

Cuando la física y la inteligencia artificial se unen para modelar fluidos

Zoila Sánchez López, Gabriela Berenice Díaz Cortés, Galileo Domínguez Zacarías

Instituto Mexicano del Petróleo, Eje Central Lázaro Cárdenas Norte 152, Col. San Bartolo Atepehuacán, Gustavo A. Madero, C.P. 07730, Ciudad de México
poszsanchez@imp.mx, gbdiaz@imp.mx, gdzacari@imp.mx

Resumen

Este artículo explora la convergencia entre la física y la inteligencia artificial en el modelado de fluidos, centrándose en el uso de redes neuronales artificiales (RNA) para resolver problemas de dinámica de fluidos. Se analizan los beneficios de emplear redes neuronales en este contexto, se ofrece una introducción concisa a este tipo de redes y se explican algunos términos básicos de su funcionamiento. Se aborda, tanto el enfoque tradicional en el modelado de fluidos, como las aplicaciones de las redes neuronales en este campo, concluyendo con una breve reflexión sobre el potencial de esta metodología emergente.

Palabras clave:

RNA, métodos numéricos, dinámica de fluidos

Introducción

Los métodos numéricos tradicionales para el análisis de dinámica de fluidos, como la Dinámica de Fluidos Computacional (CFD, por sus siglas en inglés), han sido comunes debido a su simplicidad y capacidad para proporcionar detalles del flujo. Sin embargo,

tienen limitaciones, especialmente en sistemas complejos o que requieren modelado preciso. Ejemplos de esto incluyen la simulación de la dinámica del flujo sanguíneo y su interacción con la pared arterial, que requiere el desarrollo de modelos capaces de capturar las variaciones durante el ciclo cardíaco (Caballero, 2013). Otro ejemplo es el modelado de la dispersión de contaminación atmosférica urbana, donde existen desafíos para capturar completamente todos los aspectos físicos relevantes para el modelado en entornos urbanos realista (Pantusheva, 2022).

Para el modelado de estos fenómenos, algunos métodos requieren la generación de una malla, que es una estructura de puntos que cubre y divide la región en donde se modelan los fenómenos en elementos más pequeños. La generación de la malla provoca limitaciones a la simulación que incluyen el tiempo y los recursos computacionales requeridos. Estas limitaciones, sumadas al crecimiento exponencial de la Inteligencia Artificial (IA) en los últimos años junto con la introducción de técnicas de Aprendizaje Profundo (AP), han llevado a que cada vez

más autores utilicen métodos basados en datos y recientemente basados en modelos físicos, para la resolución de problemas de dinámica de fluidos en lugar de los métodos tradicionales basados en mallas.

Las Redes Neuronales Artificiales (RNA) se han utilizado para predecir características del flujo alrededor de geometrías simples de manera precisa y rápida, este enfoque tiene el potencial de reducir significativamente el tiempo computacional en comparación con los métodos de CFD (Guo, 2016). También han demostrado ser eficaces en la predicción de flujos tridimensionales (Mohan, 2019), así como en la predicción de flujos no estacionarios bajo distintas dinámicas de flujo, mostrando concordancia entre los resultados obtenidos con las RNA y los datos de CFD reales (Han R. W., 2019). Estudios adicionales han explorado su utilidad en la predicción de flujos no estacionarios (Portal-Porras K. F.-G.-F., 2023) y en la predicción de flujos no estacionarios con geometrías móviles (Han R. K., 2021). Las RNA son poderosas herramientas computacionales que destacan por su capacidad para aprender, generalizar y adaptarse. La capacidad de generalización permite que la red neuronal produzca resultados aceptables para entradas no vistas durante el entrenamiento, lo que posibilita la resolución de problemas complejos a gran escala que de otra manera serían difíciles de abordar, como la predicción del clima utilizando análisis de datos masivos (Reddy, 2017) y la predicción en tiempo real de sistemas (Fayaz, 2023).

