

SOLUCIÓN DE ECUACIONES DIFERENCIALES USANDO REDES DE KOLMOGOROV-
ARNOLD INFORMADAS POR LA FÍSICA

Gregorio Pérez Bernal
gperezb1@eafit.edu.co

Proyecto Avanzado I

Tutor:
Nicolás Guarín Zapata
Área de Territorios y Ciudades, Universidad EAFIT
nguarinz@eafit.edu.co

Pregrado en Ingeniería Física
Escuela de Ciencias Aplicadas e Ingeniería
Universidad EAFIT
Medellín, Colombia
2024-2

TABLA DE CONTENIDOS

1.	PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.....	3
2.	OBJETIVOS.....	4
2.1.	OBJETIVO GENERAL.....	4
2.2.	OBJETIVOS ESPECÍFICOS	4
3.	ANTECEDENTES	4
4.	JUSTIFICACIÓN.....	5
5.	ALCANCE	5
6.	METODOLOGÍA	6
7.	CRONOGRAMA DE ACTIVIDADES.....	6
8.	PRESUPUESTO	7
9.	PROPIEDAD INTELECTUAL	7
10.	REFERENCIAS.....	8

1. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

Estudiar ecuaciones diferenciales es crucial en física porque permiten modelar y predecir el comportamiento de sistemas dinámicos en diversas áreas en las cuales se puede modelar el cambio de una función de una manera más simple que la misma función [1]. La ecuación de Helmholtz es una ecuación diferencial estudiada en diferentes ámbitos de la física, tales como, la sismología, el electromagnetismo e inclusive la mecánica cuántica [2]. Considerando que la gran mayoría de ecuaciones diferenciales no pueden solucionarse analíticamente, existe una necesidad de estudiar la manera de solucionar estos problemas de manera numérica [1].

Además de los métodos numéricos clásicos, en 2019 se propuso una nueva manera de resolver ecuaciones diferenciales, las redes neuronales informadas por la física [3]. Esta estructura permite aproximar la solución de una ecuación diferencial parcial usando un perceptrón multicapa (MLP¹, por sus siglas en inglés) con una función de costo a minimizar basada en leyes físicas, tales como ecuaciones diferenciales y sus formas variacionales.

En 2024 se introdujeron las redes de Kolmogorov-Arnold (KAN² por sus siglas en inglés), redes que ofrecen una alternativa a los MLP, brindando más interpretabilidad, y para ciertos problemas, más exactitud a la hora de aprender funciones [4]. Dichas redes funcionan gracias al teorema de representación de Kolmogorov-Arnold, que establece que cualquier función continua multivariable puede ser representada como una suma de funciones continuas de una variable. De ahí, es natural hacerse la pregunta: ¿pueden las redes de Kolmogorov-Arnold informadas por la física (PIKAN³, por sus siglas en inglés) mejorar la aproximación numérica de la ecuación de Helmholtz en una dimensión?

Este proyecto se enfocará en implementar una PIKAN con ayuda de herramientas computacionales y paquetes, con el fin de entrenarla con soluciones de la ecuación de Helmholtz y con una función de costo basada en leyes físicas.

¹ Multilayer Perceptron

² Kolmogorov-Arnold Networks

³ Physics Informed Kolmogorov-Arnold Networks

2. OBJETIVOS

2.1. OBJETIVO GENERAL

Aproximar numéricamente la ecuación de Helmholtz en una dimensión usando redes de Kolmogorov-Arnold informadas por la física.

2.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Modelar matemáticamente la forma variacional de la ecuación de Helmholtz, y los datos de entrenamiento de la red.
- Implementar una red de Kolmogorov-Arnold con la función de costo informada por la física para resolver el problema numéricamente.
- Mejorar el rendimiento de la red mediante la variación de los hiperparámetros de esta, mediante una métrica de rendimiento, tal como el error cuadrático medio.

3. ANTECEDENTES

Desde que se introdujeron las PINN, se han realizado diferentes trabajos en torno a la solución de ecuaciones diferenciales. Aguilar [5] realizó experimentos aproximando una solución de la ecuación de Poisson en una dimensión, usando Redes Neuronales Informadas por la Física (PINNS⁴, por sus siglas en inglés) y PINNS variacionales, en las cuales se tomó como función de costo la misma ecuación de Poisson y su forma variacional, recordando que ambos problemas son equivalentes bajo algunas hipótesis de regularidad.

