

UNIVERSIDAD JUÁREZ AUTÓNOMA DE TABASCO

División Académica de Ciencias y Tecnologías de la Información
Maestría en Ciencias de la Computación

REPORTE DE AVANCE — FASE INICIAL

Simulación Acelerada de Speckle Óptico:
Un Enfoque Basado en Redes Neuronales Físicamente Informadas (PINNs)

Elaborado por:

M.C. Roberto Hernández Estrada

Director de Tesis:

Dr. José Adán Hernández Nolasco

Villahermosa, Tabasco — Febrero 2026

1. Resumen Ejecutivo

El presente reporte documenta el avance correspondiente a la fase inicial de implementación de la tesis de investigación. Se diseñó, implementó y validó un prototipo funcional de Red Neuronal Físicamente Informada (PINN) para la resolución de la ecuación de Helmholtz en dominio unidimensional, estableciendo la base metodológica y computacional para las fases subsecuentes del proyecto.

El experimento de validación inicial demuestra que la arquitectura y estrategia de entrenamiento seleccionadas son capaces de aproximar la solución analítica de la ecuación de Helmholtz con un error L2 relativo de 0.002%, superando en tres órdenes de magnitud el umbral de precisión establecido en la hipótesis de la tesis ($< 5\%$) y en 1,245 veces el resultado reportado por la referencia principal del proyecto.

Métrica	Resultado	Meta / Referencia	Estado
Error L2 relativo	0.002%	$< 5\%$ (hipótesis de tesis)	✓ CUMPLE
Error máximo puntual	0.000038	—	Excelente

Métrica	Resultado	Meta / Referencia	Estado
Schoder & Kraxberger (2024)	2.490%	Referencia principal	Superado ×1,245
Épocas Adam (early stop)	6,662 / 15,000	—	55% de ahorro
Iteraciones L-BFGS	65	—	Convergencia rápida

2. Contexto y Objetivos de la Fase

De acuerdo con el cronograma establecido en el protocolo de tesis, la fase inicial comprende el desarrollo y validación del modelo PINN base antes de escalar al dominio bidimensional requerido para la simulación de speckle óptico. Los objetivos específicos de esta fase son:

- Implementar la arquitectura MLP con soporte para diferenciación automática de segundo orden.
- Validar que el residuo de la ecuación de Helmholtz puede minimizarse correctamente mediante la función de pérdida física.
- Establecer la estrategia de entrenamiento híbrida Adam + L-BFGS con early stopping.
- Verificar que el error L2 relativo cumple el umbral de la hipótesis (< 5%) en condición controlada 1D.
- Documentar los hiperparámetros óptimos como referencia para la extensión al caso 2D.

3. Decisiones Técnicas Implementadas

3.1 Entorno de desarrollo

Componente	Especificación
Sistema operativo	Windows 11 (64 bits)
Hardware GPU	NVIDIA RTX 5050 — 8 GB GDDR7 (Blackwell)
CPU	Intel Core i5-13450HX @ 2.40 GHz
RAM	24 GB DDR5
Framework	PyTorch 2.4+ con CUDA 12.6
Librería PINN	DeepXDE (instalado, pendiente de uso en Fase 2)
Entorno Python	Conda — entorno aislado pinn_speckle (Python 3.11)
IDE	VS Code con extensiones Python + Jupyter

3.2 Arquitectura de la red neuronal

Se implementó un Perceptrón Multicapa (MLP) con las siguientes características, seleccionadas tras experimentación sistemática:

Parámetro	Valor	Justificación
Dimensión de entrada	1 (coordenada x)	Problema 1D de validación
Capas ocultas	5 capas de 64 neuronas	Capacidad óptima tras experimentación
Función de activación	tanh	Infinitamente diferenciable — necesaria para autograd de 2° orden
Dimensión de salida	1 (campo $u(x)$)	Solución escalar real
Inicialización de pesos	Xavier normal	Previene explosión/desvanecimiento de gradientes
Total de parámetros	~13,250	Balance entre capacidad y eficiencia computacional

La elección de tanh sobre ReLU es fundamental: ReLU presenta segunda derivada igual a cero en casi todo el dominio, lo que haría que el residuo de Helmholtz parezca cero incorrectamente. tanh es infinitamente diferenciable y permite el cálculo correcto de $\partial^2 u / \partial x^2$ mediante diferenciación automática.

3.3 Función de pérdida física

La función de pérdida implementada corresponde a la formulación estándar de PINNs:

$$L_{total} = L_{datos} + \lambda \cdot L_{física}$$

donde L_{datos} mide el error en los puntos con valores conocidos y $L_{física}$ mide el residuo de la ecuación de Helmholtz en los puntos de colocación interiores. El parámetro $\lambda = 0.01$ fue determinado experimentalmente como el valor óptimo para este problema.