Su capacidad de adaptabilidad les permite ajustar sus parámetros para enfrentar cambios en el entorno circundante, garantizando su efectividad incluso en entornos

no estacionarios, es decir, en donde las variables cambian con el tiempo. Además, su naturaleza no lineal les permite capturar relaciones complejas entre las entradas y las salidas, lo que resulta fundamental en campos con fenómenos no lineales (Haykin, 1998). Por ejemplo, el flujo multifásico en medios porosos heterogéneos (Yan, 2022) y flujos a alta velocidad (Mao, 2020).

Las RNA ofrecen una ventaja significativa en la resolución de ecuaciones diferenciales, ya que su complejidad computacional no aumenta rápidamente con el incremento de puntos de muestreo, a diferencia de los métodos numéricos convencionales. La complejidad computacional se refiere a la cantidad de recursos computacionales necesarios para resolver una tarea dada, incluyendo tanto el tiempo de cómputo (cuántas operaciones debe realizar la computadora) como la memoria requerida (cuánta información debe almacenar la computadora durante el proceso de resolución). Este enfoque de RNA es además versátil y puede aplicarse a sistemas definidos en límites de formas arbitrarias (Yadav, 2015).

¿Qué son las RNA y cómo funcionan?

En el contexto del sistema nervioso, las neuronas son las unidades fundamentales, básicas y esenciales del cerebro, cada una compuesta por un cuerpo celular, dendritas y un axón (ver Figura 1).

El cuerpo celular contiene el núcleo y es donde se lleva a cabo la síntesis de proteínas. Las dendritas reciben señales de otras neuronas, mientras que el axón conduce las señales eléctricas, conocidas como potenciales de acción, hasta las terminales presinápticas. Estas señales son uniformes, y el

cerebro las interpreta según los patrones de señales recibidas, determinando así el tipo de información transmitida.

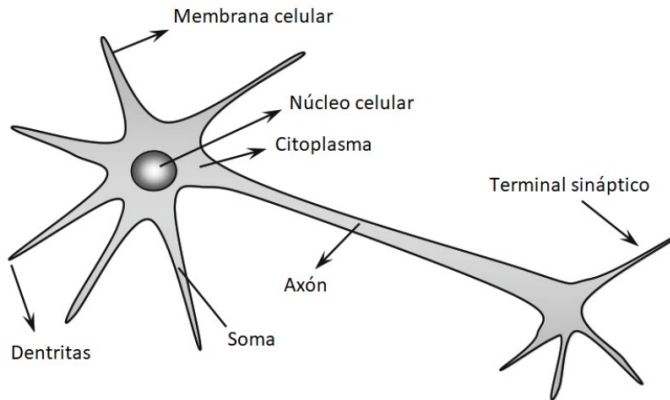


Figura 1. Partes que conforman una neurona biológica. Imagen editada de (Silva, 2016)

Análogamente, las RNA, inspiradas en las redes neuronales biológicas del cerebro humano, se componen de elementos que imitan las funciones básicas de las neuronas biológicas.

En los años formativos de las RNA (1943-1958), varios investigadores destacan por sus contribuciones pioneras, entre ellos McCulloch y Pitts (1943) por crear el primer modelo matemático inspirado en las neuronas biológicas, iniciando así el desarrollo de la neurona artificial. Esta introducción condujo al surgimiento de las RNA, utilizando neuronas simplificadas modeladas según estructuras biológicas para realizar tareas computacionales.

Otro de los pioneros y considerado el fundador de la neurocomputación fue Rosenblatt, quien propuso en 1958 el perceptrón, que es la forma más simple de una red neuronal utilizada para el reconocimiento de patrones. Básicamente, consiste en una sola neurona con pesos sinápticos y sesgo ajustables.

Las RNA se pueden utilizar como predictores. A partir de datos de entrada producen una salida que se ajusta iterativamente comparándola con valores conocidos, hasta que la predicción se aproxima considerablemente al valor esperado. A continuación, se ofrecen más detalles sobre el funcionamiento de las RNA.

Una neurona es una unidad de procesamiento de información fundamental para el funcionamiento de una red neuronal, como se muestra en la Figura 2. Consiste en una combinación lineal de las entradas ($x_1; x_2; \dots; x_m$). Cada entrada está asociada con un peso ($w_{k1}; w_{k2}; \dots; w_{km}$), que son valores desconocidos que determinan la importancia de los valores iniciales en el cálculo. Durante el entrenamiento de la neurona, estos pesos se modifican para minimizar el error. Los pesos se multiplican por las entradas y se les suma un sesgo (b_k). Este sesgo permite a la neurona realizar un desplazamiento o ajuste.

