

Machine Learning for Physics-Informed Generation of Dispersed Multiphase Flow Using Generative Adversarial Networks

B. Siddani^a, S. Balachandar^{a,*}, W. C. Moore^a, Y. Yang^a, R. Fang^b

^a*Center for Compressible Multiphase Turbulence, University of Florida, Gainesville, FL 32611, USA*

^b*J. Crayton Pruitt Family Department of Biomedical Engineering, University of Florida, Gainesville, FL 32611, USA*

Presentación del artículo para Seminario en redes neuronales
basadas en la Física (PINNs)

Facultad de Ingeniería

Octubre 2024

Estudiante: Rafael Rosa



Introducción al tema

- **Flujo disperso multifase**

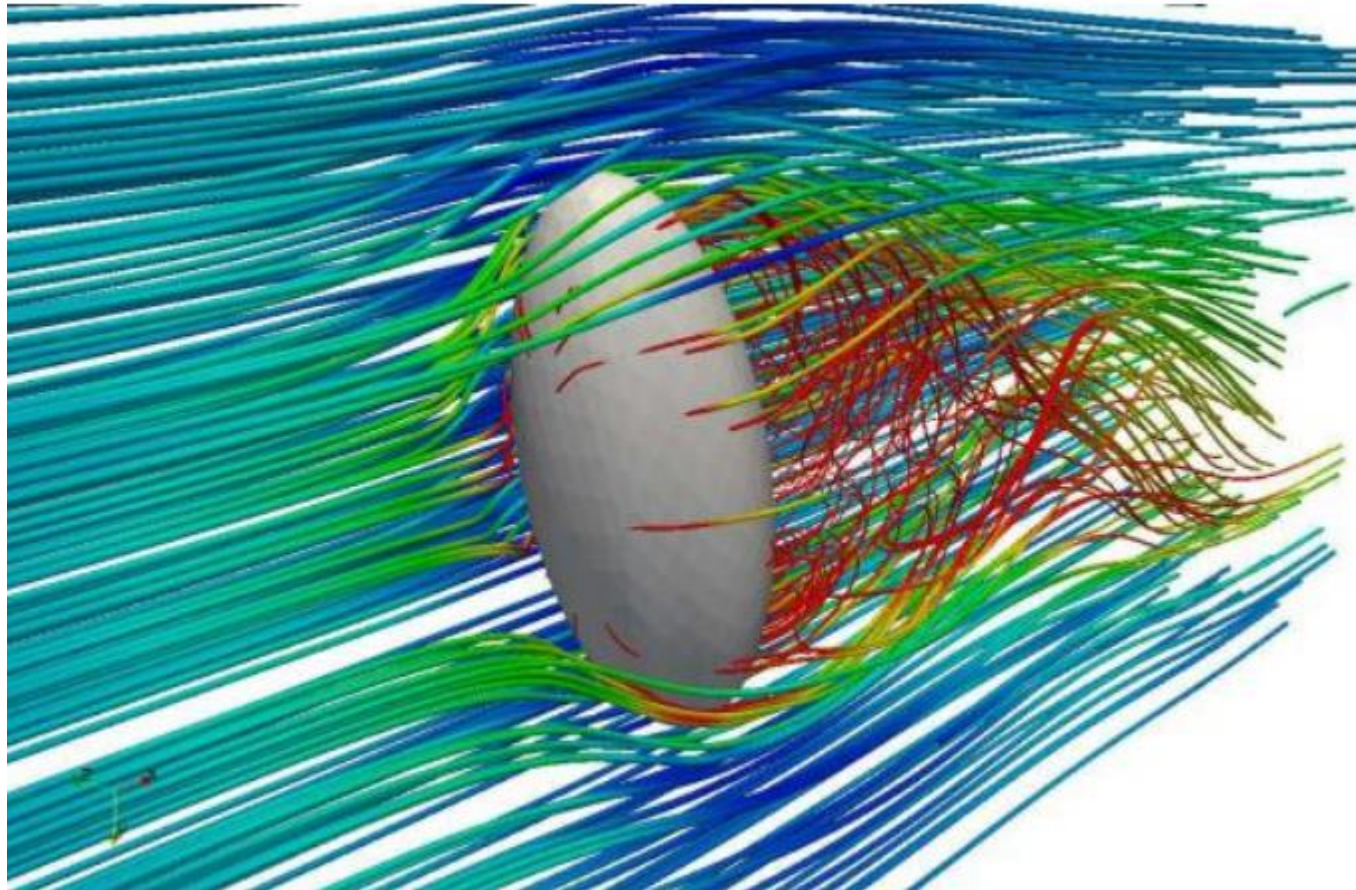
Son flujos que contienen elementos dispersos, por ejemplo, partículas que se distribuyen en una fase continua (el fluido). La interacción entre la fase dispersa y la fase continua depende de la distribución espacial, el tamaño, la densidad, la fracción de volumen y otras propiedades de las partículas.

- **Aplicaciones**

Ejemplos de aplicación de estos flujos es la modelación de la dispersión de partículas, transporte de sedimentos en ríos o transportes en la atmósfera.

Introducción al tema

- **Flujo turbulento y laminar**



Introducción al tema

• Ecuaciones de Navier Stokes (N-S)

Son ecuaciones que describen el movimiento de un fluido.

Conservación del momento:

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{f}$$

- \mathbf{u} vector de velocidad del fluido en (x,y,z)
- $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}$ es la derivada parcial de la velocidad en las tres direcciones.
- $\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$ describe cómo el fluido se mueve y acelera.
- ρ es la densidad del fluido.
- ∇p gradiente de presión.
- μ es la viscosidad dinámica.
- $\nabla^2 \mathbf{u}$ es el Laplaciano del campo de velocidad..
- \mathbf{f} representa las fuerzas externas actuando sobre el fluido.

Conservación de masa:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

- Fluido incompresible

Número de Reynolds

El número de Reynolds (Re) es una medida de la relación entre las fuerzas de cinemáticas y de viscosidad de un fluido. Nos da una idea de si el fluido está ordenado (laminar – $Re < 2300$) o desordenado (turbulento – $Re > 4000$). Mayor Re implica mayor dominación de las fuerzas cinemáticas sobre las viscosas y por lo tanto un flujo turbulento.

Dominio de aplicación

- **Breve resumen de la aplicación:**

El trabajo presenta una aplicación que utiliza Machine Learning (ML) (específicamente redes neuronales) para recrear el flujo dentro de una “caja periódica” con partículas de igual tamaño y dispersas aleatoriamente.

