Redes Neuronales Informadas por la Física (PINNs): Un Marco Computacional para la Fusión de Datos y Primeros Principios

Parte I: El Marco Fundamental de las Redes Neuronales Informadas por la Física

Sección 1: Introducción a un Nuevo Paradigma en la Computación Científica

1.1. Contextualización: La Convergencia del Aprendizaje Profundo y la Simulación Física

El método científico, tradicionalmente anclado en el ciclo iterativo de teoría y experimentación, ha experimentado una profunda transformación en la era digital. La explosión en la disponibilidad de datos y el crecimiento exponencial de la capacidad computacional han dado lugar a un nuevo paradigma centrado en los datos y la simulación.[1]
En este contexto, el aprendizaje automático (Machine Learning - ML), y en particular el aprendizaje profundo (Deep Learning - DL), ha demostrado una capacidad sin precedentes para reconocer patrones y realizar predicciones en disciplinas tan diversas como el reconocimiento de imágenes, la genómica y la ciencia cognitiva.[2]
Sin embargo, la aplicación directa de modelos de ML puramente basados en datos a sistemas físicos y de ingeniería complejos presenta limitaciones fundamentales. Estos modelos, a menudo denominados "cajas negras", requieren grandes volúmenes de datos de entrenamiento para ser efectivos, una condición que raramente se cumple en dominios científicos donde la adquisición de datos puede ser prohibitivamente costosa o físicamente imposible.[2] Más importante aún, estos modelos no garantizan que sus predicciones respeten

las leyes físicas fundamentales, lo que puede llevar a soluciones matemáticamente plausibles pero físicamente incoherentes.[4] Por otro lado, los métodos de simulación numérica tradicionales, como el Método de Elementos Finitos (FEM) o el Método de Diferencias Finitas (FDM), aunque rigurosamente basados en la física, enfrentan sus propios desafíos. Pueden ser computacionalmente prohibitivos, especialmente para problemas no lineales, y luchan con la llamada "maldición de la dimensionalidad", donde la complejidad computacional crece exponencialmente con el número de dimensiones del problema.[6]

Este escenario revela una brecha crítica entre dos mundos: el del modelado basado en la física, riguroso pero a menudo inflexible y costoso; y el del aprendizaje basado en datos, flexible pero que requiere grandes cantidades de datos y carece de garantías físicas. Es en esta brecha donde emerge la Computación Científica mediante Aprendizaje Automático (Scientific Machine Learning - SciML), un campo interdisciplinario que busca una fusión sinérgica del modelado basado en datos con el conocimiento derivado de los primeros principios físicos.[5] Las Redes Neuronales Informadas por la Física (Physics-Informed Neural Networks - PINNs) se han consolidado como un pilar fundamental de este movimiento.[8] Introducidas por Raissi, Perdikaris y Karniadakis [10], las PINNs representan un potencial cambio de paradigma en la forma en que se abordan los problemas de la ciencia y la ingeniería [4], proponiendo no solo analizar datos de simulaciones, sino convertir a la propia red neuronal en un solucionador que está intrínsecamente guiado por las ecuaciones físicas.

1.2. El Principio Central: Codificación del Conocimiento Físico como un Sesgo Inductivo

El concepto central y la innovación fundamental de las PINNs radican en la incorporación directa de las leyes físicas, típicamente expresadas en forma de Ecuaciones Diferenciales Parciales (EDPs) o Ecuaciones Diferenciales Ordinarias (EDOs), dentro del propio proceso de entrenamiento de la red neuronal.[10] En lugar de tratar a la red neuronal como una caja negra que aprende correlaciones a partir de un conjunto de datos de entrada-salida, las PINNs la obligan a respetar la física subyacente del sistema que se está modelando.

Este conocimiento físico previo no se impone de forma rígida, sino que actúa como un potente agente de regularización.[2] En el contexto del aprendizaje automático, la regularización es una técnica utilizada para evitar el sobreajuste (overfitting) y mejorar la capacidad de generalización de un modelo. En el caso de las PINNs, la regularización física restringe el vasto espacio de posibles funciones que la red neuronal podría aprender, guiándola hacia soluciones que no solo se ajustan a los datos observados (si los hay), sino que también son consistentes con los principios físicos establecidos, como las leyes de conservación.

El efecto de este sesgo inductivo es profundo. Al codificar información estructurada sobre el sistema en el algoritmo de aprendizaje, se amplifica el contenido informativo de los datos disponibles.[2] Esto permite que el algoritmo converja hacia la solución correcta y generalice de manera efectiva incluso cuando se dispone de muy pocos ejemplos de entrenamiento.[2] Esta característica es particularmente valiosa en numerosos dominios científicos y de ingeniería donde, como se mencionó, el costo de la adquisición de datos es prohibitivo. La red neuronal "llena los vacíos" entre los puntos de datos dispersos utilizando las ecuaciones diferenciales como guía, una hazaña que sería imposible para un modelo de ML puramente basado en datos.

1.3. Arquitectura Conceptual: La Red Neuronal como un Aproximador de Funciones Universal

La base teórica que sustenta la viabilidad de las PINNs es el Teorema de Aproximación Universal. Este teorema fundamental establece que una red neuronal con una sola capa oculta y un número suficiente de neuronas puede aproximar cualquier función continua con un grado arbitrario de precisión. Las PINNs explotan esta poderosa capacidad para representar la solución desconocida, denotada como $u(x,t)$, de una EDP.[13]
La arquitectura conceptual de una PINN canónica es sorprendentemente elegante y simple. Generalmente, consiste en una red neuronal estándar, como un Perceptrón Multicapa (MLP), que funciona de la siguiente manera [16]:

- **Entrada (Input):** La red toma como entrada las coordenadas independientes del problema, que típicamente son las variables espaciales y temporales (por ejemplo, $x=(x,y,z)$ y el tiempo t).[8]
- **Salida (Output):** La red produce como salida una aproximación de la solución del campo o los campos de interés en esas coordenadas, denotada como $u\hat{}(x,t;\theta)$, donde θ representa el conjunto de parámetros entrenables de la red (pesos y sesgos).

Una de las ventajas más significativas y citadas de este enfoque es su naturaleza "libre de malla" (mesh-free).[13] A diferencia de los métodos numéricos tradicionales como el FEM o el FDM, que requieren una discretización del dominio computacional en una malla o rejilla de elementos finitos, las PINNs operan sobre un continuo. La solución es representada por la propia función continua de la red neuronal, y el entrenamiento se realiza utilizando puntos de datos y "puntos de colocación" que pueden ser muestreados de forma flexible dentro del dominio, sin necesidad de una conectividad de malla predefinida. Esto elimina el laborioso y a menudo complejo proceso de generación de mallas, que puede ser un cuello de botella importante en las simulaciones tradicionales, especialmente para geometrías complejas.

Sección 2: Mecánica Interna: Arquitectura, Formulación y Entrenamiento

2.1. La Arquitectura de una PINN Canónica

Para comprender el funcionamiento de una PINN, es esencial detallar su arquitectura interna. Aunque existen numerosas variantes, la PINN canónica se basa en una arquitectura de red neuronal de avance (feedforward), más comúnmente un Perceptrón Multicapa (MLP).[16] La elección de los componentes de esta arquitectura no es arbitraria; está dictada por los requisitos matemáticos para resolver ecuaciones diferenciales.

- **Entradas:** Como se mencionó, las entradas de la red son las coordenadas independientes del problema. Para un problema dependiente del tiempo en 3D, la entrada sería un vector que contiene las coordenadas espaciales y el tiempo, (x,t)=(x,y,z,t).[8] Estos puntos de entrada se muestrean del dominio espacio-temporal del problema.
- **Capas Ocultas:** La red consta de una serie de capas ocultas, cada una compuesta por múltiples neuronas. La "profundidad" (número de capas) y la "anchura" (número de neuronas por capa) de la red son hiperparámetros cruciales que definen su capacidad de expresión y deben ajustarse al problema en cuestión. Una característica fundamental de las capas ocultas en una PINN es la elección de la **función de activación**. Dado que el marco de la PINN requiere el cálculo de derivadas de la salida de la red con respecto a sus entradas para evaluar el residuo de la EDP, la función de activación debe ser suave e infinitamente diferenciable. Funciones como la tangente hiperbólica (tanh) o la función Swish (x·σ(x)) son opciones comunes, ya que su suavidad permite el cálculo de derivadas de alto orden sin problemas.[19] Funciones como ReLU, que no son suaves en el origen, son generalmente menos adecuadas.
- **Salidas:** La capa de salida de la red produce los campos de la solución que se buscan. Para una EDP escalar como la ecuación del calor, la salida sería un único valor (la temperatura). Para un sistema de ecuaciones como las de Navier-Stokes, la salida sería un vector que contiene los componentes de la velocidad y la presión, por ejemplo, (u,v,p).[21]

Esta transformación del problema de resolver una EDP a encontrar los parámetros óptimos de una red neuronal es el núcleo del método. El problema ya no es encontrar los valores de la solución en los nodos de una malla, sino encontrar los millones de pesos y sesgos de la red que definen una función continua que satisface tanto los datos como la física en todo el dominio.[22]