Después de combinar las entradas ponderadas y el sesgo, se aplica una función de activación ($\varphi(\cdot)$). Esta función cambia dependiendo del tipo de problema que se tiene, para que la neurona prediga correctamente las salidas esperadas. La salida resultante $\hat{y}_k$ de la función de activación representa la predicción o resultado final de la neurona.

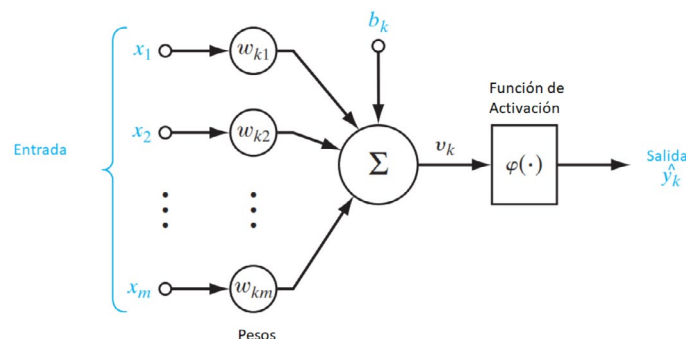


Figura 2. Esquema de la unidad fundamental de las RNA la Neurona. Imagen modificada de (Simon, 2009)

En términos matemáticos podemos describir la salida de la neurona con la siguiente ecuación:

$$\hat{y}_k = \varphi(\omega_{k1}x_1 + \omega_{k2}x_2 + \dots \omega_{kn}x_m + b_k). \quad (1)$$

Cada neurona realiza las operaciones matemáticas descritas anteriormente, generando una salida como se muestra en la ecuación (1). Esta salida se convierte entonces en la entrada para cada neurona de la capa siguiente, y así sucesivamente hasta alcanzar la capa de salida.

Con esta unidad básica se puede construir diferentes arquitecturas de RNA. Un ejemplo es la red perceptrón multicapa (ver Figura 3), que consta de una capa de entrada, dos o más capas ocultas y una capa de salida. Cada capa está constituida por varias neuronas, y la red está completamente conectada, es decir, cada neurona en cualquier capa de la red está conectada a todas las neuronas en la capa anterior. El flujo de señal a través de la red avanza en dirección hacia adelante, de izquierda a derecha.

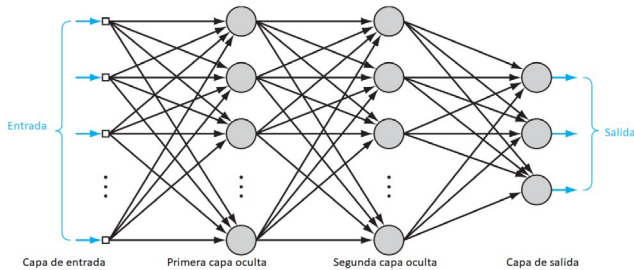


Figura 3. Arquitectura de un perceptrón multicapa con dos capas ocultas. Imagen modificada de (Simon, 2009)

Las RNA tienen la capacidad de aprender de la experiencia, generalizar conocimientos de ejemplos anteriores a nuevos ejemplos y abstraer las características principales de conjuntos de datos.

La función de costo se utiliza para medir el rendimiento del modelo, comúnmente es el error cuadrático medio (MSE, por sus siglas

en inglés). Para todo el conjunto de datos de entrada etiquetado, el conjunto de datos comprende un vector con una etiqueta para cada ejemplo $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^m$ se calcula el promedio del MSE de todos los m ejemplos de la siguiente manera:

$$MSE = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (y_i - \hat{y}_i)^2. \quad (2)$$

Cuanto más se acerque la predicción $\hat{y}_i$ al valor de y_i , menor será el error y se espera que el modelo funcione mejor.

