

Aprendizaje automático de dinámica de fluidos mediante modelos de datos

Beatriz Moya¹, David González¹, Icíar Alfaro¹, Francisco Chinesta², 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: beam@unizar.es

²ENSAM ParisTech

Resumen

La simulación de fluidos en tiempo real es uno de los retos de la simulación creíble y, entre sus aplicaciones, el control de robots para la manipulación de líquidos. Un fenómeno importante en este ámbito es la salpicadura, para el cual proponemos un integrador capaz de trabajar en tiempo real.

Introducción

Los problemas de superficie libre han sido tradicionalmente estudiados mediante las ecuaciones de Navier Stokes. Sin embargo, el coste computacional es muy elevado, dificultando conseguir simulaciones en tiempo real. Por tanto, es un campo de investigación abierto al desarrollo de nuevas metodologías de cálculo que satisfagan esta limitación. Nuestra propuesta consiste en construir un esquema integrador a partir de datos pseudo-experimentales. Las técnicas tradicionales de aprendizaje de modelos, como el Machine y Deep Learning, presentan un elevado rendimiento. Sin embargo, para conseguir dichos resultados, se necesita un entrenamiento con una gran cantidad de datos. Además, carecen de generalización. A diferencia de estos métodos, nuestra aproximación tiene en cuenta la física del fenómeno. En nuestro integrador se asegura específicamente el cumplimiento de las leyes de la termodinámica para que el modelo sea físicamente consistente.

Nuestra hipótesis es considerar la existencia de un *slow manifold* donde vive el fluido. Así pues, el objetivo de nuestro trabajo es, primero, obtener la estructura del *manifold* en el que evoluciona la dinámica y, entonces, ser capaces de integrar las ecuaciones de movimiento en él.

Busqueda del *slow manifold*

Los datos pseudo-experimentales se han obtenido de la simulación del fenómeno de salpicadura ante

diferentes condiciones iniciales de velocidad para construir el *manifold* de la dinámica.

Además, se ha aplicado la teoría de Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH), método sin malla que permite modelar una amplia variedad de fenómenos complejos mediante la discretización del objeto de estudio en partículas. Como resultado se obtienen los valores de las variables de estado para cada partícula en instantes discretizados de tiempo.

Para definir el estado de nuestro fluido se necesitan conocer la posición, velocidad y energía interna de cada partícula. Con estas siete variables, evaluadas en cada una de las partículas en las que se discretiza el volumen de fluido, se construye el *manifold* de la salpicadura. Sin embargo, con esta descripción, la dimensionalidad del problema es muy elevada. Este hecho justifica el interés en reducir su dimensionalidad mediante técnicas de reducción de modelos.

Técnicas de manifold learning

Partimos de la premisa de que la dinámica de nuestro caso de estudio evoluciona en un *slow manifold*, de dimensionalidad R^D descrito por los datos obtenidos (Ver Figura 1). A través de técnicas de *manifold learning* proyectaremos los datos a un espacio reducido R^d , con $d \ll D$, donde se integrará la dinámica. En primera instancia se ha empleado el método lineal Proper Orthogonal Decomposition (POD) [1]. Dada la naturaleza no lineal de la dinámica también se han aplicado técnicas no lineales; Locally Linear Embedding (LLE) [2] y Topological Data Analysis (TDA) [3].

Integración en el *slow manifold*

El integrador se ha construido a partir de la discretización del formalismo GENERIC (General Equation for Non-Equilibrium Reversible-Irreversible Coupling) [4]. Con él se consigue

describir las variables de estado a partir del análisis de la evolución de energía y entropía del sistema. GENERIC se expresa de la siguiente manera:

$$\frac{dz}{dt} = \mathbf{L} \frac{\partial E}{\partial z} + \mathbf{M} \frac{\partial S}{\partial z}, \quad (1)$$

siendo E y S la energía y la entropía respectivamente, y L y M las matrices de Poisson y fricción. Los valores numéricos de estas variables son determinados mediante regresión numérica para construir el *constitutive manifold* [5] de la salpicadura con el objetivo de trabajar de una forma puramente numérica. Como resultado, se obtiene un esquema integrador en el espacio reducido para simular la salpicadura bajo cualquier valor de velocidad inicial:

$$\xi_{n+1} = \xi_n + \Delta t [\mathbf{L}(\xi_n) \mathbf{A}(\xi_n) + \mathbf{M}(\xi_n) \mathbf{B}(\xi_n)] \mathbf{L}(\xi_n), \quad (2)$$

donde A y B representan la energía y entropía discretizadas.