2.2. La Función de Pérdida Compuesta: Un Análisis Detallado

El corazón del proceso de aprendizaje de una PINN reside en su función de pérdida. A diferencia de las redes neuronales convencionales que solo minimizan el error con respecto a los datos etiquetados, las PINNs minimizan una **función de pérdida compuesta** que integra múltiples objetivos.[8] Esta función de pérdida transforma la tarea de resolver una EDP en un problema de optimización. La formulación general de la pérdida,
L(θ), que depende de los parámetros de la red θ, se puede expresar como una suma ponderada:

$L(\theta)=\lambda_r L_{residual}+\lambda_b L_{boundary}+\lambda_i L_{initial}$
donde $\lambda_r,\lambda_b,\lambda_i$ son hiperparámetros que ponderan la importancia relativa de cada término.[8]
Analicemos cada componente:

- **L_{datos} (Pérdida de Fidelidad a los Datos):** Este término agrupa las pérdidas que cuantifican el ajuste del modelo a los datos conocidos. Se divide en:
  - $L_{initial}$ (Pérdida de Condición Inicial): Mide la discrepancia entre la predicción de la red en el tiempo inicial (t=0) y la condición inicial conocida $u_0(x)$. Típicamente se calcula como el Error Cuadrático Medio (MSE) sobre un conjunto de puntos N_i muestreados en el dominio inicial:
    $L_{initial}=\frac{1}{N_i}\sum_{j=1}^{N_i}|\hat{u}(x_j,0;\theta)-u_0(x_j)|^2$
    .[8]
  - $L_{boundary}$ (Pérdida de Condición de Contorno): De manera similar, mide el error entre la predicción de la red en los límites del dominio espacial, $\partial\Omega$, y las condiciones de contorno prescritas $g(x,t)$. Se calcula como el MSE sobre un conjunto de puntos N_b en los límites:
    $L_{boundary}=\frac{1}{N_b}\sum_{j=1}^{N_b}|\hat{u}(x_j,t_j;\theta)-g(x_j,t_j)|^2$
    donde $(x_j,t_j)\in\partial\Omega\times$.[8]

    Estos términos constituyen la parte "supervisada" del aprendizaje, ya que dependen de datos etiquetados (los valores de las condiciones iniciales y de contorno).
- $L_{física}$ (Residuo de la EDP): Este es el componente más innovador y distintivo de las PINNs. Actúa como un término de regularización física y es fundamentalmente "no supervisado", ya que no requiere datos etiquetados de la solución en el interior del dominio. Para una EDP general de la forma $F(x,t,u,\nabla u,\ldots)=0$, el residuo de la EDP se define como el resultado de aplicar el operador diferencial F a la salida de la red neuronal, $\hat{u}(x,t;\theta)$. La pérdida del residuo se calcula como el MSE de este residuo sobre un gran número de puntos N_r, llamados puntos de colocación, muestreados en el interior del dominio espacio-temporal:
  $L_{residual}=\frac{1}{N_r}\sum_{j=1}^{N_r}|F(x_j,t_j,\hat{u},\nabla\hat{u},\ldots;\theta)|^2$
  .[2]

  Al minimizar este término, se penaliza a la red si su salida viola la ley física subyacente, forzándola a descubrir una solución que sea físicamente consistente.

El **desafío del balanceo** de los pesos λ es una de las principales dificultades prácticas en el entrenamiento de PINNs.[8] Si
λ_r es demasiado pequeño, la red puede ajustarse perfectamente a las condiciones de contorno pero producir una solución físicamente incorrecta en el interior. Si es demasiado grande, la red puede encontrar una solución que satisface la EDP pero que no respeta las condiciones de contorno. Este delicado equilibrio a menudo requiere un ajuste manual y tedioso, y ha motivado una intensa investigación en estrategias de ponderación adaptativa, que se discutirán en la Parte III.[24]

2.3. El Rol Crítico de la Diferenciación Automática (AD)

La magia que permite calcular el término de residuo Lresidual de manera eficiente y precisa es la **Diferenciación Automática** (Automatic Differentiation - AD).[2] La AD es la tecnología habilitadora clave que ha hecho posible el auge de las PINNs.
Para evaluar el residuo de la EDP, es necesario calcular las derivadas parciales de la salida de la red u^ con respecto a sus entradas (x,t). Por ejemplo, para la ecuación del calor ∂t∂u−α∂x2∂2u=0, se necesitan las derivadas ∂t∂u^ y ∂x2∂2u^. Los métodos tradicionales para calcular derivadas son:

1. **Diferenciación Simbólica:** Manipula expresiones matemáticas para encontrar una fórmula cerrada para la derivada. Es exacta pero puede llevar a una "explosión de expresiones" y es computacionalmente inviable para funciones complejas como una red neuronal profunda.
2. **Diferenciación Numérica:** Aproxima las derivadas usando diferencias finitas (e.g., f′(x)≈hf(x+h)−f(x)). Es fácil de implementar pero introduce errores de truncamiento y discretización, y su precisión depende de la elección del paso h.

La Diferenciación Automática ofrece una tercera vía. No es ni simbólica ni puramente numérica. La AD calcula las derivadas de manera exacta (hasta la precisión de la máquina de coma flotante) aplicando sistemáticamente la regla de la cadena a cada operación elemental que compone la función (en este caso, la red neuronal).[2] Al construir un grafo computacional que registra todas las operaciones desde la entrada hasta la salida, la AD puede propagar las derivadas hacia atrás (modo reverso, o backpropagation) o hacia adelante (modo directo) para obtener el gradiente de la salida con respecto a cualquier entrada o parámetro.
El advenimiento de bibliotecas de aprendizaje profundo modernas y eficientes como TensorFlow, PyTorch y JAX, que tienen la AD como una funcionalidad central y altamente optimizada, ha sido el catalizador para la popularización y el desarrollo práctico de las PINNs.[28] Sin la AD, calcular el residuo de la EDP para una red neuronal profunda sería computacionalmente prohibitivo o numéricamente inestable.
A pesar de la centralidad de la AD, es importante señalar que han surgido debates y enfoques alternativos. Algunas investigaciones proponen reemplazar la AD con métodos de diferenciación numérica, como diferencias finitas (FDM), dentro del marco de la PINN.[29] La motivación es que, en ciertos casos, la diferenciación numérica puede ser computacionalmente más rápida que la AD, especialmente para derivadas de alto orden. También se han propuesto enfoques híbridos que utilizan AD para geometrías complejas o límites y FDM para regiones regulares del dominio.[29] Estos desarrollos muestran que, si bien la AD es el estándar, el campo continúa explorando formas de optimizar el cálculo de derivadas para mejorar la eficiencia y la robustez.
La transformación de un problema de EDP en un problema de optimización de alta dimensión, no convexo, es a la vez la fuente del poder de las PINNs y su principal debilidad. Por un lado, esta reformulación es lo que las hace libres de malla y agnósticas a la dimensión, ya que la

red $u_\theta(x,t)$ es una función continua que puede ser evaluada en cualquier punto.[13] Por otro lado, introduce todas las patologías conocidas de la optimización en el aprendizaje profundo: paisajes de pérdida complejos con mesetas estériles, mínimos locales y gradientes desequilibrados.[8] El éxito del entrenamiento se vuelve sensible a una multitud de hiperparámetros, desde la arquitectura de la red hasta el optimizador y los pesos de la pérdida.[24] Esto implica que el éxito con las PINNs requiere un cambio de enfoque en la experiencia, pasando de la generación de mallas y el análisis numérico a la teoría de la optimización y el ajuste de hiperparámetros. Los desafíos ya no se centran en el error de discretización, sino en el error de optimización y el error de generalización.[8]

Parte II: Aplicaciones y Análisis Comparativo

Sección 3: El Doble Rol de las PINNs: Solución de Problemas Directos e Inversos

Una de las características más potentes y versátiles de las PINNs es su capacidad para abordar de manera unificada tanto problemas directos (forward problems) como inversos (inverse problems) dentro del mismo marco computacional.[2] Esta unificación representa una desviación significativa de los métodos computacionales tradicionales, donde la solución de problemas directos e inversos a menudo requiere algoritmos, software e incluso comunidades de investigación completamente diferentes.

3.1. Problemas Directos: Inferencia de la Solución Latente

En la computación científica, un problema directo o "forward" se refiere a la tarea de predecir el comportamiento o estado de un sistema dadas todas las condiciones que lo gobiernan. Formalmente, para una EDP general dada por $F(u;\lambda)=0$, el problema directo consiste en encontrar la solución latente (oculta) $u(x,t)$ cuando los parámetros físicos del modelo, λ, son conocidos y se especifican las condiciones iniciales y de contorno apropiadas.[2] Este es el caso de uso más común para los solucionadores numéricos tradicionales como el FEM.
Las PINNs abordan este problema de la siguiente manera:

1. Se aproxima la solución desconocida $u(x,t)$ con una red neuronal $\hat{u}(x,t;\theta)$.
2. Se construye la función de pérdida compuesta $L(\theta)=\lambda_r L_{residual}+\lambda_b L_{boundary}+\lambda_i L_{initial}$, como se describió anteriormente.
3. Se entrena la red minimizando esta pérdida. El proceso de optimización ajusta los parámetros θ hasta que la salida de la red satisface simultáneamente las condiciones de contorno e iniciales (a través de los términos de datos) y la propia EDP en todo el

dominio (a través del término de residuo físico).