En el artículo en el que se presentan las KAN se muestra que, para la solución de ecuaciones diferenciales parciales, una KAN de 2 capas de 10 neuronas de anchura es 100 veces más precisa que un MLP de 4 capas de ancho 100 (10^{-7} frente a 10^{-5} de error cuadrático medio) y 100 veces más eficiente en parámetros [4]. Sin embargo, se hace la salvedad de que las KAN son considerablemente más lentas que un MLP en su tiempo de entrenamiento a causa de su naturaleza no lineal.

En [6] se presentan formalmente las PIKAN, y se muestra su habilidad para resolver ecuaciones diferenciales parciales. Un aporte importante de esta publicación es que demuestra que las PIKAN son más precisas que un MLP para aprender funciones con no linealidades considerables. Al aplicar diferentes variaciones de la KAN para resolver la ecuación de Helmholtz en 2D y compararlas con un MLP, se obtuvieron mejoras en el error

⁴ Physically Informed Neural Networks

cuadrático medio de la aproximación generada con respecto a una solución conocida en las implementaciones las KAN y sus variaciones [7]. En este mismo artículo se describen las PIKAN para resolver problemas altamente no lineales, tales como los problemas de fluidos, y se muestra que las KAN presentan una alternativa robusta al MLP.

4. JUSTIFICACIÓN

La resolución aproximada de ecuaciones diferenciales es de gran interés tanto en el ámbito académico como industrial. Modelar y resolver eficientemente estas ecuaciones permite una comprensión más profunda de fenómenos físicos complejos y su aplicación práctica en problemas de ingeniería y ciencia. La utilización de redes de Kolmogorov-Arnold informadas por la física ofrece una solución innovadora que puede superar ciertas limitaciones de los métodos numéricos tradicionales, tales como las no linealidades y las oscilaciones abruptas, proporcionando soluciones más precisas y eficientes [4].

Para abordar este problema, es esencial un conocimiento sólido en ecuaciones diferenciales parciales, métodos numéricos, redes neuronales y física computacional. Estos conocimientos giran en torno a la formación esencial de un ingeniero físico [8], mezclando los componentes teóricos y prácticos que enmarcan el mundo de los métodos de aproximación.

5. ALCANCE

El presente proyecto se enfoca en la aproximación numérica de la ecuación de Helmholtz en una dimensión utilizando PIKANS. Se cubrirá la modelación matemática de la forma de la ecuación, la implementación de la red y la optimización de los hiperparámetros mediante métodos clásicos. Este enfoque permitirá obtener soluciones precisas y eficientes, aprovechando las ventajas de las redes de KAN en la integración de principios físicos y matemáticos.

El proyecto no abarcará la resolución de la ecuación de Helmholtz en dimensiones superiores ni la comparación exhaustiva con otros métodos numéricos, centrándose exclusivamente en una dimensión para simplificar el análisis. Estas delimitaciones permiten un enfoque detallado y manejable, asegurando un desarrollo riguroso dentro del marco temporal y los recursos disponibles.

6. METODOLOGÍA

El proyecto se desarrollará en cuatro fases principales: Revisión y apropiación matemática, formulación computacional del problema, obtención y análisis de resultados, y documentación. A continuación, se describen detalladamente las actividades y etapas globales del proyecto, de acuerdo con el calendario de trabajo.

Revisión y apropiación matemática: Esta fase incluye la revisión de la bibliografía sobre KAN, PINN y PIKAN, así como el estudio detallado de la ecuación de Helmholtz. Se usarán revistas académicas, artículos y libros con el fin de culminar esta etapa.

Formulación computacional del problema: Durante esta fase, se seleccionará e implementará una función de pérdida específica para el problema. Se establecerá la forma variacional de la ecuación de Helmholtz y se implementará una KAN en Python utilizando paquetes adecuados. Dicha red será entrenada con el residual de la ecuación, es decir, la diferencia entre el lado izquierdo y el lado derecho de una ecuación cuando se sustituye una solución aproximada en ella.

Obtención y análisis de resultados: En esta etapa se montará una red para resolver el problema específico de la ecuación de Helmholtz, optimizando los hiperparámetros de la red (número de capas, y número de neuronas por capa) y validando los resultados con métricas apropiadas, tales como el error cuadrático medio. Finalmente, se analizarán y discutirán los resultados obtenidos.

Documentación: La fase de documentación se llevará a cabo a lo largo de todo el proyecto, con entregas intermedias programadas y la redacción del informe final. Se incluirá también la documentación en un repositorio en GitHub para garantizar la accesibilidad y reproducibilidad del trabajo realizado.

7. CRONOGRAMA DE ACTIVIDADES

Según la información presentada en la metodología, se presenta un cronograma del proyecto, el cual sirve como insumo para la organización y correcto seguimiento del proyecto. El cronograma se puede observar en la tabla 1.