En el caso del uso de ML, no se utiliza el dominio entero de cálculo, sino que se utiliza un enfoque local.

- **Dominio de aplicación**

El dominio de aplicación será el cubo periódico de lado 3π adimensional. Dada la ubicación y el movimiento de una partícula de referencia, junto con la localización y movimiento de sus vecinos más cercanos (por ejemplo, 10 vecinos) el objetivo es predecir el flujo alrededor de la partícula de referencia.

Dominio de aplicación

- **Input del modelo**

La lista de posiciones relativas de las partículas más cercanas que están en el vecindario y el número de Reynolds (calculado basado en la velocidad media del fluido dentro del sub dominio y el diámetro de las partículas).

- **Output del modelo**

Predicción precisa del campo de velocidades y presiones dentro del sub dominio, que luego se puede refinar con foco en la partícula de referencia.

- **Simulación de datos de entrenamiento**

Se requieren resultados de la simulación numérica directa (DNS) para entrenar a la red neuronal que va a producir flujo sintético. Se simula un gradiente de presión en la dirección x, lo cuál la convierte en la dirección de flujo dominante.

Se genera una grilla de $376 \times 376 \times 401$ puntos en los ejes x, y, z, lo cual asegura una resolución del flujo alrededor de cada partícula en cada simulación.


Dominio de aplicación

Los diferentes casos que se simularon se pueden categorizar utilizando dos parámetros: el número de Reynolds (Re) y la fracción volumétrica de las partículas (Φ).

Cada dataset de entrenamiento se generará tomando una porción del dominio de cálculo centrada en la partícula de referencia. Cada realización de cada caso (Re y Φ) listado en la Tabla 1, va a devolver N_i datasets de entrenamiento, siendo N_i la cantidad de partículas dentro de la región interior (27% interior en la dirección z) de la realización i .

Más densidad de partículas \rightarrow más
velocidad y fluctuación de presión.

Espacio que ocupan las partículas en la simulación



Case	Re	ϕ	Realizations	σ_u	σ_v	σ_w	σ_p	N_{tr}	N_{te}
1	39.47	0.11	10	0.5026	0.1810	0.1844	0.2749	418	46
2	69.88	0.11	10	0.5031	0.1781	0.1806	0.2357	418	46
3	172.96	0.11	10	0.4968	0.1947	0.1960	0.1973	418	46
4	16.49	0.21	8	0.6131	0.2821	0.2877	0.7473	636	91
5	86.22	0.21	7	0.5960	0.2580	0.2609	0.3807	635	90
6	2.69	0.45	5	0.8204	0.4740	0.4732	17.3688	772	193
7	20.66	0.45	5	0.8227	0.4584	0.4631	2.9072	772	193
8	114.60	0.45	5	0.8006	0.4340	0.4421	1.0467	772	193

Table 1: The Reynolds number and volume fraction of the different cases considered, the corresponding RMS values of u, v, w, p and the average size of training and testing datasets

Dominio de aplicación

- **Sub dominio para los cálculos (data entrenamiento y aplicación del modelo)**

El sub dominio debe cumplir estas tres características:

- i. No ser demasiado pequeño. Para contener partículas vecinas que afecten el flujo.
- ii. No ser demasiado grande. Para que no haya limitaciones computacionales para la aplicación de la GAN.
- iii. Las propiedades medias del flujo deben ser similares a las del dominio general.

Para la elección del tamaño del sub dominio se toma un tamaño de $8 \times 5 \times 5$ (x, y, z).

Las velocidades en las tres direcciones y las perturbaciones de presión en cada subdominio son normalizadas.

Dominio de aplicación

- **Sub dominio para los cálculos (data entrenamiento y aplicación del modelo)**

El sub dominio debe cumplir estas tres características:

- i. No ser demasiado pequeño. Para contener partículas vecinas que afecten el flujo.
- ii. No ser demasiado grande. Para que no haya limitaciones computacionales para la aplicación de la GAN.
- iii. Las propiedades medias del flujo deben ser similares a las del dominio general.

Para la elección del tamaño del sub dominio se toma un tamaño de $8 \times 5 \times 5$ (x, y, z).

Las velocidades en las tres direcciones y las perturbaciones de presión en cada subdominio son normalizadas.

Dominio de aplicación

- **Zona de atención (refinamiento de resultados)**

Es la zona en la que posterior a la generación del campo de velocidades y presiones “grueso” por parte de la GAN, se realizará un refinamiento utilizando una CNN. El tamaño de este dominio es $2 \times 2 \times 2$.

Arquitectura de resolución: GAN + CNN

- **GAN**

Se trabaja con la GAN en el sub dominio con las siguientes consideraciones:

- Entrenar la GAN en todo el dominio tendría un costo computacional demasiado alto.
- Con la elección del sub dominio de $8 \times 5 \times 5$ se supone que el flujo alrededor de la partícula central va a ser bien informado por las partículas alrededor.
- La GAN va a ser usada para predecir un flujo en una escala “gruesa”, debido a que incluso con el pequeño tamaño del sub dominio, se requiere una grilla bastante grande para obtener resultados con DNS.

Arquitectura de resolución: GAN + CNN

- **Data augmentation**

Debido a la geometría cúbica del dominio y a los resultados esperados, se pueden realizar rotaciones discretas de 90° , 180° , 270° y reflexiones sobre los ejes x e y . En total, para cada condición de flujo y el campo asociado campo de velocidad y presión, se pudieron realizar 8 condiciones y campos de flujos asociados.