Una característica notable de las PINNs en la resolución de problemas directos es su capacidad para operar en un régimen que puede considerarse puramente "no supervisado".[14] Si bien las condiciones iniciales y de contorno proporcionan datos "etiquetados" en los límites del dominio, no se requiere ningún dato de la solución en el interior del dominio espacio-temporal. La red neuronal "descubre" la solución en el interior basándose únicamente en la restricción impuesta por el residuo de la EDP. Esto contrasta fuertemente con los modelos de ML supervisados estándar, que necesitarían un denso conjunto de datos de la solución en todo el dominio para ser entrenados.

3.2. Problemas Inversos: Descubrimiento de Parámetros Físicos

Los problemas inversos representan un desafío mucho mayor y son de inmenso interés práctico en ciencia e ingeniería. En un problema inverso, el objetivo es inferir las causas a partir de la observación de sus efectos. En el contexto de las EDPs, esto a menudo significa identificar parámetros físicos desconocidos del modelo, λ, a partir de mediciones dispersas y potencialmente ruidosas de la solución del sistema, $u(x,t)$.[2] Ejemplos incluyen determinar la conductividad térmica de un material a partir de mediciones de temperatura, o la viscosidad de un fluido a partir de observaciones de su velocidad.

El enfoque de las PINNs para resolver problemas inversos es particularmente elegante y potente, y es aquí donde a menudo demuestran una ventaja competitiva sobre los métodos tradicionales.[15] El procedimiento es el siguiente:

1. Al igual que en el problema directo, la solución $u(x,t)$ se aproxima con una red neuronal $\hat{u}(x,t;\theta)$.
2. Los parámetros físicos desconocidos del modelo, λ, se tratan como variables entrenables, de la misma manera que los pesos y sesgos θ de la red.[2] Se pueden inicializar aleatoriamente o con una suposición inicial.
3. La función de pérdida se construye de manera similar, pero ahora el residuo de la EDP, $F(\hat{u};\lambda)$, depende explícitamente de los parámetros λ que se están aprendiendo. La pérdida de datos, L_{datos}, ahora compara las predicciones de la red en los puntos de medición con los datos observacionales disponibles.
4. Durante el entrenamiento, el optimizador ajusta simultáneamente los parámetros de la red θ y los parámetros físicos λ para minimizar la pérdida total.

Al final del proceso de entrenamiento, la PINN ha aprendido no solo una aproximación de campo de la solución que es consistente con la física, sino también los valores de los parámetros λ que mejor explican los datos observados. La regularización impuesta por el término de la física es crucial aquí, ya que permite que el problema se resuelva incluso con datos muy escasos y ruidosos, una situación en la que los métodos de ajuste de curvas tradicionales fallarían.

La unificación del marco para problemas directos e inversos es una consecuencia directa del mecanismo central de las PINNs: la optimización basada en gradientes sobre una función de pérdida que representa todo el sistema físico. Gracias a la Diferenciación Automática, se pueden calcular gradientes con respecto a *cualquier* parámetro del sistema, ya sea un peso de la red θ o un coeficiente físico λ. Esto no solo simplifica conceptualmente la resolución de problemas inversos, sino que también abre nuevas posibilidades. Por ejemplo, un experimentalista podría usar una PINN para realizar un diseño de experimentos *in silico*, evaluando rápidamente qué ubicación de un sensor proporcionaría la máxima información para restringir un parámetro desconocido. Esta capacidad de integrar el modelado y la identificación de sistemas en un solo bucle de optimización es una de las contribuciones más transformadoras de las PINNs.

Sección 4: Estudios de Caso en Dominios Físicos Clave

La versatilidad del marco de las PINNs ha permitido su aplicación a una amplia gama de problemas gobernados por diferentes tipos de ecuaciones diferenciales en numerosas disciplinas científicas. A continuación, se analizan algunos estudios de caso representativos que ilustran las capacidades y los desafíos de las PINNs en la práctica.

4.1. Dinámica de Fluidos: Ecuaciones de Navier-Stokes y Burgers

La dinámica de fluidos es uno de los campos donde las PINNs han recibido una atención considerable, dada la complejidad y la naturaleza no lineal de las ecuaciones gobernantes.

- **Ecuaciones de Navier-Stokes:** Estas ecuaciones describen el movimiento de los fluidos viscosos y son fundamentales en ingeniería y física. Varios estudios han aplicado PINNs para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes para flujos laminares e incompresibles.[21] En una configuración típica, la red neuronal toma como entrada las coordenadas espacio-temporales
  (x,y,t) y produce como salida los campos de velocidad (u,v) y el campo de presión p. La función de pérdida incluye los residuos de las ecuaciones de conservación de masa y momento. Las comparaciones con simulaciones de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) muestran que las PINNs pueden capturar con éxito características cualitativas del flujo, como las estelas detrás de un cilindro y las zonas de estancamiento.[21] Sin embargo, también se han observado discrepancias, especialmente a medida que aumenta el número de Reynolds. La precisión puede disminuir, y pueden surgir problemas con la conservación estricta de la masa. Esto se atribuye a menudo a la forma "suave" en que se imponen las condiciones de contorno a través de la función de pérdida, en lugar de la imposición "dura" de los métodos CFD, y al desafío del entrenamiento en paisajes de pérdida complejos.[21] Investigaciones más avanzadas también han explorado el uso de PINNs para resolver problemas paramétricos, como aprender la función de solución para un rango de números de Reynolds, lo que permitiría una inferencia rápida para nuevos parámetros sin necesidad de

reentrenamiento completo.[33]

- **Ecuación de Burgers:** Esta es una EDP no lineal más simple que sirve como un problema de referencia fundamental para los métodos numéricos. Es particularmente interesante porque, a pesar de su simplicidad, sus soluciones pueden desarrollar discontinuidades (frentes de choque) a partir de condiciones iniciales suaves.[34] Esto la convierte en un excelente caso de prueba para evaluar la capacidad de las PINNs para manejar gradientes abruptos. Existen numerosos tutoriales que detallan paso a paso cómo implementar una PINN para resolver la ecuación de Burgers.[36] El proceso implica definir una red neuronal, generar puntos de colocación en el interior del dominio y puntos de datos en los límites (iniciales y de contorno), y formular una función de pérdida que incluye el residuo de la ecuación de Burgers, calculado mediante AD. El rendimiento de la PINN en este problema revela una de sus patologías clave: el sesgo espectral. La red a menudo tiene dificultades para capturar la nitidez del frente de choque, tendiendo a "suavizarlo" o difuminarlo, un desafío que ha motivado muchas de las variantes de PINN más avanzadas.[19]

4.2. Mecánica Cuántica: Ecuación de Schrödinger

La aplicación de PINNs a la mecánica cuántica es un área de investigación fascinante y en crecimiento. El objetivo principal es resolver la ecuación de Schrödinger para encontrar los estados de un sistema cuántico, es decir, sus funciones de onda (eigenfunctions) y las energías correspondientes (eigenvalues).[26]

El enfoque es notablemente elegante y se basa en un aprendizaje no supervisado. La PINN se construye para aproximar la función de onda $\psi(x)$. La función de pérdida se diseña cuidadosamente para codificar los principios fundamentales de la mecánica cuántica:

1. **Residuo de la Ecuación de Schrödinger:** El término principal de la pérdida penaliza a la red si su salida no satisface la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, $H\psi=E\psi$. La energía E puede tratarse como un parámetro entrenable.
2. **Condición de Normalización:** Una restricción física crucial es que la integral del cuadrado de la magnitud de la función de onda sobre todo el espacio debe ser igual a 1 ($ \int |\psi(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = 1 $). Esta condición se incorpora a la pérdida para evitar que la red converja a la solución trivial $\psi=0$, que satisface perfectamente la ecuación diferencial pero no es físicamente significativa.[26]
3. **Sesgos Inductivos (Simetrías):** Si el potencial del sistema tiene simetrías (por ejemplo, es un potencial par), se sabe que las funciones de onda deben ser pares o impares. Esta información se puede añadir como un término de pérdida adicional para guiar a la red y acelerar la convergencia.[26]

Para encontrar los estados excitados, el método puede extenderse secuencialmente. Una vez que se ha encontrado el estado fundamental $\psi 0$, se puede entrenar una nueva PINN para encontrar el primer estado excitado $\psi 1$ añadiendo una restricción de ortogonalidad a la función de pérdida ($\int \psi 1 * \psi 0 dx=0$).[26] Este enfoque se ha aplicado con éxito a problemas canónicos como el pozo de potencial infinito y la partícula en un anillo.[38]

4.3. Astrofísica y Física de Plasmas

La versatilidad de las PINNs se extiende a los dominios de la astrofísica y la física de plasmas, donde las ecuaciones gobernantes pueden ser complejas y las mediciones experimentales difíciles de obtener. Se han utilizado PINNs para resolver ecuaciones relevantes en estos campos, demostrando su capacidad para adaptarse a diferentes tipos de EDPs.[15] Ejemplos notables incluyen:

- **Ecuación de Grad-Shafranov:** Esta ecuación describe los equilibrios magnetohidrodinámicos (MHD) en plasmas confinados magnéticamente, como los que se encuentran en los dispositivos de fusión tokamak.
- **Ecuación de Lane-Emden:** Esta ecuación modela la estructura interna de objetos astrofísicos autogravitantes en equilibrio hidrostático, como las estrellas.

