

Superresolución con redes neuronales informadas por la termodinámica en problemas fluidodinámicos

Carlos Bemejo¹, Beatriz Moya¹, Alberto Badías², Francisco Chinesta³, Elías Cueto¹

¹ Applied Mechanics and Bioengineering (AMB)

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

²School of Aeronautical and Space Engineering (ETSIAE)

³ESI Chair PIMM Lab Arts et Métiers Institute of Technology - ENSAM

Resumen

El objetivo de este trabajo es la utilización de redes neuronales para obtener soluciones de alta resolución de un sistema dinámico cuando únicamente se dispone de medidas parciales. Para ello se utilizan sesgos inductivos que aplican los principios de la termodinámica, así como la aplicación de técnicas de superresolución.

Introducción

El uso de redes neuronales para modelizar problemas dinámicos complejos presenta dos desafíos que se deben abordar: la cantidad de datos necesaria para el entrenamiento de la red, y la potencia de cálculo necesaria para tratar dichos datos. Por tanto, este campo se centra parcialmente en el desarrollo de nuevas arquitecturas que guíen a la red hacia soluciones óptimas del problema de manera más rápida y sencilla con una cantidad de datos menor. Estas guías se denominan sesgos inductivos (*inductive biases*). Un sesgo inductivo ampliamente estudiado por parte de la comunidad científica es la imposición de leyes físicas en la estructura de la red. Un ejemplo de ello son las redes que garantizan el cumplimiento de los principios básicos de la termodinámica [1, 2]. El presente trabajo tiene como objetivo el aprendizaje de sistemas dinámicos complejos partiendo de observaciones con datos limitados, combinando sesgos inductivos con técnicas de superresolución.

Metodología

El trabajo combina tres redes neuronales. La primera de ellas aprende una codificación del problema en baja dimensionalidad. La segunda, realiza la predicción de la evolución dinámica del sistema.

Por último, una red es entrenada para conseguir un aumento en la resolución espacial de los resultados.

Adversarial Autoencoder (AAE)

Esta red permite obtener una representación de la información en un espacio reducido a partir de imágenes en baja resolución. La red utilizada es un *Adversarial Autoencoder* (AAE). Su característica principal es el uso de una red adicional denominada discriminador. La entrada del discriminador es el vector de variables en el espacio reducido obtenido por el AAE, el cual se compara con una distribución o *prior* que se desea que cumpla. La salida del discriminador mide si las variables en el espacio reducido se ajustan a la distribución propuesta.

Structure Preserving Neural Network (SPNN)

Para predecir la dinámica del flujo se ha utilizado una red denominada *Structure Preserving Neural Network* (SPNN) [2]. Esta arquitectura de red aplica sesgos inductivos basados en los principios de la termodinámica, lo que garantiza la consistencia física de la solución. Para ello, hace uso de una estructura metripéctica [3], utilizada en el formalismo GENERIC (*General Equation for Non-Equilibrium Reversible-Irreversible Coupling*) [4], dividiendo el sistema en una parte conservativa y una parte disipativa.

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

Las matrices \mathbf{L} y \mathbf{M} codifican la relación entre el vector de estados en el espacio reducido \mathbf{z} con la energía, E , y entropía, S , del sistema. Además, se garantiza que se cumplen las condiciones de degeneración, lo que implica que los resultados son termodinámicamente consistentes, satisfaciendo la primera y la segunda ley de la termodinámica.

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

Decoder Superresolución

Para aumentar la resolución de los campos de presión y velocidad se utiliza un decoder que genera la solución en alta resolución. La estructura de la red es similar a la presente en las *Generative Adversarial Networks* (GAN); el decoder produce una posible solución al problema, mientras que el discriminador analiza la validez de la solución. Ambas redes son entrenadas simultáneamente, lo que produce que la calidad del decoder mejore, mientras que el discriminador se vuelve más restrictivo.

Resultados

Para probar la efectividad del método, se han generado unos datos sintéticos mediante la simulación de un flujo turbulento sobre un fluido. Las simulaciones obtenidas se han utilizado para generar datos de entrenamiento en dos resoluciones diferentes.

En la Figura 1.a se pueden apreciar los resultados obtenidos por el AAE. El error relativo medio obtenido para las variables analizadas se sitúa entre el 1 – 2 %. La Figura 1.b muestra el resultado obtenido tras aplicar el aumento de resolución mediante el decoder. El error relativo al aumentar la resolución se sitúa por debajo del 10%.

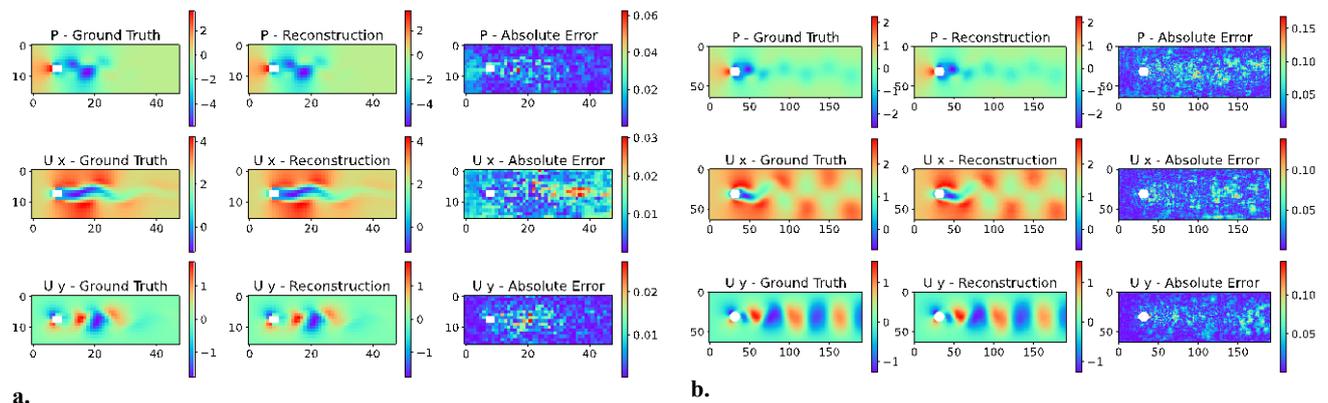


Figura 1. Comparación entre el *Ground Truth*, la predicción realizada por el AAE y error absoluto para los datos de simulación en baja resolución (a). Comparación entre el *Ground Truth*, la predicción realizada por el decoder, y mapa de error entre ambos al aplicar el proceso de superresolución (b).

Conclusiones

En el presente trabajo se ha conseguido aplicar superresolución a una simulación fluidodinámica partiendo únicamente de medidas parciales en espacio y del instante de tiempo inicial. La imposición de sesgos inductivos contribuye a la consistencia física del resultado de la red, mejorando la predicción de la dinámica del sistema y dotando a la red de una capacidad de generalización mayor que aquellas que no introducen ningún tipo de restricción física. Gracias a ello, se logra obtener una caracterización del comportamiento fluidodinámico en tiempo real.

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]. MORRISON, P.J. A paradigm for joined Hamiltonian and dissipative Systems. *Physica D: Nonlinear Phenomena*. 1986, 18(1-3), 410 - 419.
- [4]. 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.