una amplia variedad de disciplinas, tanto a nivel científico como empresarial, para predecir su futura evolución en el tiempo y poder tomar decisiones en base a esa información.
- Sin embargo, ciertos fenómenos son especialmente difíciles de modelar con fórmulas matemáticas exactas:
  - Materiales viscoelásticos
  - Fluidos no-Newtonianos
- Para resolver este problema, en las últimas décadas se han desarrollado técnicas basadas en datos (*data-driven*) que se aprovechan de los crecientes avances informáticos en gestión de datos para aprender los modelos directamente de observaciones y no depender de un modelo matemático cerrado.
- En concreto, las redes neuronales profundas (*deep neural networks*) han conseguido resultados excelentes en problemas tradicionalmente muy difíciles de resolver, entre ellos las simulaciones físicas.
- En el contexto de la predicción de física, la mayoría requieren de un conocimiento previo de las ecuaciones que gobiernan el sistema [1] o están restringidos a sistemas conservativos [2].

OBJETIVOS

- El objetivo de este trabajo es desarrollar un tipo de red neuronal capaz de predecir la evolución temporal de un sistema arbitrario (es decir, un integrador) sin saber a priori sus ecuaciones e incluyendo fenómenos de disipación.
- Las predicciones de esta red neuronal satisfacen las primeras leyes de la termodinámica:
  - Conservación de energía
  - Desigualdad de la entropía
- Esta nueva formulación se ha aplicado con dos ejemplos de validación en el ámbito de la mecánica de sólidos y fluidos, incluyendo tanto efectos conservativos como de disipación.

METODOLOGÍA

- Formulación GENERIC [3] de un sistema físico:

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

$\boldsymbol{z}$: Vector de estados

E: Energía
$\boldsymbol{L}$: Matrix de Poisson
(Efectos conservativos)

S: Entropía
$\boldsymbol{M}$: Matrix de fricción
(Efectos disipativos)

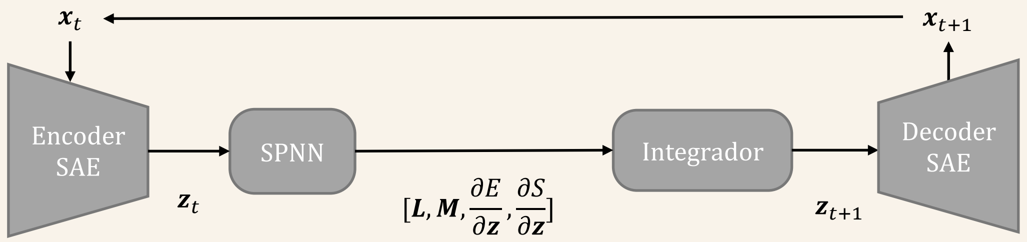
- Red neuronal GENERIC (Structure-preserving neural network, SPNN [4]):

$$\mathcal{L}_{SPNN} = \underbrace{\lambda_d \left\| \boldsymbol{z}_{t+1}^{net} - \boldsymbol{z}_{t+1}^{GT} \right\|_2^2}_{\text{Error de integración}} + \underbrace{\left\| \boldsymbol{L}\frac{\partial S}{\partial \boldsymbol{z}} \right\|_2^2 + \left\| \boldsymbol{M}\frac{\partial E}{\partial \boldsymbol{z}} \right\|_2^2}_{\text{Condiciones de degeneración}} + \underbrace{\lambda_r \|\boldsymbol{w}\|_2^2}_{\text{Regularizador}}$$

- Reducción de dimensionalidad (Sparse Autoencoder, SAE [5]):

$$\mathcal{L}_{SAE} = \underbrace{\lambda_d \left\| \boldsymbol{x}_t^{net} - \boldsymbol{x}_t^{GT} \right\|_2^2}_{\text{Error de reconstrucción}} + \underbrace{\lambda_r \|\boldsymbol{z}_t\|_1}_{\text{Regularizador sparse}}$$

- Algoritmo de integración completo:



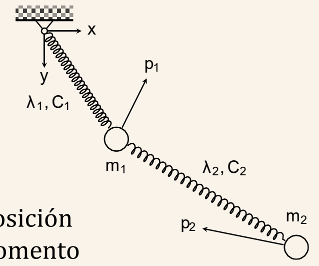
Reducción de grados de libertad del vector de estado