La capacidad de las PINNs para manejar diversas condiciones de contorno y resolver problemas inversos es particularmente valiosa en estos contextos, donde se pueden utilizar datos de observación para inferir propiedades internas de estrellas o plasmas.

4.4. Ciencia de Materiales, Biomecánica y otras áreas

El alcance de las aplicaciones de las PINNs se expande rápidamente, demostrando su potencial como una herramienta computacional de propósito general. El marco ha sido adoptado en una multitud de campos, lo que subraya su creciente importancia y el rápido crecimiento de la investigación en el área.[8] Algunos ejemplos incluyen:

- **Ciencia de Materiales y de Polímeros:** Modelado del comportamiento de materiales complejos, como las propiedades mecánicas y termodinámicas de los polímeros, donde las ecuaciones constitutivas pueden ser altamente no lineales.[18]
- **Biomecánica y Fisiología:** Simulación de sistemas biológicos, como el flujo sanguíneo en las arterias o la mecánica de los tejidos blandos, a menudo en el contexto de la imagen biomédica.[8]
- **Transferencia de Calor:** Resolución de problemas de conducción y convección de calor en diversas geometrías y con diferentes condiciones de contorno.[12]
- **Computación Cuántica:** Más allá de resolver la ecuación de Schrödinger, se están explorando PINNs cuánticas (QPINNs) o híbridas, que utilizan circuitos cuánticos variacionales como parte de la red neuronal, con la hipótesis de que podrían ofrecer ventajas en términos de capacidad de expresión o eficiencia de entrenamiento para ciertos problemas.[43]

Esta amplia gama de aplicaciones ilustra que el principio fundamental de las PINNs —la fusión de datos y física en un marco de aprendizaje profundo— es una idea poderosa y generalizable que está encontrando un terreno fértil en casi todas las áreas de la ciencia y la ingeniería computacional.

Sección 5: PINNs Frente a Métodos Numéricos Tradicionales: Un Análisis Crítico

La evaluación de cualquier nueva tecnología computacional requiere una comparación rigurosa con los métodos establecidos. En el caso de las PINNs, la comparación natural es con los solucionadores numéricos tradicionales, principalmente el Método de Elementos Finitos (FEM) y el Método de Diferencias Finitas (FDM). Este análisis revela un conjunto de ventajas y desventajas que definen los nichos donde cada enfoque puede ser más adecuado.

5.1. Discretización del Dominio: El Enfoque "Libre de Malla" (Mesh-free)

La diferencia más fundamental entre las PINNs y los métodos tradicionales radica en su enfoque de la discretización del dominio.

- **Métodos Tradicionales (FEM/FDM):** Estos métodos son inherentemente **basados en malla**. Requieren que el dominio computacional (espacial y, a veces, temporal) se divida en una colección de elementos discretos (triángulos, cuadriláteros, etc.) o en una rejilla de puntos. La solución continua de la EDP se aproxima mediante un conjunto de ecuaciones algebraicas que se resuelven para los valores de la solución en los nodos de esta malla.[7] La generación de una malla de alta calidad es a menudo un paso no trivial, computacionalmente costoso y que requiere una considerable experiencia, especialmente para geometrías tridimensionales complejas.[7]
- **PINNs:** Son fundamentalmente **libres de malla** (mesh-free). La solución no se representa en puntos discretos, sino como una función continua parametrizada por la propia red neuronal. El entrenamiento se realiza utilizando puntos de colocación que se pueden muestrear de forma flexible (por ejemplo, aleatoriamente o en una rejilla de bajo costo) dentro del dominio, eliminando por completo la necesidad de construir y gestionar una malla de elementos finitos.[2] Esta característica proporciona una flexibilidad y simplicidad de implementación considerables.[44]

5.2. Manejo de Geometrías Complejas y Dimensionalidad

La forma en que cada método maneja la geometría y la dimensionalidad del problema es una consecuencia directa de su dependencia o independencia de la malla.

- **Geometrías Complejas:** El FEM es el estándar de oro para manejar geometrías arbitrariamente complejas y está bien establecido en la industria para este propósito.[7] Sin embargo, esto se logra a costa de un proceso de mallado que puede ser muy complejo. Las PINNs, debido a su naturaleza libre de malla, ofrecen una gran flexibilidad para abordar geometrías complejas sin la sobrecarga del mallado.[18] No obstante, las PINNs canónicas han mostrado dificultades para imponer con precisión las condiciones de contorno en dominios con formas muy irregulares o topologías no triviales. Esto ha motivado el desarrollo de variantes como las XPINNs (que descomponen el dominio) o enfoques híbridos que buscan combinar la robustez del FEM con la flexibilidad de las PINNs.[13]

- **Maldición de la Dimensionalidad:** Este es quizás el punto de venta más fuerte y el área de mayor potencial para las PINNs. En los métodos basados en malla como el FEM o el FDM, el número de puntos o elementos necesarios para discretizar el dominio crece exponencialmente con el número de dimensiones. Por ejemplo, si se necesitan 100 puntos para discretizar una dimensión, se necesitarán 1003=1,000,000 para 3D y 10010 para 10D, lo que rápidamente se vuelve computacionalmente intratable.[6] Las PINNs eluden esta "maldición" al basarse en el muestreo de puntos de colocación, a menudo mediante métodos de Monte Carlo, cuya eficiencia no se degrada tan drásticamente con la dimensión. Esto les confiere un potencial único para resolver EDPs en dimensiones altas (por ejemplo, en finanzas cuantitativas o mecánica cuántica) que están fuera del alcance de los métodos clásicos.[7]

5.3. Precisión, Costo Computacional y Convergencia

La comparación en términos de rendimiento práctico es matizada y depende en gran medida del problema específico.

- **Precisión:** Los métodos numéricos tradicionales como el FEM tienen una base teórica sólida, con una teoría de convergencia bien comprendida y la capacidad de alcanzar niveles muy altos de precisión mediante el refinamiento de la malla.[14] Las PINNs, por otro lado, a menudo tienen dificultades para alcanzar el mismo nivel de precisión en el error de la solución. Su rendimiento se ve particularmente afectado por soluciones que contienen componentes de alta frecuencia, gradientes abruptos o singularidades, debido al sesgo espectral inherente de las redes neuronales.[14]
- **Costo Computacional:** Aquí existe un compromiso fundamental. El **entrenamiento** de una PINN es un proceso de optimización iterativo que puede ser extremadamente lento y computacionalmente costoso, a menudo requiriendo cientos de miles o incluso millones de iteraciones y un hardware potente (GPUs).[22] En contraste, un solucionador FEM puede ser significativamente más rápido para calcular la solución de una **única instancia** del problema. Sin embargo, la ventaja de la PINN aparece después del entrenamiento: la **inferncia**, es decir, la evaluación de la solución en cualquier punto del dominio, es extremadamente rápida, ya que solo implica un pase hacia adelante a través de la red entrenada.[44] Esto hace que las PINNs sean muy atractivas para aplicaciones que requieren evaluaciones repetidas de la solución, como en la optimización de diseños, el control en tiempo real o el modelado sustituto (surrogate modeling).

- **Convergencia:** Los solucionadores FEM vienen con garantías de convergencia bien establecidas. Se puede demostrar teóicamente que, a medida que la malla se refina, la solución numérica converge a la solución verdadera. Las PINNs, en cambio, carecen de una teoría de convergencia rigurosa similar.[8] Su éxito en el entrenamiento no está garantizado y depende en gran medida de una cuidadosa elección de la arquitectura de la red, el optimizador, la tasa de aprendizaje, la inicialización de los pesos y el balance de los términos de la pérdida. El proceso a menudo implica una cantidad significativa de "arte" y prueba y error por parte del experto.[24]

En última instancia, la mayoría de los estudios comparativos concluyen que las PINNs deben considerarse como un **complemento** a los métodos numéricos tradicionales, en lugar de un reemplazo total, al menos en su estado actual de desarrollo.[44] Cada enfoque tiene fortalezas que son debilidades para el otro, lo que sugiere un futuro de modelado híbrido que aproveche lo mejor de ambos mundos.