Actividad	Estado	Semana																	
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Revisión y apropiación matemática	60%																		
Revisión de bibliografía de las KAN, PINN y VPINN	90%																		
Estudio de la ecuación de Helmholtz	100%																		
Realización del anteproyecto	90%																		
Formulación computacional del problema	15%																		
Selección e implementación de una función de pérdida	25%																		
Establecer e implementar formas de la ecuación	100%																		
Implementación del KAN en Python	45%																		
Obtención y análisis de resultados	0%																		
Montaje de una red para resolver el problema	0%																		
Optimización de hiperparámetros para la red	0%																		
Validación de resultados con métricas apropiadas	0%																		
Análisis y discusión de resultados	0%																		
Documentación	20%																		
Entregas intermedias	20%																		
Redacción informe final	0%																		
Documentación en repositorios	15%																		

Tabla 1: Cronograma del proyecto

8. PRESUPUESTO

En la tabla 2 se puede observar un presupuesto estimado del proyecto, considerando su extensión y la intensidad horaria propuesta para un curso de estilo proyecto según el reglamento de la Universidad EAFIT [9]. Cabe mencionar que estos valores constituyen costos no desembolsables y no representan recursos frescos.

Presupuesto del proyecto			
Ítem	Costo Unitario	Cantidad	Costo Total
Hora tutor	\$ 259,804.14	18	\$ 4,676,474.57
Hora estudiante	\$ 56,401.52	192	\$ 10,829,092.15
Computador	\$ 3,500,000.00	1	\$ 3,500,000.00
Total:			\$ 19,005,566.72

Tabla 2: Presupuesto del proyecto

9. PROPIEDAD INTELECTUAL

Los productos de este proyecto se publicarán de acuerdo con los lineamientos de ciencia abierta [10]. Esto está alineado con lo que se propuso en el proyecto interno *Modelación directa e inversa de propagación de ondas combinando enfoques clásicos y de aprendizaje automático* del cual este proyecto avanzado hace parte.

10. REFERENCIAS

- [1] G. Evans, J. Blackledge y P. Yardley, *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, Springer Undergraduate Mathematics Series. London, UK: Springer-Verlag, 1999, doi: 10.1007/978-1-4471-0377-6.
- [2] H.T. Stoppels, *Solving the Helmholtz Equation Numerically*, Master Project Mathematics, Faculty of Science and Engineering, January 2018.
- [3] M. Raissi, P. Perdikaris, y G. E. Karniadakis, *Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations*, Journal of Computational Physics, vol. 378, pp. 686-707, Nov. 2018, doi: 10.1016/j.jcp.2018.10.045.
- [4] Z. Liu, Y. Wang, S. Vaidya, F. Ruehle, J. Halverson, M. Soljačić, T. Y. Hou, y M. Tegmark, *Kolmogorov-Arnold Networks*, arXiv preprint arXiv:2404.19756v2 [cs.LG], 2 May 2024.
- [5] J. P. Aguilar Calle, *Redes Neuronales Informadas por la Física para la Solución de Ecuaciones Diferenciales*, Tesis de Grado, Ingeniería Física, Universidad EAFIT, Medellín, Colombia, 2024.
- [6] Y. Wang, J. Sun, J. Bai, C. Anitescu, M. S. Eshaghi, X. Zhuang, T. Rabczuk, y Y. Liu, *"Kolmogorov-Arnold-Informed Neural Network: A Physics-Informed Deep Learning Framework for Solving PDEs Based on Kolmogorov-Arnold Networks,"* arXiv preprint arXiv:2406.19756v1 [cs.LG], Jun. 2024, doi: 10.2139/ssrn.4868150.
- [7] K. Shukla, J. D. Toscano, Z. Wang, Z. Zou, and G. E. Karniadakis, *"A comprehensive and FAIR comparison between MLP and KAN representations for differential equations and operator networks,"* Preprint submitted to Elsevier, Jun. 2024.

- [8] U. EAFIT, Generalidades, pregrado en ingeniería física, EAFIT. Disponible:
<https://www.eafit.edu.co/programas-academicos/pregrados/ingenieria-fisica/Paginas/inicio.aspx>.
- [9] Consejo Académico de la Universidad EAFIT, Reglamento Académico de los Programas de Pregrado, April 2014
- [10] MINISTERIO DE CIENCIA TECNOLOGÍA E INNOVACIÓN – MINCIENCIAS, «Política Nacional de Ciencia Abierta». 27 de mayo de 2022. Accedido: 15 de febrero de 2024.
[En línea]. Disponible en:
https://minciencias.gov.co/sites/default/files/ckeditor_files/Documento%20consulta%20p%C3%BAblica%20