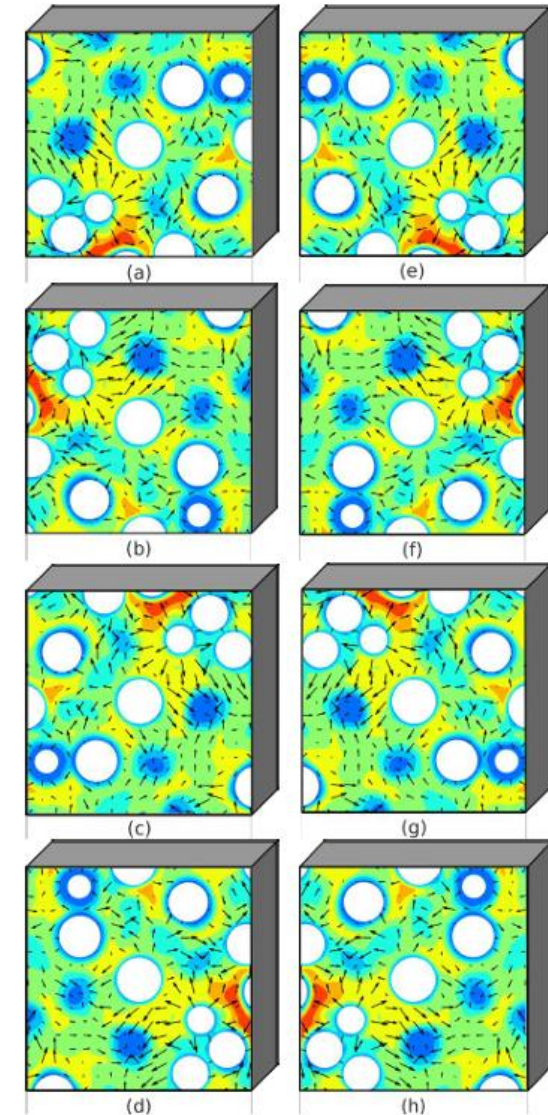


Figure 6: Data Augmentation using rotations and corresponding reflections shown for a y - z plane of a sample from case $Re = 172.96$, $\phi = 0.11$.

Arquitectura de resolución: GAN + CNN

Dominio
 Celda de 3π

Sub dominio
 Celda de $8 \times 5 \times 5$

Dominio atención
 Celda de $2 \times 2 \times 2$

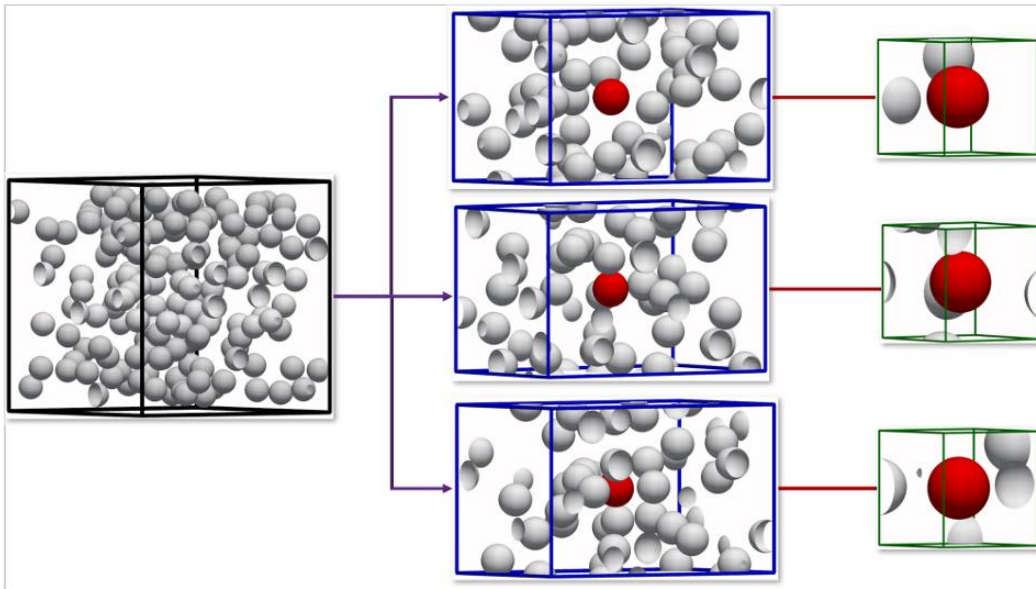


Figure 4: *Model Approach*: The 3π cubic domain bounded by the black outline on the left column corresponds to a CFD realization of 11% volume fraction. *sub-domains* of size $8 \times 5 \times 5$ are defined around every particle within the inner particle region of the cubic domain. Three such sub-domains created around three different particles as the reference particle is shown in the middle column. In each sub-domain (bounded by the blue cuboid) the reference particle is distinctly depicted by the red colored sphere. Coarse-grained mesoscale flow prediction within the sub-domain is obtained using the GAN architecture. This prediction is used to further obtain a highly resolved solution within $2 \times 2 \times 2$ *attention-domain* centered around the reference particle, which for the three sub-domains are shown on the right column bounded by green outline.

I_f provee información espacial y Re al D

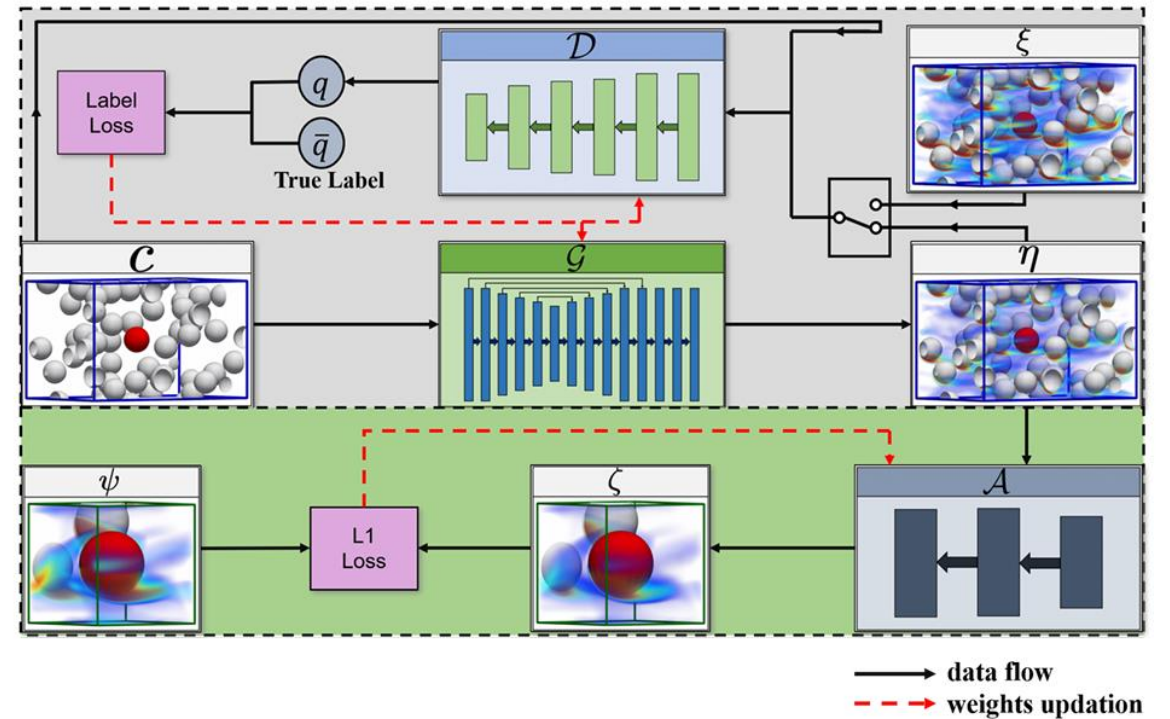


Figure 5: Model Framework.