Tabla 1: PINNs vs. Métodos Numéricos Tradicionales (FEM/FDM): Un Resumen Comparativo

Característica	Redes Neuronales Informadas por la Física (PINNs)	Métodos Numéricos Tradicionales (FEM/FDM)
Principio Fundamental	Optimización de una función de pérdida continua.	Discretización y solución de un sistema de ecuaciones algebraicas.
Discretización del Dominio	Libre de malla (Mesh-free). La solución es una función continua.	Basado en malla (Mesh-based). La solución se calcula en nodos discretos.
Manejo de Geometría	Altamente flexible, sin costo de mallado, aunque con desafíos en contornos complejos.	Robusto y bien establecido, pero la generación de mallas es costosa y compleja.
Maldición de la Dimensionalidad	Escala bien. El costo no crece exponencialmente con la dimensión.	Escala mal. El costo computacional es a menudo intratable en altas dimensiones.
Resolución de Problemas Inversos	Marco integrado y eficiente. Los parámetros físicos son variables entrenables.	Requiere algoritmos complejos y costosos, a menudo con bucles de optimización externos.
Costo Computacional	Entrenamiento muy lento y costoso. Inferencia (evaluación) extremadamente rápida.	Solución de una única instancia más rápida. Cada nueva simulación es costosa.

Precisión	Desafíos con soluciones de alta frecuencia y gradientes abruptos.	Puede alcanzar una precisión muy alta con refinamiento de malla.
Garantías Teóricas	Teoría de convergencia y estimaciones de error limitadas o inexistentes.	Teoría de convergencia y análisis de error bien establecidos.
Requerimiento de Datos	Eficiente con datos dispersos y ruidosos gracias a la regularización física.	Requiere condiciones de contorno e iniciales bien definidas en todo el límite.

Parte III: Desafíos, Patologías y Fronteras de la Investigación Actual

A pesar de su promesa y rápido desarrollo, las PINNs no son una panacea. Su aplicación práctica está plagada de desafíos significativos que surgen de la naturaleza misma de la optimización de redes neuronales profundas en el contexto de las leyes físicas. Comprender estas "patologías" es crucial para cualquier practicante y ha impulsado una vasta área de investigación destinada a hacer que las PINNs sean más robustas, precisas y fiables.

Sección 6: Patologías del Entrenamiento y Desafíos de Convergencia

El proceso de entrenamiento de una PINN es notoriamente difícil y sensible a múltiples factores.[8] Las dificultades no son meramente técnicas, sino que están profundamente arraigadas en las propiedades fundamentales de las redes neuronales y su interacción con la estructura matemática de las ecuaciones diferenciales.

6.1. El Problema del "Sesgo Espectral" (Spectral Bias)

Uno de los desafíos más fundamentales y ampliamente estudiados es el **sesgo espectral**.[20] Este fenómeno describe la tendencia inherente de las redes neuronales estándar, cuando se entrenan mediante descenso de gradiente, a aprender primero las componentes de baja frecuencia de una función objetivo, mientras que convergen mucho más lentamente a las componentes de alta frecuencia.

En el contexto de las PINNs, esto tiene implicaciones directas y problemáticas. Significa que la red neuronal lucha por aprender soluciones de EDPs que contienen características de alta frecuencia, como detalles finos, comportamiento oscilatorio, turbulencia o gradientes abruptos.[14] Cuando se enfrenta a una solución que contiene, por ejemplo, una onda de choque (un gradiente casi infinito), la red, debido a su sesgo espectral, tenderá a aproximarla con una transición suave y difusa, fallando en capturar la discontinuidad física real.[19] Este sesgo es una de las principales barreras para la aplicación de PINNs a problemas complejos en dinámica de fluidos y otros campos donde los fenómenos multiescala son la norma.

6.2. Inestabilidad en el Entrenamiento y Gradientes Desbalanceados

Como se estableció, la función de pérdida de una PINN es una suma ponderada de múltiples términos que representan diferentes objetivos: el residuo de la física, las condiciones de contorno y las condiciones iniciales.[8] Una patología común y grave que surge de esta formulación multiobjetivo es el
desequilibrio de gradientes (gradient imbalance).[8]
Durante el entrenamiento, las magnitudes de los diferentes términos de la pérdida y, más importante aún, las magnitudes de sus gradientes con respecto a los parámetros de la red, pueden variar en varios órdenes de magnitud. El optimizador, como Adam, puede verse dominado por el término de la pérdida que produce los gradientes más grandes. Esto puede llevar a un escenario en el que la red se enfoca casi exclusivamente en minimizar un objetivo (por ejemplo, el error en una parte del contorno) mientras ignora los otros (como el residuo de la física en el interior del dominio). El resultado es un entrenamiento fallido que converge a una solución físicamente incorrecta o que no respeta las condiciones del problema. Este desequilibrio hace que el entrenamiento de las PINNs sea notoriamente inestable y altamente sensible a la elección de los pesos de la pérdida y otros hiperparámetros.

6.3. Manejo de Discontinuidades y Frentes de Choque

Directamente relacionado con el sesgo espectral, el manejo de discontinuidades es un desafío fundamental para las PINNs. Las redes neuronales, al estar compuestas por la superposición de funciones de activación suaves (como tanh), son por naturaleza aproximadores de funciones suaves. Su arquitectura inherente no está bien preparada para representar discontinuidades o saltos abruptos en la solución o sus derivadas.[47]
Esto representa un obstáculo significativo para aplicar PINNs a una amplia clase de problemas físicos importantes, como las ondas de choque en la dinámica de gases (descritas por la ecuación de Burgers o Euler), los frentes de fase en la ciencia de materiales, o las líneas de fractura en la mecánica de sólidos. La incapacidad de la red para representar estas características conduce a oscilaciones no físicas cerca de la discontinuidad (similar al fenómeno de Gibbs en las series de Fourier) o a una excesiva difuminación del frente. La investigación activa en esta área se centra en modificar el marco de la PINN para abordar esta limitación, por ejemplo, mediante la adición de términos de viscosidad artificial en la ecuación o mediante la descomposición del dominio en regiones suaves separadas por la discontinuidad.[47]

6.4. Falta de Garantías Teóricas

Finalmente, un desafío persistente que subyace a todos los demás es la falta de un marco teórico riguroso para las PINNs. A diferencia de los métodos numéricos clásicos como el FEM, para los cuales existen décadas de análisis matemático que proporcionan garantías de convergencia, estabilidad y estimaciones de error a priori, las PINNs operan en gran medida en un vacío teórico.[8]

No existen, en general, teoremas que garanticen que el proceso de entrenamiento de una PINN convergerá a la solución correcta, ni estimaciones fiables del error de la solución obtenida. El éxito de una simulación con PINN a menudo depende de la experiencia, la intuición y una laboriosa búsqueda de hiperparámetros por prueba y error.[24] Esta falta de fiabilidad y previsibilidad es una barrera importante para su adopción en aplicaciones críticas para la seguridad en la industria y la ciencia, donde la cuantificación y el control del error son primordiales.

Estas patologías no son exclusivas de las PINNs, sino que son, en su mayoría, propiedades heredadas de las redes neuronales profundas. Sin embargo, el contexto de la física las exacerba y, lo que es más importante, hace que sus efectos sean físicamente interpretables. Cuando una PINN falla debido al sesgo espectral, el resultado no es una clasificación incorrecta de una imagen, sino un campo de flujo borroso que viola las leyes de conservación.[19] Cuando falla debido al desequilibrio de gradientes, la solución puede coincidir perfectamente con los datos en los límites, pero violar la conservación de la masa en el interior.[21] Esto significa que la depuración y mejora de las PINNs requiere una doble experiencia: una comprensión profunda tanto del paisaje de optimización de las redes neuronales como de la naturaleza física de la solución esperada.

Sección 7: Estrategias Avanzadas y Taxonomía de Variantes de PINNs

La comunidad de investigación ha respondido enérgicamente a los desafíos y patologías del entrenamiento de las PINNs, dando lugar a un ecosistema vibrante y en rápida expansión de variantes, extensiones y estrategias de mitigación. Estas técnicas avanzadas pueden clasificarse en función del problema específico que buscan resolver, proporcionando una hoja de ruta para los practicantes que se enfrentan a problemas de entrenamiento.

7.1. Mitigación del Sesgo Espectral

Para combatir la tendencia de las redes a aprender solo funciones de baja frecuencia, se han desarrollado varias estrategias para ayudar a la red a capturar detalles de alta frecuencia:

- **Mapeo de Características de Fourier (Fourier Feature Mapping):** Esta técnica, inspirada en trabajos sobre representación de coordenadas, consiste en proyectar las coordenadas de entrada de baja dimensión (x,t) a un espacio de características de mayor dimensión utilizando una base de funciones sinusoidales (senos y cosenos) de diferentes frecuencias. Al alimentar a la red con estas características de alta frecuencia desde el principio, se le facilita el aprendizaje de funciones complejas y oscilatorias.[49]

- **Funciones de Activación Adaptativas o Periódicas:** En lugar de utilizar funciones de activación estándar como tanh, algunas investigaciones proponen el uso de funciones de activación periódicas como sin(x) (dando lugar a las arquitecturas SIREN) o funciones de activación con parámetros entrenables. Estas activaciones pueden tener un sesgo inductivo más adecuado para representar soluciones oscilatorias o complejas y han demostrado mejorar la precisión en ciertos problemas.[20]
- **Arquitecturas Multiescala o Jerárquicas:** La idea aquí es diseñar arquitecturas de red que descompongan explícitamente la tarea de aprendizaje en diferentes escalas de frecuencia. Por ejemplo, una red podría tener múltiples ramas, cada una responsable de aprender una componente de la solución a una escala diferente, que luego se combinan para formar la solución final.[20]