Ahora la pregunta es cómo encontrar los parámetros óptimos ω y b que produzcan una buena predicción. Esta tarea puede interpretarse como un problema de optimización con el objetivo de minimizar la función de costo $L(\omega, b)$. Sustituyendo (1) en (2) se obtiene la función de costo $L(\omega, b)$ en función de los parámetros ω y b .

$$L(\omega, b) = MSE = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (y_i - \varphi(\omega_{k1}x_1 + \omega_{k2}x_2 + \dots \omega_{kn}x_m + b_k))^2. \quad (3)$$

Encontrar los parámetros óptimos de la RNA puede realizarse mediante cualquier técnica de optimización. Una opción popular es el algoritmo iterativo de descenso de gradiente, el cual encuentra un mínimo local de una función tomando pasos proporcionales al negativo del gradiente de la función en un punto dado. El gradiente apunta en la dirección del ascenso más pronunciado, por lo tanto, un pequeño paso en la dirección opuesta conduce a una minimización de la función.

Es decir, los pesos y los sesgos se actualizan de la siguiente manera:

$$\omega_{n+1} = \omega_n - \eta \nabla_{\omega} L(\omega, b), \quad (4a)$$

$$b_{n+1} = b_n - \eta \nabla_b L(\omega, b). \quad (4b)$$

Donde η es la tasa de aprendizaje o tamaño de paso, los términos $\nabla_{\omega} L(\omega, b)$ y $\nabla_b L(\omega, b)$ son las derivadas de la función de costo respecto

a los pesos y a los sesgos respectivamente. Esta actualización de pesos y sesgos se lleva a cabo hasta que la función de pérdida sea tan cercana a cero como queramos.

La diferencia clave entre el aprendizaje automático y la resolución de un problema de optimización es que el primero adopta un modelo utilizando los ejemplos de entrenamiento y luego lo evalúa en el conjunto de prueba para hacer predicciones sobre datos previamente no vistos.

La mayoría de los algoritmos de aprendizaje automático se pueden descomponer en las siguientes características: un conjunto de datos, una función de costo, un procedimiento de optimización y un modelo parametrizado. Generalmente, la función de costo define un criterio de optimización relacionando los datos etiquetados con los parámetros del modelo. Además, el procedimiento de optimización busca los parámetros del modelo que representen mejor los datos proporcionados.

Modelado tradicional de fluidos

La Dinámica de Fluidos Computacional (CFD, por sus siglas en inglés *Computational Fluid Dynamics*) es un campo que se enfoca en la simulación numérica de flujos de fluido, transferencia de calor y fenómenos relacionados, como reacciones químicas y aeroacústica. Surge de la combinación de la mecánica de fluidos y el cálculo numérico, utilizando ecuaciones derivadas de la mecánica de fluidos y resolviéndolas con métodos numéricos.

En los últimos años, el CFD ha ganado importancia como herramienta para analizar sistemas que involucran fenómenos físicos y químicos asociados al movimiento de

fluidos. Estos fenómenos pueden incluir la transferencia de masa, cantidad de movimiento, energía y especies químicas, ya sea reactivas o no, entre diferentes regiones o intervalos de tiempo. Este auge es debido, en parte, a que cada día se tienen mejores equipos de cómputo, con más capacidad (memoria y rapidez) y con menor costo, así como algoritmos y modelos que pueden representar de manera confiable los fenómenos presentes en el flujo de fluidos del sistema a analizar. Además, el análisis con esta herramienta puede ser más económico que el trabajo experimental, tanto en tiempo como en recursos económicos. Sin embargo, su uso sigue siendo mayoritariamente complementario, ya que, en determinado momento, se tienen que validar las predicciones con datos experimentales o hacer una verificación con datos de correlaciones, en los que no siempre se puede tener mediciones detalladas de parámetros físicos y químicos del sistema.

Para el modelado de los fluidos se han desarrollado diversos métodos, entre los que tenemos los métodos de discretización como el método de las diferencias finitas, el método de los elementos finitos y el método de los volúmenes finitos, siendo este último el más utilizado en CFD. Con estos métodos, se intercambia el dominio continuo por un dominio discreto, donde un conjunto de volúmenes de control es utilizado para representar el dominio original.