Arquitectura de resolución: GAN + CNN

El input para el generador es la función Indicadora 3D (I_f). Esta función se redefine con el Re en cada punto del flujo:

$$I_f(x, y, z) = \begin{cases} 0, & \text{if } (x, y, z) \text{ is inside a particle.} \\ 1, & \text{if } (x, y, z) \text{ is outside a particle.} \end{cases}$$



Se utiliza un espacio de 64^3 voxels para representar la función indicadora y los campos de velocidades y presiones.

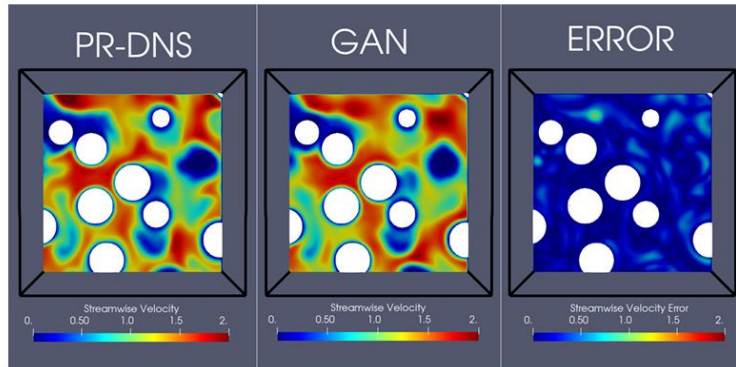
Arquitectura de resolución: GAN + CNN

- **Attention mechanism CNN**

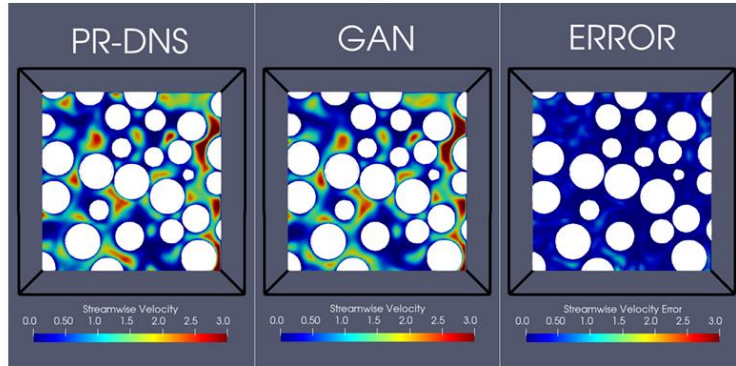
Se utiliza un mecanismo de atención en el vecindario de la partícula central para afinar la resolución de la predicción de la GAN. Esta zona de atención se define con un tamaño de $2 \times 2 \times 2$.

El input para A es el output del G (η) y su objetivo es generar ζ lo más cercano posible a ψ que es la solución del DNS es una grilla de 64^3 en el dominio de atención. Se podría decir que A se puede percibir como una red de super resolución dentro del dominio de atención.

Resultados y discusión

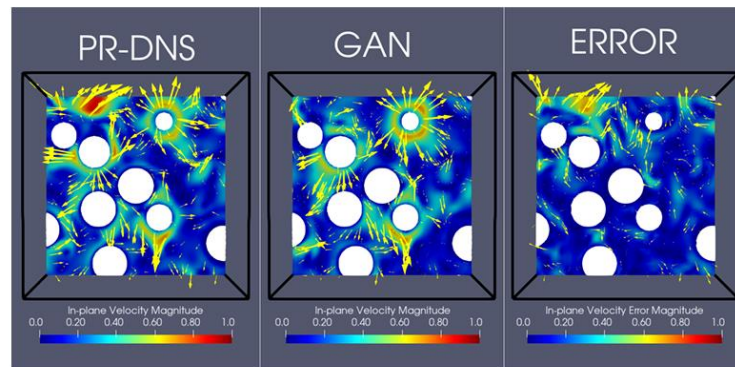


(a)

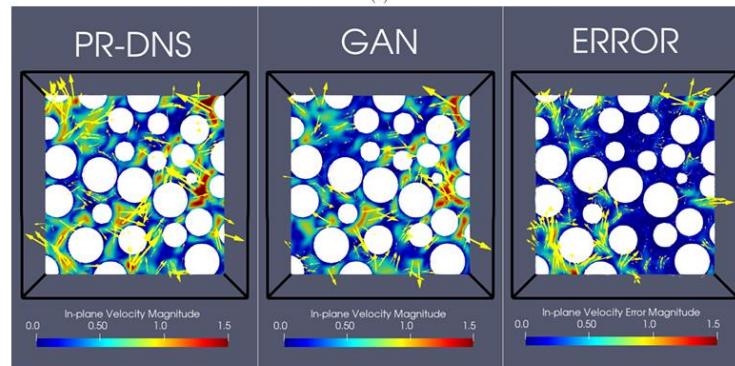


(b)

Figure 7: Comparison of GAN model output with PR-DNS using streamwise velocity for a sample from (a) Case 3 and (b) Case 8.