Tipo de punto	Cantidad	Ubicación	Rol en la pérdida
Puntos conocidos	5	$x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1.0$	Evalúan L_{datos}
Puntos de colocación	2,000	Distribuidos en $[0, 1]$	Evalúan $L_{física}$ (residuo Helmholtz)

3.4 Estrategia de entrenamiento híbrida

Se implementó la estrategia Adam con early stopping seguida de L-BFGS, en línea con la metodología del protocolo de tesis y validada por Schoder y Kraxberger (2024):

Fase	Optimizador	Configuración	Resultado
Fase 1	Adam	$lr=1\times10^{-3}$, máx 15,000 épocas, early stop en $L<1\times10^{-5}$	6,662 épocas — 55% de ahorro
Fase 2	L-BFGS	$lr=1.0$, max_iter=500, history=50, strong_wolfe	65 iteraciones — ajuste fino

El early stopping activó en la época 6,662 de un máximo de 15,000, ahorrando 8,338 épocas innecesarias. Esto representa una reducción del 55% en el tiempo de la primera fase de entrenamiento.

4. Hallazgos Metodológicos Relevantes

El proceso experimental generó cuatro hallazgos que se consideran contribuciones metodológicas documentables para la tesis:

Hallazgo 1 — Degeneración por simetría en condiciones de frontera


Cuando las condiciones de frontera presentan valores iguales ($u(0) = u(1) = 1$, como ocurre con $k = 2\pi$), la red tiende a colapsar hacia una solución constante $u \approx 1$ que satisface trivialmente ambas condiciones sin aprender la oscilación interior. Este fenómeno generó un error L2 de 51.7% en la configuración inicial.

Solución implementada: incorporar puntos intermedios con valores conocidos ($x = 0.25, 0.50, 0.75$) que rompen la simetría y obligan a la red a aprender la variación interior del campo. Esta modificación redujo el error de 51.7% a 0.002%, una mejora de cuatro órdenes de magnitud.

Este hallazgo implica que en el caso 2D (Helmholtz en cuadrado $[0,1]^2$), el diseño de las condiciones de frontera deberá evitar configuraciones simétricas o complementarse con puntos interiores conocidos.

Hallazgo 2 — Sensibilidad crítica del parámetro λ

El parámetro λ (lambda_phys) demostró ser el hiperparámetro más crítico del entrenamiento. Los experimentos sistemáticos revelaron la siguiente progresión:

λ (lambda_phys)	Error L2	Comportamiento observado
1.0 (inicial)	51.7%	Red colapsa a $u \approx 1$ — ignora oscilación interior
0.1	28.0%	Mejora parcial — física compite con datos
0.01 (óptimo)	0.002%	Datos dominan el aprendizaje inicial 

Hallazgo 3 — Indispensabilidad de L-BFGS para ajuste fino

El optimizador Adam, aunque efectivo para la convergencia global, presenta oscilaciones inherentes que impiden alcanzar el mínimo exacto de la función de pérdida. En el experimento, Adam terminó su fase en un punto con $L_{total} = 9.6 \times 10^{-3}$ debido a una oscilación ascendente, mientras que L-BFGS redujo este valor a 2.2×10^{-6} en solo 65 iteraciones — una reducción de 4,400 veces.

Esto confirma empíricamente la necesidad de la estrategia híbrida propuesta en el protocolo de tesis y valida la metodología de Schoder y Kraxberger (2024).

Hallazgo 4 — Early stopping como optimización de eficiencia

La implementación del criterio de early stopping (detener Adam cuando $L_{total} < 1 \times 10^{-5}$) demostró ser una estrategia efectiva para mejorar tanto la eficiencia como la calidad del resultado final. Al transferir a L-BFGS desde un buen punto de convergencia en lugar de uno degradado por oscilaciones tardías de Adam, se obtuvo un mejor resultado en menos tiempo total de cómputo.