Resultados

Se han comparado los resultados de la aplicación de las tres distintas estrategias de reducción elegidas [6]. POD requiere un número elevado de modos para captar las características de la dinámica, por lo que resulta ineficiente. Sin embargo, los métodos no lineales consiguen encontrar un espacio reducido en el que integrar la dinámica. Como resultado se obtiene un integrador que satisface la restricción de simulación en tiempo real a la vez que proporciona

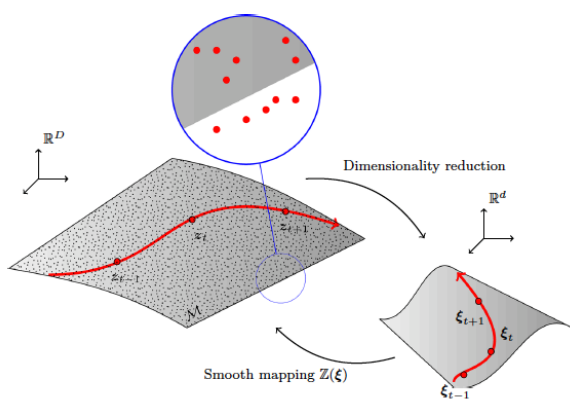


Fig. 2. Representación de la hipótesis de existencia de un manifold donde vive el fluido en el espacio R^D . Los datos son proyectados a un espacio R^d , con $d \ll D$, en el que se integra la dinámica.

un error de simulación reducido. En la Figura 2 se representan los resultados en instantes críticos de la integración de una trayectoria nueva. El error de la superficie libres es inferior al 6% a lo largo de la simulación, suficiente para realizar aplicaciones de visión por computador.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo del Ministerio de Economía y Competitividad de España (beca DPI2015-72365-EXP), y del Gobierno de Aragón y el Fondo Social Europeo (grupo de investigación T24 17R).

REFERENCIAS

- [1]. HUNG.V. Ly and HIEN T. Tran, Modeling and control of physical processes using proper orthogonal decomposition. *Mathematical and computer modelling* 33(1-3), 223 (2001)
- [2]. ROWEIS S. T. and SAUL L. K. Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding. *Science*, 290(5500):2323{2326, 2000.
- [3]. WASSERMAN L., *Annual Review of Statistics and Its Application* 5(1), 501 (2018). DOI 10.1146/annurev-statistics-031017-100045.
- [4]. ÖTTINGER H.C., *Beyond Equilibrium Thermodynamics* (Wiley, 2005)
- [5]. IBÁÑEZ R., BORZACHIELLO D., AGUADO J.V., ABISSET-CHAVANNE E, CUETO E., LADEVEZE P., CHINESTA F., *Computational Mechanics* 60(5), 813 (2017). DOI 10.1007/s00466-017- 1440-1.
- [6]. MOYA B., GONZALEZ D., ALFARO I., CHINESTA F., CUETO E. Learning Slosh Dynamics by means of data. *Computational Mechanics* (2019). P1:13 DOI 10.1007/s00466-019-01705-3.

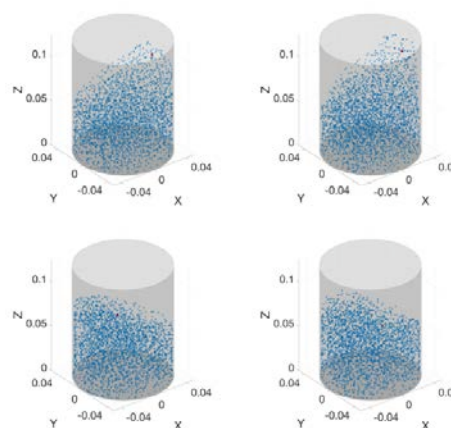


Fig. 1. Comparación entre los resultados obtenidos (izquierda) y datos pseudoexperimentales (derecha) en los instantes 28 y 115. La partícula 1 ha sido resaltada en rojo.