El método de volúmenes finitos propone una forma de llevar a cabo esa discretización. En particular, establece que los valores discretos de ϕ quedarán descritos por un conjunto de ecuaciones algebraicas que relacionan el valor de la variable en un punto con el valor en los puntos vecinos. La

forma en que se transmite la información entre esos nodos requiere de algún tipo de aproximación, que en el caso de volúmenes finitos es mediante esquemas conservativos que evalúan los flujos a través de superficies de control.

Las RNA han surgido para complementar a los métodos clásicos. En años recientes, junto con numerosas aplicaciones prácticas en diferentes áreas del conocimiento, nuevas y diferentes investigaciones han permitido avances teóricos en RNA. Algunas aplicaciones se muestran en la siguiente sección.

Modelado y aplicaciones de fluidos mediante RNA en distintas áreas

Las RNA han comenzado a utilizarse para resolver ecuaciones diferenciales parciales (Raissi, 2019), como la ecuación de Reynolds estacionaria unidimensional (Almqvist, 2021). Esta ecuación describe el flujo de un fluido con viscosidad y densidad constantes en una película delgada, típicamente entre dos superficies en movimiento relativo. La ecuación modela cómo la presión del fluido varía a lo largo del espesor de la película lubricante, proporcionando la distribución de presión en la interfaz entre las superficies.

La solución de esta ecuación puede aplicarse en sistemas mecánicos con movimiento relativo entre dos partes, como en el cálculo de la distribución de presión en cojinetes deslizantes lineales lubricados (ver Figura 4, izquierda). Estos lubricantes se utilizan para reducir la fricción y el desgaste, prolongando así la vida útil de los componentes mecánicos.

La solución proporcionada por la RNA muestra la distribución de presión en el eje y (ver Figura 4, derecha), mientras que en el eje

x se representa la posición adimensional. Esta solución se compara con la solución analítica (Almqvist, 2021).

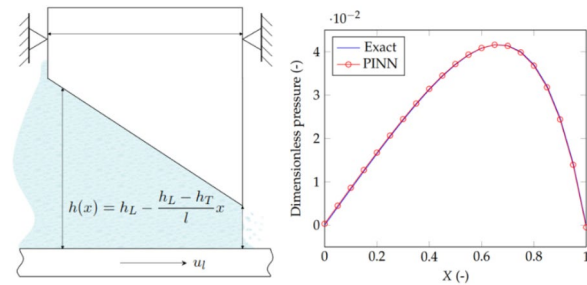


Figura 4. (Izquierda) geometría del cojinete deslizante lineal tiene una longitud l y se mueve con una velocidad u_l . La función de espesor de película h describe la geometría del cojinete deslizante lineal. (Derecha) comparación entre la solución obtenida por la RNA (línea roja con marcadores circulares) y la solución exacta obtenida por integración (línea continua azul). Imagen tomada de (Almqvist, 2021)

También se han utilizado las RNA en diversos campos, uno de ellos es el de la medicina (Ver Figura 5) se utiliza para ayudar a evaluar y guiar la terapia a pacientes con fibrilación auricular, una arritmia cardíaca común y un importante problema de salud, cuyos mecanismos no se comprenden completamente y cuyas terapias clínicas tienen resultados insatisfactorios a largo plazo (Roy, 2020).

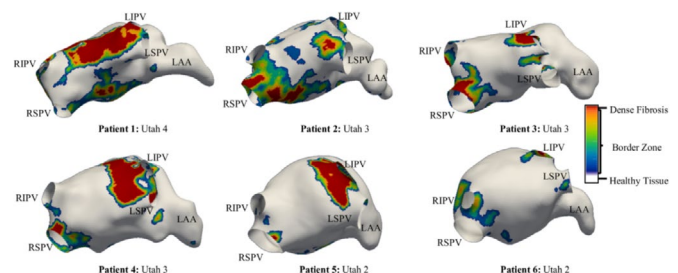


Figura 5. Distribución de fibrosis específica del paciente, en 6 pacientes con fibrilación auricular (FA) con puntajes de Utah de 2 a 4. Las regiones fibrosas están codificadas por colores para mostrar tejido fibroso denso (rojo) rodeado por una Zona de Transición (BZ) de propiedades intermedias. El atrio sano se muestra en blanco. LIPV: vena pulmonar inferior izquierda, RIPV: vena pulmonar inferior derecha, LSPV: vena pulmonar superior izquierda, RSPV: vena pulmonar superior derecha y LAA: Apéndice Auricular Izquierdo. Imagen tomada de (Roy, 2020)

Otro de los campos donde se han utilizado las RNA es en la simulación, desarrollando un solucionador de fluidos (Takahashi, 2019) para simular materiales viscosos y sus interacciones con objetos sólidos (ver Figura 6). Estos autores verificaron la precisión del método comparando los resultados con soluciones analíticas y demostrando la efectividad en diversos escenarios desafiantes.