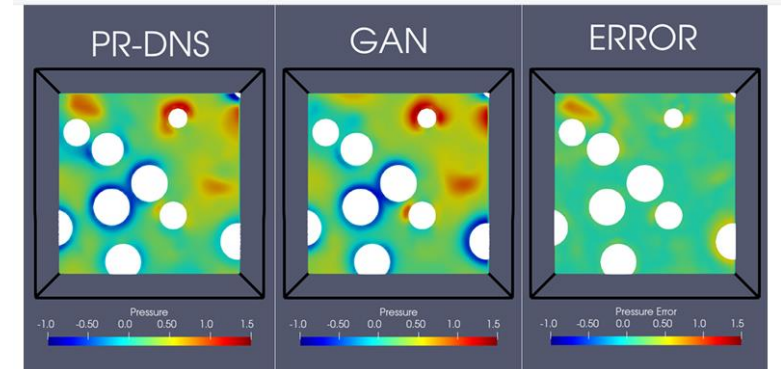


(a)

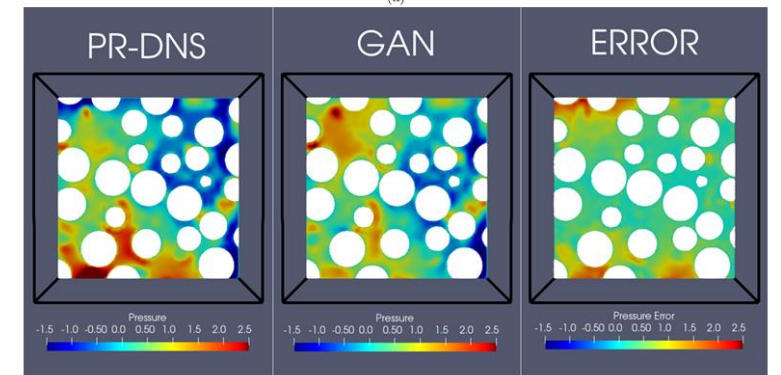


(b)

Figure 8: Comparison of GAN model output with PR-DNS using in-plane velocity for a sample from (a) Case 3 and (b) Case 8.



(a)



(b)

Figure 9: Comparison of GAN model output with PR-DNS using pressure for a sample from (a) Case 3 and (b) Case 8.

Comparación de resultados obtenidos con la GAN vs DNS

Resultados y discusión

- **Performance GAN**

- Se encontraron errores menores en la zona más cercana a la partícula de referencia.
- En los límites del sub dominio el error sube. Una de las razones es que en esta zona se desconoce a las partículas cercanas.

- **Métrica de evaluación**

$$R_{u', box}^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{N_{te}} \sum_{box} (u'_{DNS} - u'_{network})^2 I_f}{\sum_{i=1}^{N_{te}} \sum_{box} (u'_{DNS})^2 I_f},$$

Resultados y discusión

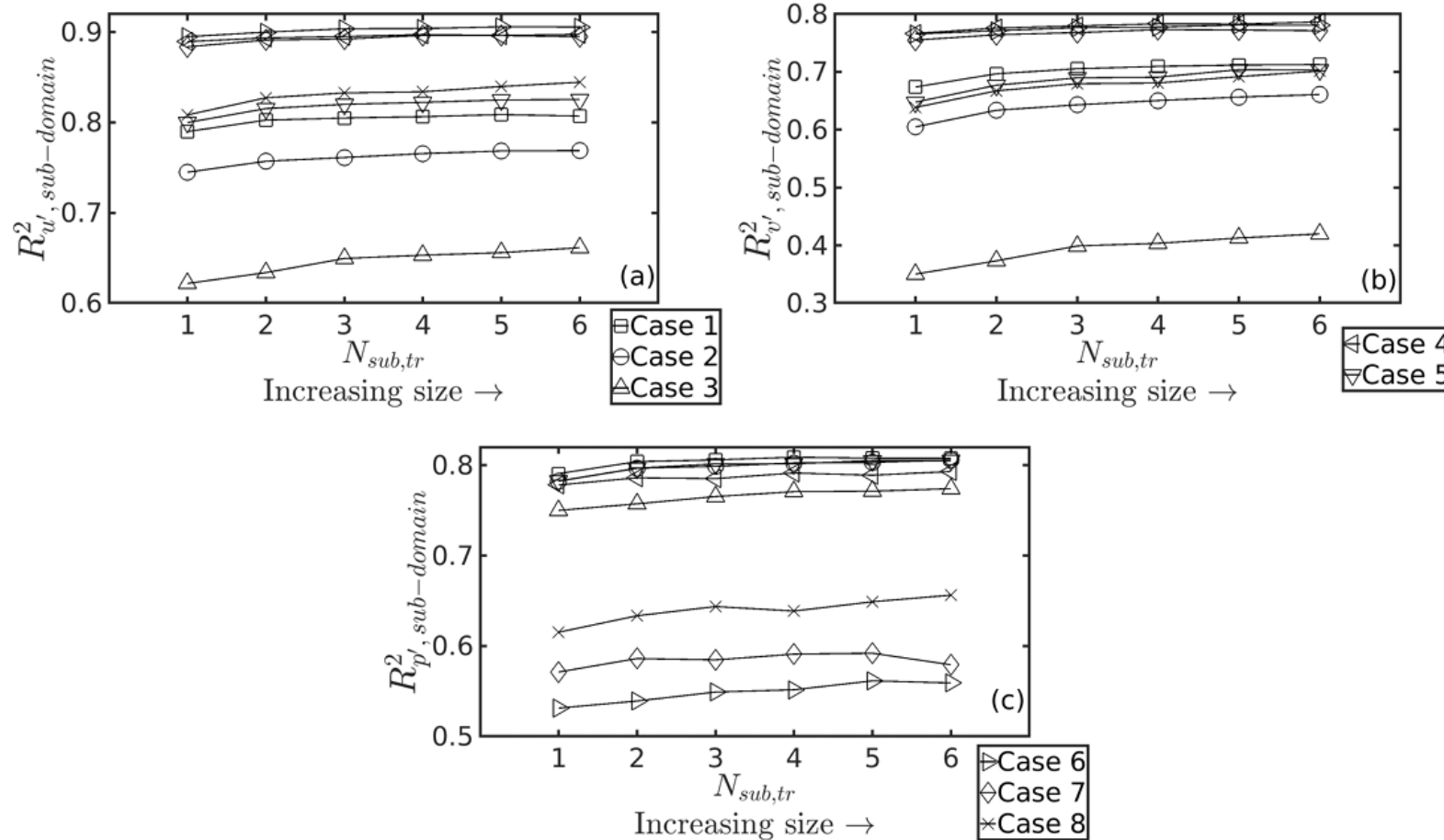


Figure 10: Performance evaluation of Generator (\mathcal{G}) for (a) Streamwise Velocity, (b) Transverse Velocities, and (c) Pressure

Para una fracción volumétrica dada, la performance en predicción de velocidad con la GAN decrece con mayor Re.

La performance de la predicción para componentes de velocidad transversal es menor que la de la componente en dirección principal. ¿Tiene que ver la data augmentation?

Para streamwise component, la mejor y peor performance está asociada con menor y mayor Re respectivamente.

La performance es razonable para todos los tamaños de train dataset.

Performance del G

Resultados y discusión

- **Performance CNN**

Se podría aproximar como una interpolación no lineal para mejorar la resolución.