7.2. Estrategias de Ponderación Adaptativa de la Pérdida (Adaptive Loss Weighting)

Para abordar el problema de los gradientes desbalanceados y la inestabilidad del entrenamiento, se han propuesto numerosos esquemas para ajustar dinámicamente los pesos λ de la función de pérdida durante el entrenamiento:

- **Ponderación Basada en Gradientes:** Algunos métodos buscan equilibrar la magnitud de los gradientes que provienen de los diferentes términos de la pérdida. Por ejemplo, los pesos pueden ajustarse en cada paso de entrenamiento para asegurar que la norma de los gradientes de la pérdida de física y la pérdida de contorno sean comparables.
- **Ponderación Basada en Incertidumbre:** El problema se puede enmarcar como un aprendizaje multiobjetivo, donde cada término de la pérdida corresponde a una tarea. Los pesos se aprenden dinámicamente en función de la incertidumbre homoscedástica de cada tarea.
- **Ponderación Basada en el Historial de la Pérdida:** Estrategias más simples y a menudo efectivas utilizan promedios móviles exponenciales (EMA) de los valores de la pérdida para ajustar los pesos, dando más importancia a los términos que actualmente tienen una pérdida mayor o que están convergiendo más lentamente.[24]
- **Enfoques Causales:** Para problemas dependientes del tiempo, se ha observado que las PINNs a menudo no respetan la "causalidad" (la solución en el tiempo t solo debe depender de los tiempos anteriores). Se han propuesto esquemas de ponderación que entrenan la red de manera secuencial en el tiempo, priorizando los puntos de colocación en tiempos tempranos antes de pasar a tiempos posteriores.[25]

El objetivo común de estas técnicas es automatizar el tedioso y a menudo poco fiable proceso de ajuste manual de los hiperparámetros de la pérdida, haciendo que el entrenamiento de las PINNs sea más robusto y autónomo.[24]

7.3. Extensiones Arquitectónicas y Enfoques Híbridos

Más allá de modificar el entrenamiento, se han desarrollado extensiones arquitectónicas fundamentales para superar las limitaciones de las PINNs canónicas:

- **XPINN (Extended PINN):** Es un enfoque de **descomposición de dominio**. El dominio computacional se divide en varios subdominios no superpuestos, y se entrena una PINN independiente en cada uno. La continuidad de la solución y sus derivadas se impone a través de términos de pérdida adicionales en las interfaces entre los subdominios.[13] Este enfoque es particularmente útil para problemas en geometrías muy grandes o complejas, o para soluciones que exhiben comportamientos muy diferentes en distintas partes del dominio (por ejemplo, una región de flujo laminar y otra de flujo turbulento).
- **PINO (Physics-Informed Neural Operator):** Representa una evolución conceptual significativa. Mientras que una PINN aprende la función de solución para una **instancia específica** de una EDP (con parámetros y condiciones de contorno fijos), un Operador Neuronal (como el Fourier Neural Operator - FNO) aprende el **operador solución** en sí mismo. Un PINO es un híbrido que combina la arquitectura de un operador neuronal con la regularización física de una PINN. El resultado es un modelo que, una vez entrenado, puede resolver la EDP para **diferentes** parámetros de entrada, condiciones iniciales o de contorno sin necesidad de un costoso reentrenamiento, ofreciendo una generalización mucho mayor.[18]
- **Enfoques Híbridos PINN-FEM/FDM:** Estos marcos buscan combinar explícitamente las fortalezas de las PINNs y los métodos numéricos tradicionales. Por ejemplo, en un problema de interacción fluido-estructura (FSI), se puede usar un solucionador FEM, robusto y preciso, para el dominio estructural sólido, mientras que una PINN, más flexible, modela el dominio del fluido. La comunicación entre ambos se gestiona en la interfaz.[53] Otros enfoques híbridos reemplazan la Diferenciación Automática por diferencias finitas (FDM) para calcular el residuo de la física, lo que puede ofrecer ventajas de velocidad en algunos casos.[29]

7.4. Incorporación de Simetrías y Múltiples Soluciones

Finalmente, la investigación también se ha centrado en incorporar conocimiento físico más profundo en el marco de la PINN:

- **Simetrías de Lie:** Para muchas EDPs, se conocen grupos de simetría (simetrías de Lie) que dejan la ecuación invariante. Se ha propuesto añadir un término de pérdida adicional que penaliza a la red si su solución viola estas simetrías. Esto introduce un sesgo inductivo muy fuerte que puede mejorar drásticamente la eficiencia de los datos y la precisión de la solución.[54]

- **Descubrimiento de Múltiples Soluciones:** Las EDPs no lineales a menudo admiten múltiples soluciones estables e inestables. Una sola PINN típicamente convergerá a una de ellas. Para explorar y descubrir este paisaje de soluciones, se puede utilizar un **ensemble de PINNs**. Al entrenar múltiples PINNs con diferentes inicializaciones aleatorias de los pesos, el ensemble puede converger a diferentes soluciones, permitiendo el descubrimiento de la multiplicidad de soluciones del sistema físico.[17]

El rápido crecimiento del campo ha llevado a una proliferación de variantes y acrónimos. La siguiente tabla busca organizar este "zoológico" de técnicas en un marco coherente, mapeando las patologías del entrenamiento a las estrategias de mitigación propuestas.

Tabla 2: Taxonomía de Variantes de PINNs y Estrategias de Mitigación de Patologías

Patología / Desafío	Estrategia / Variante	Principio de Funcionamiento	Referencias Clave
Sesgo Espectral / Gradientes Abruptos	Mapeo de Características de Fourier, Activaciones Periódicas (SIREN), Arquitecturas Multiescala	Enriquece las entradas con características de alta frecuencia o utiliza activaciones con un sesgo inductivo más adecuado para funciones oscilatorias.	[20]
Desequilibrio de Gradientes / Entrenamiento Inestable	Ponderación Adaptativa de la Pérdida (e.g., basada en gradientes, EMA, causalidad)	Ajusta dinámicamente los pesos de los términos de la pérdida para equilibrar su influencia en el proceso de optimización, automatizando el ajuste de hiperparámetros.	[24]
Geometrías Complejas / Topología	XPINN (Descomposición de Dominio), Enfoques Híbridos PINN-FEM, Pseudo-Density Embedding	Divide el problema en subdominios más simples o combina la flexibilidad de la PINN con la robustez de los métodos de malla para manejar contornos irregulares.	[13]
Costo de	PINO	Aprende el mapeo del	[18]

Reentrenamiento para Nuevos Parámetros	(Physics-Informed Neural Operator)	operador solución en lugar de una única solución, permitiendo la generalización a nuevos parámetros de la EDP sin reentrenamiento.	
Discontinuidades / Frentes de Choque	Adición de Viscosidad Artificial, Descomposición de Dominio (XPINN)	Modifica la física (añadiendo difusión) o aísla la discontinuidad en una interfaz para que las redes neuronales solo necesiten aprender soluciones suaves.	[47]
Descubrimiento de Múltiples Soluciones	Ensembles de PINNs	Aprovecha la aleatoriedad en la inicialización para explorar el espacio de soluciones y permitir que diferentes miembros del ensemble converjan a diferentes soluciones de la EDP.	[17]

Parte IV: Síntesis y Perspectivas Futuras

Tras analizar en profundidad el marco fundamental, las aplicaciones y los desafíos de las PINNs, es posible realizar una síntesis crítica de su estado actual y vislumbrar las direcciones futuras que darán forma a su papel en la computación científica.

Sección 8: El Ecosistema PINN: Hype vs. Realidad en la Computación Científica

Como ocurre con muchas tecnologías emergentes en el campo de la inteligencia artificial, las PINNs han estado rodeadas de un considerable entusiasmo. Es crucial, por tanto, separar la promesa de la realidad actual para obtener una perspectiva equilibrada.