Figura 6. Tres engranajes interactuando con fluidos viscosos de diferentes valores de viscosidad, el modelo tiene en cuenta los efectos de arrastre, que pueden acelerar y desacelerar las velocidades angulares de los engranajes. Imagen tomada de (Takahashi, 2019)

Otro ejemplo, en el mismo campo de simulación, es el desarrollo de una RNA diseñada para aprender a simular sistemas complejos a partir de datos. Esta RNA puede aprender a simular una amplia variedad de dominios físicos desafiantes que involucran fluidos, sólidos rígidos y materiales deformables interactuando entre sí (Sanchez-Gonzalez, 2020).

El estudio exploró cómo la RNA aprende a simular utilizando conjuntos de datos que incluyen tres materiales físicos diversos y complejos: agua, arena y un fluido viscoso deformable (ver Figura 7). Los resultados se validaron comparando la solución obtenida con datos medidos que representan la respuesta real de los materiales, utilizaron el error cuadrático medio (MSE) como su métrica principal, entre otras métricas. Además, se realizó una comparación cuantitativa con otro modelo utilizado también para simular la dinámica de fluidos, y se

encontró que el modelo propuesto es más simple, más preciso y tiene una mejor capacidad de generalización.

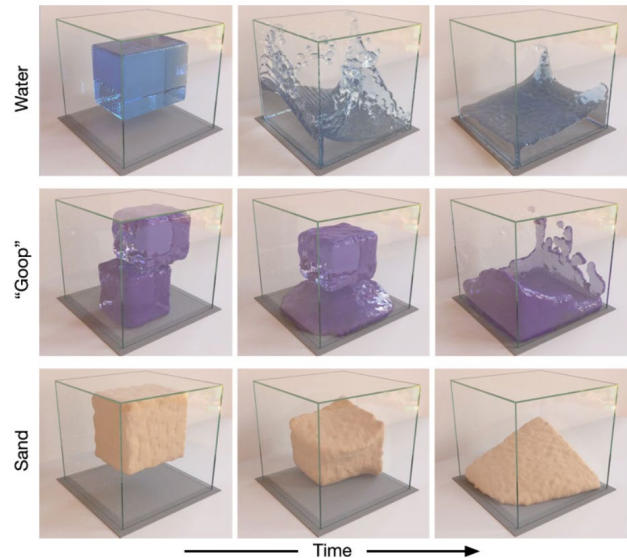


Figura 7. Simulación de materiales (Agua (WATER), fluido viscoso (GOOP) y arena (SAND)) eje y a resoluciones suficientes para la generación de imágenes de alta calidad, eje x tiempo. Imagen tomada de (Sanchez-Gonzalez, 2020)

Conclusiones

La Inteligencia Artificial (y especialmente el uso de RNA en la dinámica de fluidos) representa un avance significativo en la resolución de problemas complejos y promete mejorar la eficiencia y precisión en la simulación y análisis de estos sistemas. A pesar de que los primeros artículos sobre RNA fueron publicados hace más de 50 años, este campo ha sido objeto de investigación en profundidad desde principios de los años 90, y aún conserva un enorme potencial de investigación.

Mientras que el modelado tradicional de fluidos a través del CFD sigue siendo una herramienta fundamental en la ingeniería y la investigación, las RNA ofrecen una oportunidad emocionante para mejorar y complementar los enfoques existentes. Esto abre nuevas posibilidades en el análisis

de sistemas fluidodinámicos y proporciona una alternativa prometedora para abordar problemas complejos.