Se evalúa la performance tanto con el coeficiente de determinación como comparando con una interpolación lineal del resultado del G.

Resultados y discusión

Performance de la CNN

Se nota que la performance de A fue mejor que la de G. Siendo más destacada la performance en casos de mayor fracción volumétrica.

No se nota una mejoría muy marcada con respecto a la posibilidad de hacer una interpolación lineal. En este punto, se realizan dos comentarios para mejorar la CNN:

- Una función indicador también con el input del resultado que viene de G.
- La interpolación lineal tampoco es una herramienta trivial para aplicar.

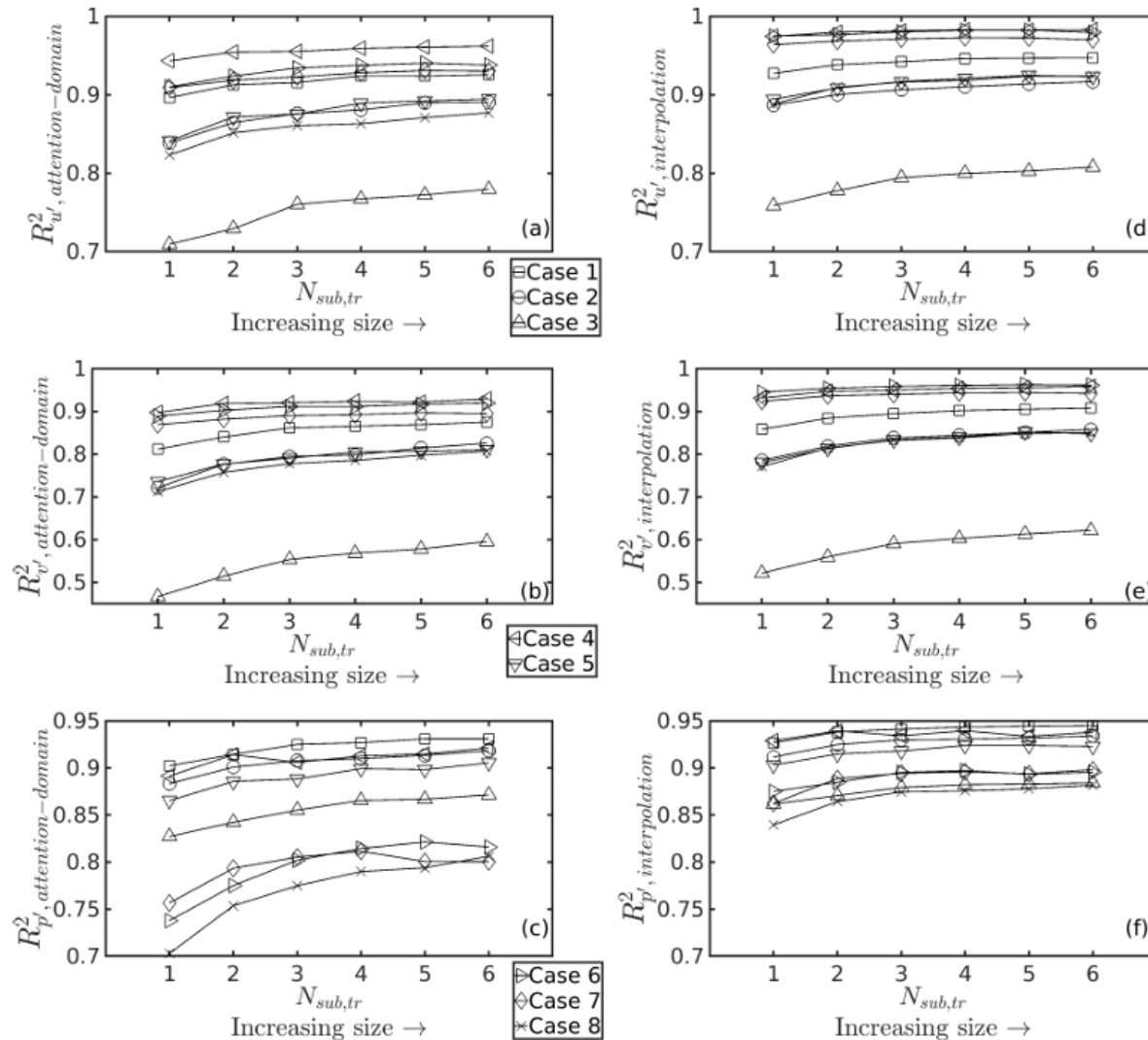


Figure 11: Performance of A for (a) Streamwise Velocity, (b) Transverse Velocities, (c) Pressure, and Linear interpolation for (d) Streamwise Velocity, (e) Transverse Velocities, (f) Pressure

Resultados y discusión

- **Reconstrucción del campo de flujo**

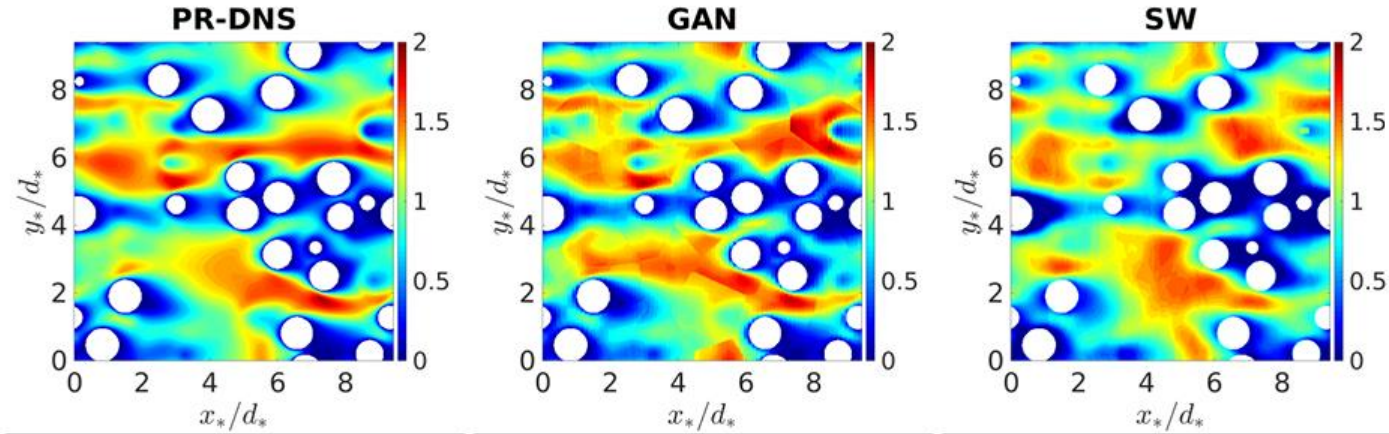
El desafío posterior es reconstruir el campo de velocidades y presiones en el dominio entero.