8.1. Evaluación Crítica del Estado Actual

La pregunta central que se plantea a menudo es si las PINNs están destinadas a reemplazar a los solucionadores numéricos tradicionales como el FEM. La evidencia acumulada y el consenso en la comunidad de investigación sugieren fuertemente que, en su estado actual, las PINNs deben considerarse como un **complemento** a los métodos tradicionales, no como un sustituto universal.[44]

Existe una brecha notable entre el "hype" —la visión de un solucionador de EDPs universal, fácil de usar y basado en IA— y la "realidad" de su implementación práctica.[55] La aplicación de PINNs a problemas industriales complejos y a gran escala todavía se enfrenta a obstáculos significativos. La robustez del entrenamiento, la dificultad para alcanzar altos niveles de precisión y los desafíos de escalabilidad siguen siendo barreras importantes.[8] El entrenamiento de PINNs sigue siendo, en muchos aspectos, un "arte" que requiere una profunda experiencia tanto en aprendizaje automático como en el dominio físico del problema.[31]

8.2. Nichos de Aplicación con Ventajas Claras

A pesar de estas limitaciones, existen "nichos de aplicación" o "sweet spots" bien definidos donde las PINNs ya ofrecen ventajas claras y demostradas sobre los enfoques tradicionales, o los complementan de manera muy eficaz:

- **Problemas Inversos y de Identificación de Parámetros:** Esta es, quizás, el área de aplicación más exitosa y convincente para las PINNs. Su capacidad para inferir parámetros físicos desconocidos a partir de datos experimentales dispersos y ruidosos, dentro de un marco unificado y eficiente, es una ventaja fundamental sobre los métodos de optimización tradicionales, que suelen ser mucho más complejos y computacionalmente intensivos.[2]
- **Problemas de Alta Dimensionalidad:** Las PINNs muestran una promesa inmensa para abordar EDPs en dimensiones donde los métodos basados en malla son simplemente inviables debido a la maldición de la dimensionalidad. Áreas como las finanzas cuantitativas (ecuación de Black-Scholes en múltiples dimensiones) o la mecánica cuántica de muchos cuerpos son terrenos fértiles para la exploración con PINNs.[6]
- **Modelado Sustituto (Surrogate Modeling):** Una vez que una PINN ha sido entrenada (un proceso que puede ser muy costoso), puede usarse como un modelo sustituto ultrarrápido. La inferencia es casi instantánea, lo que permite su uso en bucles de optimización de diseño, análisis de incertidumbre o sistemas de control en tiempo real, donde miles de evaluaciones de la solución son necesarias.[8]
- **Problemas con Datos Faltantes o Ruidosos:** La regularización impuesta por las leyes físicas proporciona a las PINNs una notable robustez frente a datos imperfectos.

Pueden "rellenar" huecos en los datos y "filtrar" el ruido de una manera físicamente consistente, una tarea difícil para los métodos puramente basados en datos.[14]

8.3. Recomendaciones para Practicantes

Para un investigador o ingeniero que considere utilizar PINNs, la decisión debe basarse en una evaluación cuidadosa de las características del problema en cuestión.[57] Se debe considerar:

1. **Naturaleza del Problema:** ¿Es un problema directo o inverso? Para problemas inversos, las PINNs son una opción muy fuerte. Para problemas directos que requieren alta precisión, un solucionador FEM/FDM bien establecido puede ser más fiable y rápido.
2. **Dimensionalidad:** Para problemas de baja dimensión (1D, 2D, 3D), los métodos tradicionales son muy competitivos. Para dimensiones más altas, las PINNs se convierten en una de las pocas opciones viables.
3. **Disponibilidad de Datos:** ¿Se dispone de datos dispersos del interior del dominio? Si es así, las PINNs pueden aprovecharlos eficazmente. Si solo se conocen las condiciones de contorno, el problema es puramente de resolución directa.
4. **Requisitos de Precisión:** Si la aplicación requiere errores relativos muy bajos (10−5 o menos), las PINNs pueden tener dificultades para alcanzarlos de manera consistente.
5. **Complejidad de la Física:** ¿La solución esperada es suave o contiene discontinuidades, gradientes abruptos o comportamiento multiescala? Para soluciones suaves, las PINNs canónicas pueden funcionar bien. Para soluciones más complejas, es probable que se necesiten variantes avanzadas (XPINN, mapeo de Fourier, etc.), lo que aumenta la complejidad de la implementación.

Sección 9: Direcciones Futuras y el Horizonte de la Simulación Basada en IA

El campo de las PINNs está en constante y rápida evolución. La investigación actual se centra no solo en superar sus limitaciones existentes, sino también en expandir sus capacidades hacia nuevas y emocionantes fronteras.

9.1. Integración con Computación de Alto Rendimiento (HPC) y Computación Cuántica

El futuro de las simulaciones a gran escala con PINNs está intrínsecamente ligado a los avances en la computación de alto rendimiento. La aceleración masiva en paralelo en GPUs y TPUs es ya un estándar, y se están desarrollando marcos de software para escalar el entrenamiento de PINNs a sistemas de supercomputación.[51] Más allá de la computación

clásica, emerge el campo de las
PINNs cuánticas (QPINNs). La idea es utilizar circuitos cuánticos variacionales como componentes de la red neuronal, con la hipótesis de que el entrelazamiento y la superposición cuánticos podrían proporcionar una capacidad de expresión superior o ventajas en la optimización para ciertos tipos de problemas. Aunque es un campo incipiente, la investigación en PINNs híbridas cuántico-clásicas es una dirección prometedora.[43]

9.2. Hacia la Cuantificación de la Incertidumbre (UQ)

La mayoría de las implementaciones de PINNs son deterministas: proporcionan una única predicción para la solución. Sin embargo, en aplicaciones del mundo real, es crucial no solo predecir un valor, sino también cuantificar la confianza en esa predicción. La **Cuantificación de la Incertidumbre (UQ)** es fundamental. La investigación en **PINNs Bayesianas (B-PINNs)** aborda este problema. En lugar de aprender un único valor para los pesos de la red, las B-PINNs aprenden una distribución de probabilidad sobre los pesos. Esto permite que el modelo produzca no solo una predicción media, sino también una estimación de la incertidumbre (por ejemplo, una desviación estándar) en cada punto del dominio. Esta información es vital para la toma de decisiones en ingeniería y para evaluar la fiabilidad del modelo.[8]

9.3. El Potencial para el Descubrimiento de Nuevas Físicas

La frontera más ambiciosa para las PINNs es pasar de ser solucionadores de ecuaciones conocidas a ser herramientas para el descubrimiento científico. Esto se conoce como el problema del **descubrimiento de EDPs**. En este paradigma, no solo se aprende la solución u, sino que la propia forma del operador diferencial F se parametriza y se aprende a partir de los datos.[2] Por ejemplo, la red podría intentar descubrir los coeficientes y los términos diferenciales que componen una ley de conservación desconocida que mejor describe un conjunto de datos observacionales. Aunque es un problema extremadamente desafiante, representa el potencial último de las PINNs: no solo aplicar el conocimiento físico, sino también generarlo.

9.4. Conclusión: La Visión de un Futuro Híbrido

En conclusión, las Redes Neuronales Informadas por la Física han surgido como un marco computacional poderoso y conceptualmente elegante que cierra la brecha entre el aprendizaje automático basado en datos y el modelado basado en primeros principios. Aunque no son un reemplazo universal para los métodos numéricos tradicionales, han demostrado ser una herramienta invaluable para una clase específica de problemas,

especialmente los inversos y los de alta dimensionalidad.
La visión de futuro para la computación científica no es una de reemplazo, sino de **hibridación y sinergia**. El futuro probablemente pertenecerá a los modelos híbridos que combinen la robustez, la precisión y la sólida base teórica de los solucionadores clásicos con la flexibilidad, la eficiencia de datos y la capacidad de manejar la dimensionalidad de los enfoques de aprendizaje profundo como las PINNs.[8] El objetivo final, que impulsa a toda la comunidad de SciML, es la creación de una nueva generación de herramientas de modelado que sean simultáneamente conscientes de la física, impulsadas por los datos, computacionalmente eficientes y científicamente fundamentadas.[8] En este nuevo paradigma, las PINNs y sus futuras evoluciones desempeñarán, sin duda, un papel central y transformador.

Obras citadas

1. Physics-Informed Neural Networks (PINNs) - The Synergy of Data & Physics in Deep Learning - Jousef Murad, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://www.engineered-mind.com/engineering/physics-informed-neural-networks-pinns/
2. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for ..., fecha de acceso: junio 21, 2025, https://faculty.sites.iastate.edu/hliu/files/inline-files/PINN_RPK_2019_1.pdf
3. Desafíos Y Limitaciones De Las Redes Neuronales En Dtct - FasterCapital, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://fastercapital.com/es/tema/desaf%C3%ADos-y-limitaciones-de-las-redes-neuronales-en-dtct.html
4. An Overview of Neural Networks Inspired by Physics and its Applications - IJNRD, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://www.ijnrd.org/papers/IJNRD2407331.pdf
5. (PDF) Driven by Data or Derived Through Physics? A Review of Hybrid Physics Guided Machine Learning Techniques With Cyber-Physical System (CPS) Focus - ResearchGate, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://www.researchgate.net/publication/340628535_Driven_by_Data_or_Derived_Through_Physics_A_Review_of_Hybrid_Physics_Guided_Machine_Learning_Techniques_With_Cyber-Physical_System_CPS_Focus
6. Scientific Machine Learning - Departamento de Ciencias de la Computación e Inteligencia Artificial, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://www.cs.us.es/~fsancho/Blog/posts/SciML/
7. ADVANCED MACHINE LEARNING TECHNIQUES FOR EFFICIENT ..., fecha de acceso: junio 21, 2025, https://mathsapplication.com/submissions/index.php/ma/article/download/82/23/141
8. Embedding Physics into Deep Learning: A Structured Review of Physics-Informed Neural Networks - Preprints.org, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://www.preprints.org/manuscript/202504.2577/v1
9. [2408.16806] Physics-Informed Neural Networks and Extensions - arXiv, fecha de