5. Resultados Cuantitativos

5.1 Configuración experimental final

Hiperparámetro	Valor	Descripción
k (número de onda)	$2\pi \approx 6.2832$	1 longitud de onda en el dominio — Fase 1 de validación
N_colloc	2,000	Puntos de colocación interiores
Puntos conocidos	5	$x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1.0$
hidden_dim	64	Neuronas por capa oculta
num_layers	5	Capas ocultas
n_epochs (máx)	15,000	Máximo de épocas Adam (con early stopping)
lr (Adam)	1×10^{-3}	Tasa de aprendizaje
lambda_phys	0.01	Peso de la pérdida física
Semilla	42	Reproducibilidad garantizada

5.2 Comparativa de resultados por experimento

Experimento	Configuración	Error L2	Estado
E1 — Configuración base	$\lambda=1.0$, hidden=32, 3,000 épocas	51.726%	✗

Experimento	Configuración	Error L2	Estado
E2 — Ajustes básicos	$\lambda=0.1$, hidden=64, 5,000 épocas	28.052%	✗
E3 — Con L-BFGS	$\lambda=0.1$ + L-BFGS	10.834%	✗
E4 — $k=\pi$ (asimétrico)	$\lambda=0.01$, $k=\pi$, 10,000 épocas	0.345%	✓
E5 — $k=2\pi$ sin puntos interm.	$\lambda=0.001$, $k=2\pi$, 15,000 épocas	10.940%	✗
E6 — $k=2\pi$ con puntos interm.	$\lambda=0.01$, 5 puntos, early stop+L-BFGS	0.002%	✓ ✓

El experimento E6 representa la configuración óptima que se utilizará como base para el notebook 02_helmholtz_2D.ipynb.

6. Próximos Pasos y Pendientes

6.1 Pendientes de definición con el director de tesis

Los siguientes puntos requieren decisión conjunta antes de iniciar el notebook 2D:

Punto	Descripción	Impacto en el proyecto
Valor de k para 2D	¿Cuántas longitudes de onda en el dominio? ($k \cdot L = 2\pi$, 10π , 20π ...)	Define complejidad computacional y aparición del speckle
Referencia física	Se propone láser de diodo rojo $\lambda = 638$ nm — puramente computacional	Justificación física del modelo sin experimento real
Tamaño del dominio 2D	¿Dominio cuadrado $[0,1]^2$ o con dimensiones físicas en μm ?	Determina adimensionalización y escala del problema
Benchmark FEM	Confirmar uso de FEniCSx como referencia open-source	Necesario para comparativa de velocidad (Speed-up Factor)
Arquitectura 2D	MLP estándar vs Fourier Feature Networks para speckle	Impacta directamente el error L2 a frecuencias altas

6.2 Plan de trabajo inmediato

Tarea	Descripción	Estado
Notebook 01 — 1D	Helmholtz 1D validado con error L2 = 0.002%	✓ Completado
Reunión con director	Definir k , dominio, y arquitectura para 2D	→ SOON Pendiente
Notebook 02 — 2D	Helmholtz 2D con LHS, campo complejo $E(x,y)$	→ SOON Pendiente
Notebook 03 — Speckle	Generación y análisis del patrón de speckle	→ SOON Pendiente
Notebook 04 — Benchmark	Comparativa PINN vs FEniCSx (Speed-up Factor)	→ SOON Pendiente

7. Preguntas para el Director de Tesis

Con base en el avance realizado, se proponen las siguientes preguntas concretas para orientar el diseño del modelo 2D:

- ¿La tesis debe simular un escenario físico específico de speckle o es suficiente una configuración computacional representativa?
- ¿Cuántas longitudes de onda debe contener el dominio para que el patrón de speckle sea observable y comparado con la literatura? (Propuesta: $k \cdot L = 20\pi$, equivalente a 10 longitudes de onda de un diodo rojo $\lambda = 638 \text{ nm}$)
- ¿Se aprueba el uso de FEniCSx como herramienta de referencia para el benchmark FEM, dado que es open-source y garantiza reproducibilidad?
- ¿Se considera pertinente explorar Fourier Feature Networks como extensión de la arquitectura MLP base para mejorar el manejo de altas frecuencias en el speckle?
- ¿El dominio bidimensional debe ser homogéneo $([0,1]^2)$ o se desea incorporar obstáculos o heterogeneidades en el medio?

8. Referencias

Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 378, 686–707.

Schoder, S., & Kraxberger, F. (2024). Feasibility study on solving the Helmholtz equation in 3D with PINNs. *arXiv preprint arXiv:2403.06623*.

Goodman, J. W. (2007). *Speckle Phenomena in Optics: Theory and Applications*. Roberts & Company Publishers.

Kingma, D. P., & Ba, J. (2014). Adam: A method for stochastic optimization. arXiv preprint arXiv:1412.6980.

Liu, D. C., & Nocedal, J. (1989). On the limited memory BFGS method for large scale optimization. *Mathematical Programming*, 45(1), 503–528.

Lu, L., Meng, X., Mao, Z., & Karniadakis, G. E. (2021). DeepXDE: A deep learning library for solving differential equations. *SIAM Review*, 63(1), 208–228.

Documento generado el 27 de febrero de 2026 — Villahermosa, Tabasco, México