Se divide el espacio del dominio alrededor de las partículas en celdas de Voronoi.

El campo de flujo en todos los puntos de la grilla dentro de un volumen de voronoi se toma como el output de la GAN en el sub dominio en el que esa partícula es el centro.

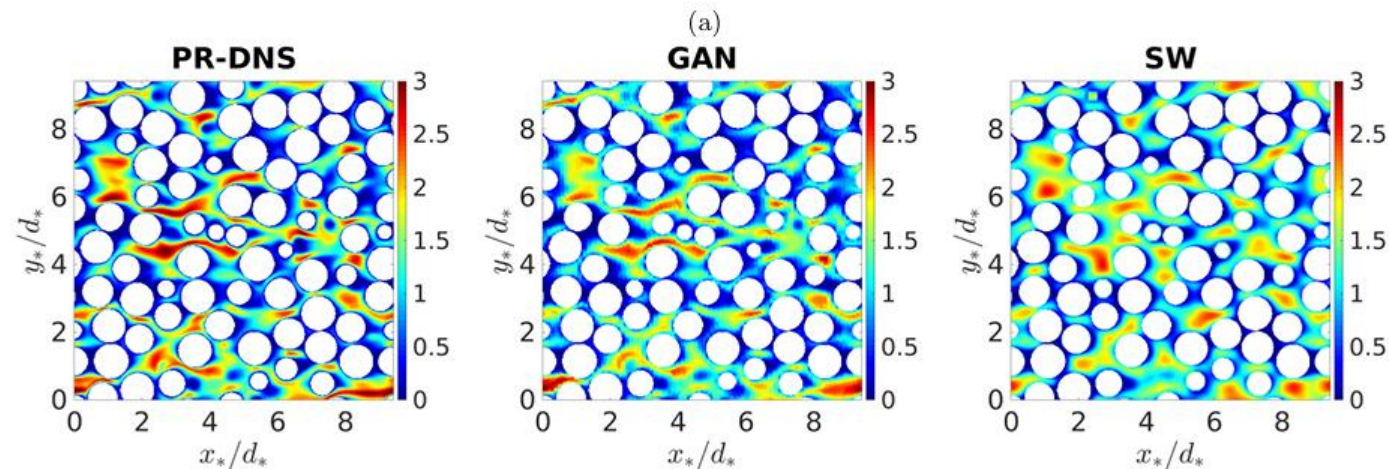
El flujo total se logra uniendo toda la información en estos volúmenes de voronoi.

Resultados y discusión



	GAN			SW		
	u	v	p	u	v	p
Case 1	0.9214	0.8609	0.9262	0.7184	0.6173	0.7275
Case 8	0.8416	0.8230	0.9043	0.5635	0.5458	0.5965

Table 3: Test performance of the models for the central $x - y$ plane of samples from cases 1 and 8.



(b)

Figure 14: Streamwise velocity for central $x - y$ plane of a test realization from (a) Case 1 and (b) Case 8

Resultados y discusión

- **Posibles mejoras al modelo**

- **Equivariant Networks:** incorporar la dimension de redes neuronales que sean robustas ante cambios en la configuración del sistema de partículas (como rotaciones o traslaciones).

- **Physics-Based loss terms:** incorporar ecuaciones que hagan que el modelo no solo se entrene a través de la comparación de datos numéricos sino que también incorpore leyes de la física en este entrenamiento. En el caso de estudio, las ecuaciones serían las de conservación de momento y masa (ecuaciones de N-S).

Gracias por la atención

Arquitectura de resolución: GAN + CNN

El input para el generador es la función Indicadora 3D (I_f). Esta función se redefine con el Re en cada punto del flujo:

$$I_f(x, y, z) = \begin{cases} 0, & \text{if } (x, y, z) \text{ is inside a particle.} \\ 1, & \text{if } (x, y, z) \text{ is outside a particle.} \end{cases}$$

$inpt = \mathbf{c}$

$B1 : Conv(64^3, 1, 16, 3, 1, 1, 64^3), BN, af = LeakyReLU(0.2)$
 $B2 : Conv(64^3, 16, 32, 3, 1, 1, 64^3), BN, af = LeakyReLU(0.2)$
 $B3 : Conv(64^3, 32, 64, 4, 2, 1, 32^3), BN, af = LeakyReLU(0.2)$
 $B4 : Conv(32^3, 64, 128, 4, 2, 1, 16^3), BN, af = LeakyReLU(0.2)$
 $B5 : Conv(16^3, 128, 256, 4, 2, 1, 8^3), BN, af = LeakyReLU(0.2)$
 $B6 : Conv(8^3, 256, 512, 4, 2, 1, 4^3), BN, af = LeakyReLU(0.2)$
 $B7 : TConv(4^3, 512, 256, 4, 2, 1, 8^3), BN, af = LeakyReLU(0.2), skip = 5$
 $B8 : TConv(8^3, 512, 128, 4, 2, 1, 16^3), BN, af = LeakyReLU(0.2), skip = 4$
 $B9 : TConv(16^3, 256, 64, 4, 2, 1, 32^3), BN, af = LeakyReLU(0.2), skip = 3$
 $B10 : TConv(32^3, 128, 32, 4, 2, 1, 64^3), BN, af = LeakyReLU(0.2), skip = 2$
 $B11 : TConv(64^3, 64, 16, 3, 1, 1, 64^3), BN, af = LeakyReLU(0.2), skip = 1$
 $B12 : TConv(64^3, 32, 128, 3, 1, 1, 64^3), BN, af = LeakyReLU(0.2)$
 $B13 : TConv(64^3, 128, 64, 3, 1, 1, 64^3), BN, af = LeakyReLU(0.2)$
 $B14 : Conv(64^3, 64, 4, 3, 1, 1, 64^3)$
 $oupt = \boldsymbol{\eta}$

Table A.5: \mathcal{G} architecture

$inpt = \mathbf{c} \cup \{\boldsymbol{\xi} \text{ or } \boldsymbol{\eta}\},$

concatenation of $\boldsymbol{\xi}$ or $\boldsymbol{\eta}$ and \mathbf{c} along channels