Las aplicaciones de las RNA para predecir características del flujo alrededor de geometrías simples de manera precisa y rápida tienen el potencial de reducir significativamente el tiempo computacional en comparación con los métodos de CFD (Guo, 2016). También han demostrado ser eficaces en la predicción de flujos tridimensionales (Mohan, 2019) y flujos no estacionarios bajo distintas dinámicas de flujo, mostrando concordancia entre los resultados obtenidos con las RNA y los datos de CFD reales (Han R. W., 2019). Estudios adicionales han explorado su utilidad en la predicción de flujos no estacionarios (Portal-Porras, 2023) incluyendo aquellos con geometrías móviles (Han R. K., 2021), en la resolución de ecuaciones diferenciales parciales (Almqvist, 2021) y en la simulación de fluidos (Takahashi, 2019), (Sanchez-Gonzalez, 2020), lo que refleja la amplia aplicabilidad potencial de las redes neuronales para resolver problemas en dinámica de fluidos, así como en diversas áreas de las ciencias y la ingeniería.

Referencias

- Almqvist, A. (2021). Fundamentals of physics-informed neural networks applied to solve the Reynolds boundary value problem. *Lubricants*.
- Anowar, F. &. (2020). Incremental neural-network learning for big fraud data. . IEEE international conference on systems, man, and cybernetics (SMC).
- Caballero, A. D. (2013). A review on computational fluid dynamics modelling in human thoracic aorta. *Cardiovascular Engineering and Technology*.
- Fayaz, J. &. (2023). A deep neural network framework for real-time on-site estimation of acceleration response spectra of seismic ground motions. *Computer-Aided Civil and Infrastructure Engineering*.
- Guo, X. L. (2016). Convolutional neural networks for steady flow approximation. In *Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD international conference on knowledge discovery and data mining*, pp. 481-490.
- Han, R. K. (2021). Hybrid deep neural network based prediction method for unsteady flows with moving boundary. *Acta Mechanica Sinica*, 1557-1566.
- Han, R. W. (2019). A novel spatial-temporal prediction method for unsteady wake flows based on hybrid deep neural network. *Physics of Fluids*, 31(12).
- Haykin, S. (1998). *Neural networks: a comprehensive foundation*. Prentice Hall PTR.
- Kollmannsberger, S. D. (2021). *Deep learning in computational mechanics*. Springer International Publishing.
- Mao, Z. J. (2020). Physics-informed neural networks for high-speed flows. . *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*.
- Mohan, A. D. (2019). Compressed convolutional LSTM: An efficient deep learning framework to model high fidelity 3D turbulence. *arXiv preprint*.
- Pantusheva, M. M.-A. (2022). Air pollution dispersion modelling in urban environment using CFD: a systematic review. *Atmosphere*.
- Portal-Porras, K. F.-G.-A. (2021). Alternative artificial neural network structures for turbulent flow velocity field prediction. *Mathematics*.
- Portal-Porras, K. F.-G.-F. (2023). Hybrid LSTM+ CNN architecture for unsteady flow prediction. *Materials Today Communications*.
- Raissi, M. P. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational physics*.
- Reddy, P. C. (2017). Survey on weather prediction using big data analytics.
- Roy, A. V. (2020). Identifying locations of re-entrant drivers from patient-specific distribution of fibrosis in the left atrium. *PLoS computational biology*.
- Sanchez-Gonzalez, A. G. (2020). Learning to simulate complex physics with graph networks. In *International conference on machine learning*, pp. 8459-8468.
- Silva, I. N. (2016). *Artificial neural networks: a practical course*. Springer.
- Simon, H. (2009). *Neural networks and learning machines*.
- Takahashi, T. &. (2019). A Geometrically Consistent Viscous Fluid Solver with Two-Way Fluid-Solid Coupling. In *Computer Graphics Forum*, pp. 49-58.
- Tinoco, E. N. (2005). Progress toward CFD for full flight envelope. *The Aeronautical Journal*.
- Yadav, N. Y. (2015). An introduction to neural network methods for differential equations. Berlin: Springer.
- Yan, B. H. (2022). A gradient-based deep neural network model for simulating multiphase flow in porous media. *Journal of Computational Physics*.
- Zerdoumi, S. S. (2018). Image pattern recognition in big data: taxonomy and open challenges: survey. *Multimedia Tools and Applications*.