La red neuronal GENERIC calcula el avance temporal sujeto a las leyes de la termodinámica

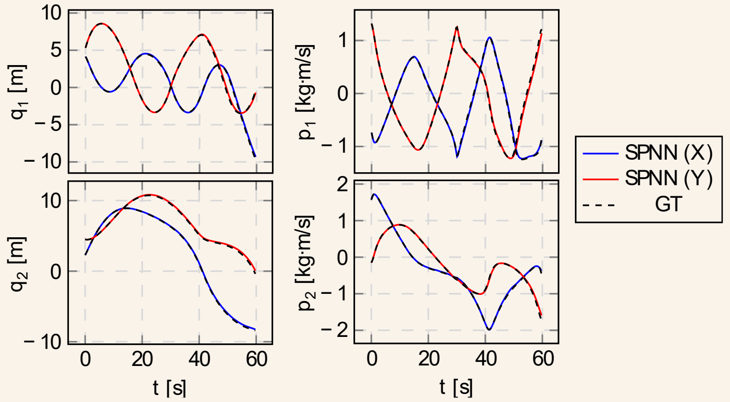
Mapping inverso para volver a la dimensionalidad original

RESULTADOS

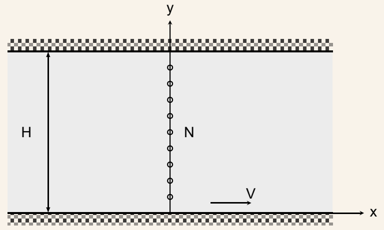
- Péndulo doble termoelástico:



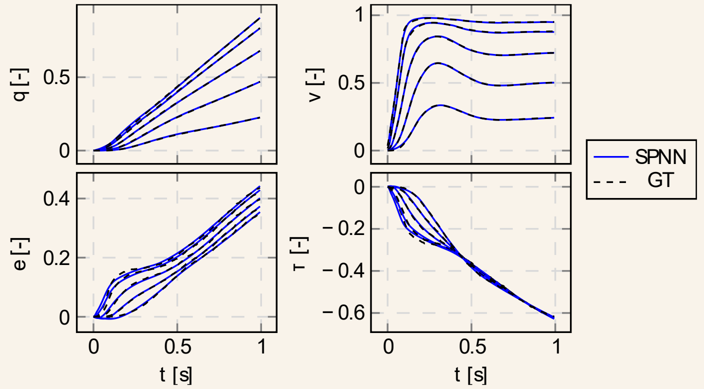
$\boldsymbol{q}_i$: Posición
$\boldsymbol{p}_i$: Momento
s_i: Entropía



- Flujo de Couette de fluido viscoelástico:



q_i: Posición
v_i: Velocidad
E_i: Energía interna
τ_i: Tensor de conformación



CONCLUSIONES

- La red neuronal GENERIC es capaz de aprender la dinámica de los ejemplos propuestos a partir de datos, sin necesidad de conocer previamente las ecuaciones que gobiernan el sistema.
- Las restricciones de la red aseguran que las estimaciones sean consistentes con las leyes de la termodinámica.
- El método es capaz de identificar los fenómenos conservativos y disipativos de un sistema físico.
- En caso de que el sistema tenga una alta dimensionalidad, el autoencoder es capaz de detectar la dimensionalidad efectiva del modelo reducido sin necesidad de conocerla de antemano,

[1] M. Raissi, P. Perdikaris, G.E. Kardianakis. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Pysics*, 2020

[2] S. Greydanus, M. Dzamba, J. Yosinski. Hamiltonian Neural Networks. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2019

[3] M. Grmela, H.C. Öttinger. Dynamics and thermodynamics of complex fluids. I. Development of a general formalism. *Physical Review E*, 1997.

[4] Q. Hernández, A. Badías, D. González, F. Chinesta, E. Cueto. Structure-preserving neural networks. *Journal of Computational Pysics*, 2020.

[5] Q. Hernández, A. Badías, D. González, F. Chinesta, E. Cueto. Deep learning of thermodynamics-aware reduced-order models from data. *ArXiv*, 2020.