$B1 : Conv(64^3, 5, 16, 3, 1, 1, 64^3), af = LeakyReLU(0.2)$
 $B2 : Conv(64^3, 16, 32, 3, 1, 1, 64^3), af = LeakyReLU(0.2)$
 $B3 : Conv(64^3, 32, 64, 4, 2, 1, 32^3), af = LeakyReLU(0.2)$
 $B4 : Conv(32^3, 64, 128, 4, 2, 1, 16^3), af = LeakyReLU(0.2)$
 $B5 : Conv(16^3, 128, 256, 4, 2, 1, 8^3), af = LeakyReLU(0.2)$
 flatten (256 channels, 8^3 tensor)
 $B6 : Linear(\text{flattened tensor}, 256 * 8 * 8 * 8, 1, \text{single value}), af = \text{sigmoid}$
 $oupt = \mathbf{q}$

Table A.6: \mathcal{D} architecture

$inpt = \boldsymbol{\eta}$

$B1 : TConv(16^3, 4, 64, 4, 2, 1, 32^3), BN, af = LeakyReLU(0.2)$
 $B2 : TConv(32^3, 64, 128, 4, 2, 1, 64^3), BN, af = LeakyReLU(0.2)$
 $B3 : Conv(64^3, 128, 4, 3, 1, 1, 64^3)$
 $oupt = \boldsymbol{\zeta}$

Table A.7: \mathcal{A} architecture



Se utiliza un espacio de 64^3 voxels para representar la función indicadora y los campos de velocidades y presiones.

Funciones de pérdida

Generator loss function:

$$\mathcal{L}_{\mathcal{G}} = \mathbb{E}_{\mathbf{c} \in P_c} [-\mathcal{D}(\mathcal{G}(\mathbf{c}))] + \gamma \|(\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\eta}) \cdot I_f\|_1,$$

Discriminator loss function:

$$\mathcal{L}_{\mathcal{D}} = \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi} \in P_{\xi}} [-\log \mathcal{D}(\boldsymbol{\xi})] + \mathbb{E}_{\mathbf{c} \in P_c} [-\log(1 - \mathcal{D}(\mathcal{G}(\mathbf{c})))] + \lambda \mathbb{E}_{\tilde{\boldsymbol{\xi}}} [\|(\nabla \mathcal{D})_{\tilde{\boldsymbol{\xi}}}\|_2^2]$$

Attention CNN loss function:

$$\mathcal{L}_{\mathcal{A}} = \gamma \|(\boldsymbol{\psi} - \boldsymbol{\zeta}) \cdot I_f\|_1,$$

Dominio de aplicación

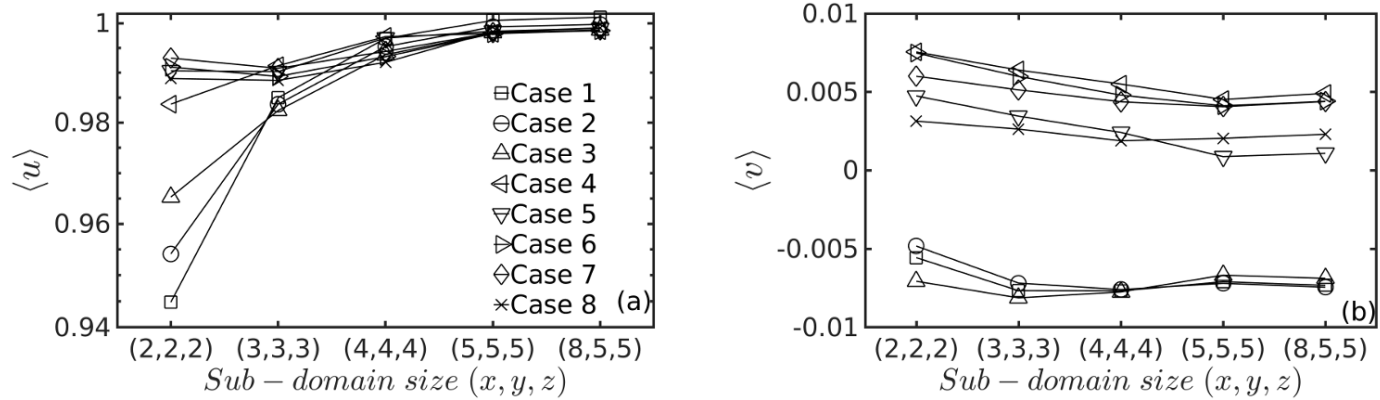


Figure 2: Variation of mean (a) streamwise and (b) transverse velocities with sub-domain size

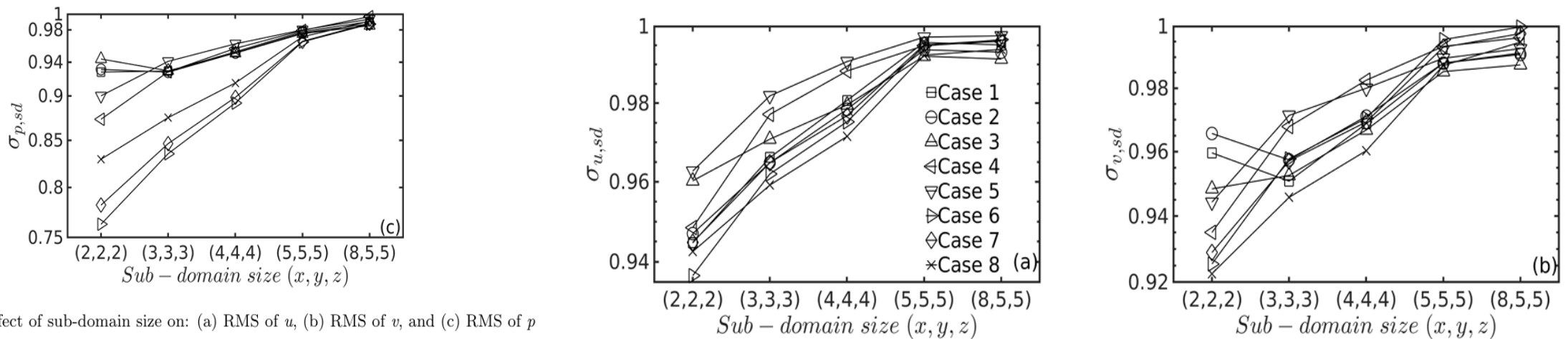


Figure 3: Effect of sub-domain size on: (a) RMS of u , (b) RMS of v , and (c) RMS of p