acceso: junio 21, 2025, https://arxiv.org/abs/2408.16806
10. maziarraissi/PINNs: Physics Informed Deep Learning: Data-driven Solutions and Discovery of Nonlinear Partial Differential Equations - GitHub, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://github.com/maziarraissi/PINNs
11. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations (Journal Article) - OSTI, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://www.osti.gov/biblio/1595805
12. Exact enforcement of temporal continuity in sequential physics-informed neural networks (Journal Article) | OSTI.GOV, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://www.osti.gov/biblio/2429369
13. Physics-informed neural networks - Wikipedia, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://en.wikipedia.org/wiki/Physics-informed_neural_networks
14. Introducción a las redes neuronales informadas por la física (PINN ..., fecha de acceso: junio 21, 2025, https://la.mathworks.com/discovery/physics-informed-neural-networks.html
15. A hands-on introduction to Physics-Informed Neural Networks for solving partial differential equations with benchmark tests taken from astrophysics and plasma physics - arXiv, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://arxiv.org/html/2403.00599v1
16. Aprendizaje automático: redes neuronales informadas por física aplicadas a sistemas con ciclos límite, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://zaguan.unizar.es/record/149334/files/TAZ-TFG-2024-4400.pdf
17. Learning and discovering multiple solutions using physics-informed neural networks with random initialization and deep ensemble - arXiv, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://arxiv.org/html/2503.06320v1
18. Physics-Informed Neural Networks in Polymers: A Review - MDPI, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://www.mdpi.com/2073-4360/17/8/1108
19. Burgers Optimization with a PINN - Physics-based Deep Learning, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://physicsbaseddeeplearning.org/physicalloss-code.html
20. Multi-level datasets training method in Physics-Informed Neural Networks - arXiv, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://arxiv.org/html/2504.21328v1
21. Applying Physics-Informed Neural Networks to Solve Navier–Stokes ..., fecha de acceso: junio 21, 2025, https://www.mdpi.com/2297-8747/28/5/102
22. Redes neuronales informadas por física: PINNs - YouTube, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://www.youtube.com/watch?v=JNiL6zIm_Cw
23. A comprehensive review of physics-informed deep learning and its applications in geoenergy development - The Innovation, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://www.the-innovation.org/data/article/energy/preview/pdf/XINNENERGY-2024-0097.pdf
24. BO-SA-PINNs: Self-adaptive physics-informed neural networks based on Bayesian optimization for automatically designing PDE solvers - arXiv, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://arxiv.org/html/2504.09804v1
25. Training PINNs with Hard Constraints and Adaptive Weights: An Ablation Study -

arXiv, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://arxiv.org/html/2404.16189v2
26. A tutorial on the use of physics-informed neural networks to ... - arXiv, fecha de acceso: junio 21, 2025, http://arxiv.org/pdf/2407.20669
27. The solution to the IVP (8), predicted by the PINN (red line with... - ResearchGate, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://www.researchgate.net/figure/The-solution-to-the-IVP-8-predicted-by-the-PINN-red-line-with-circle-markers-and-the_fig2_354017827
28. Physics-Informed Neural Networks: A Deep Learning Framework for Solving Forward and Inverse Problems Involving Nonlinear Partial Differential Equations | Request PDF - ResearchGate, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://www.researchgate.net/publication/328720075_Physics-Informed_Neural_Networks_A_Deep_Learning_Framework_for_Solving_Forward_and_Inverse_Problems_Involving_Nonlinear_Partial_Differential_Equations
29. Hybrid Finite-Difference Physics-Informed Neural Networks Partial Differential Equation Solver for Complex Geometries | Journal of Thermophysics and Heat Transfer - Aerospace Research Central, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://arc.aiaa.org/doi/10.2514/1.T7077
30. Hybrid Numerical PINNs: On the effectiveness of numerical differentiation for non-analytic problems | OpenReview, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://openreview.net/forum?id=R5FzCFR5yU
31. Workshop Lorentz Center, Leiden "Computational Science and Machine Learning" November 1-5, 2021 ABSTRACTS, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://www.lorentzcenter.nl/index.php?pntType=ConPagina&id=1511&conBestandId=2375&pntHandler=DownloadAction&PHPSESSID=d3b6b9add23f788698bc04b63647a70b
32. Aplicación de redes neuronales informadas por la física a la resolución numérica de problemas diferenciales - idUS, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://idus.us.es/items/1072aefa-359e-4fc3-afe6-0b4ca24db5e3
33. [2402.03153] Learning solutions of parametric Navier-Stokes with physics-informed neural networks - arXiv, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://arxiv.org/abs/2402.03153
34. Solving 1D Burgers' Equation with Physics-Informed Neural Networks: A Comprehensive Guide - UBOS.tech, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://ubos.tech/news/solving-1d-burgers-equation-with-physics-informed-neural-networks-a-comprehensive-guide/
35. Solve PDE Using Physics-Informed Neural Network - MATLAB & Simulink - MathWorks, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://www.mathworks.com/help/deeplearning/ug/solve-partial-differential-equations-with-lbfgs-method-and-deep-learning.html
36. A Step by Step Guide to Solve 1D Burgers' Equation with Physics-Informed Neural Networks (PINNs): A PyTorch Approach Using Automatic Differentiation and Collocation Methods [Colab Notebook Included] - Reddit, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://www.reddit.com/r/machinelearningnews/comments/1jmf3ev/a_step_by_step_guide_to_solve_1d_burgers_equation/

37. A Step by Step Guide to Solve 1D Burgers' Equation with Physics ..., fecha de acceso: junio 21, 2025, https://www.marktechpost.com/2025/03/28/a-step-by-step-guide-to-solve-1d-burgers-equation-with-physics-informed-neural-networks-pinns-a-pytorch-approach-using-automatic-differentiation-and-collocation-methods/
38. [2407.20669] A Tutorial on the Use of Physics-Informed Neural Networks to Compute the Spectrum of Quantum Systems - arXiv, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://arxiv.org/abs/2407.20669
39. Physics-Informed Neural Networks para resolver ecuaciones diferenciales de primer y segundo orden - Universidad de Zaragoza, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://zaguan.unizar.es/record/125121/files/TAZ-TFG-2022-3391.pdf;
40. [2403.00599] A hands-on introduction to Physics-Informed Neural Networks for solving partial differential equations with benchmark tests taken from astrophysics and plasma physics - arXiv, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://arxiv.org/abs/2403.00599
41. Evolutionary Optimization of Physics-Informed Neural Networks: Survey and Prospects, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://arxiv.org/html/2501.06572v2
42. Understanding Physics-Informed Neural Networks: Techniques, Applications, Trends, and Challenges - MDPI, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://www.mdpi.com/2673-2688/5/3/74
43. Quantum Physics-Informed Neural Networks - MDPI, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://www.mdpi.com/1099-4300/26/8/649
44. Can physics-informed neural networks beat the finite element method? - ResearchGate, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://www.researchgate.net/publication/380818402_Can_physics-informed_neural_networks_beat_the_finite_element_method
45. Δ-PINNs: physics-informed neural networks on complex geometries - arXiv, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://arxiv.org/html/2209.03984v2
46. Fast Convergence PINNs Using Pseudo-Density Embedding: A Study on Solid Mechanics - IEEE CAI 2024, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://www.ieeecai.org/2024/wp-content/pdfs/540900a574/540900a574.pdf
47. Challenges and Advancements in Modeling Shock Fronts with Physics-Informed Neural Networks: A Review and Benchmarking Study - arXiv, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://arxiv.org/html/2503.17379v1
48. Mitigating Spectral Bias in Neural Operators via High-Frequency Scaling for Physical Systems - arXiv, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://arxiv.org/html/2503.13695v1
49. Spectral Bias Correction in PINNs for Myocardial Image Registration of Pathological Data, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://arxiv.org/html/2504.17945
50. Enhancing Physics-Informed Neural Networks Through Feature Engineering - arXiv, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://arxiv.org/html/2502.07209v2
51. Physics-Informed Neural Networks for the Structural Analysis and Monitoring of Railway Bridges: A Systematic Review - MDPI, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://www.mdpi.com/2227-7390/13/10/1571

52. Adaptive Physics-informed Neural NetworksPublished in Transactions on Machine Learning Research (03/2025) - arXiv, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://arxiv.org/html/2503.18181v1
53. A Hybrid Physics-Informed Neural Network (PINN) And Finite Element Method (FEM) Framework for Multiscale Fluid-Structure Interac - Research And Analysis Journals, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://www.rajournals.in/index.php/rajar/article/download/1570/1242/4633
54. Lie Point Symmetry and Physics-Informed Networks - OpenReview, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://openreview.net/forum?id=ba4boN3W1n¬eId=FKEnIH62BI
55. Machine learning and partial differential equations: benchmark, simplify, and discover, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://www.researchgate.net/publication/392786074_Machine_learning_and_partial_differential_equations_benchmark_simplify_and_discover
56. AI in my plasma physics research didn't go the way I expected - Hacker News, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://news.ycombinator.com/item?id=44037941
57. Essential Review Papers on Physics-Informed Neural Networks: A Curated Guide for Practitioners | Towards Data Science, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://towardsdatascience.com/essential-review-papers-on-physics-informed-neural-networks-a-curated-guide-for-practitioners/
58. Quantum algorithms for scientific computing - arXiv, fecha de acceso: junio 21, 2025, https://arxiv.org/html/2312.14904v3