SOLUCIÓN DE PROBLEMAS INVERSOS USANDO REDES NEURONALES INFORMADAS POR LA FÍSICA

Gregorio Pérez-Bernal
gperezb1@eafit.edu.co

Proyecto Avanzado II

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
2025-1

TABLA DE CONTENIDOS

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]. Es posible abordar un problema de ecuaciones desde dos enfoques generales: el directo y el inverso. El enfoque inverso se centra en identificar las causas subyacentes a partir de un conjunto de observaciones, es decir, encontrar el valor de los parámetros asociados a una ecuación diferencial.

La ecuación de Poisson es una ecuación diferencial estudiada en diferentes ámbitos de la física, tales como el electromagnetismo, mecánica de fluidos e inclusive aparece en gravitación y relatividad general [2]. Además de esto es una ecuación clave en el estudio de métodos numéricos, pues, al ser una ecuación interpretable pero simple, se presta como objeto de estudio introductorio para el estudio de técnicas de aproximación [3]. Considerando que la gran mayoría de ecuaciones diferenciales no pueden solucionarse analíticamente, existe una necesidad de estudiar la manera de solucionar estos problemas inversos 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 [4]. Esta estructura permite solucionar problemas inversos usando un perceptrón multicapa (MLP[1], por sus siglas en inglés) con una función de costo a minimizar basada en leyes físicas, tales como los residuales de las ecuaciones diferenciales.

En 2024 se introdujeron las redes de Kolmogorov-Arnold (KAN[2] 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 [5]. 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 [6].

De ahí, es natural hacerse la pregunta: **¿Pueden las redes de Kolmogorov-Arnold informadas por la física (PIKAN[3], por sus siglas en inglés) mejorar la aproximación**

---

[1] Multilayer Perceptron
[2] Kolmogorov-Arnold Networks
[3] Physics Informed Kolmogorov-Arnold Networks

numérica del problema inverso de Poisson en comparación a las PINNs, considerando métricas como el error de la aproximación y el tiempo de convergencia?

2. OBJETIVOS

2.1. OBJETIVO GENERAL

Comparar el desempeño de una red de Kolmogorov-Arnold informada por la física y una red neuronal informada por la física para resolver el problema inverso de la ecuación de Poisson.

2.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Implementar redes neuronales con una función de costo informada por la física para resolver problemas inversos.
- Evaluar la capacidad de generalización de la red al introducir datos de entrada con ruido, midiendo su desempeño en términos del error relativo en comparación con una solución conocida.
- Mejorar el rendimiento de la red mediante la variación de los hiperparámetros de esta.

3. ANTECEDENTES

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 [5]. 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 [7], los creadores de las KAN las presentan formalmente para la resolución de problemas inversos, demostrando un error de aproximación inferior al de las PINN, especialmente en ecuaciones con no linealidades presentes. Además, introducen las PIKAN para abordar sistemas de alta complejidad, como los problemas de dinámica de fluidos, destacando a las KAN como una alternativa a los MLP.

El sesgo espectral es la tendencia de los MLP a aprender primero componentes de baja frecuencia mientras tienen dificultades para representar funciones con variaciones de alta frecuencia. Esto limita su capacidad para resolver problemas que requieren una alta resolución en el dominio de Fourier. Según [8], las KAN superan este sesgo al descomponer la función objetivo en una combinación de funciones más simples, lo que permite capturar mejor las altas frecuencias y mejorar la precisión de la aproximación en problemas con estructuras complejas.

4. JUSTIFICACIÓN

La resolución aproximada de ecuaciones diferenciales es de gran interés tanto en el ámbito académico como industrial. Modelar y resolver eficientemente estos problemas inversos 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 [9], mezclando los componentes teóricos y prácticos que enmarcan el mundo de los métodos de aproximación. De igual manera, los investigadores han realizado investigaciones en torno a las PIKAN para solucionar problemas directos [10].

5. ALCANCE

El presente proyecto se enfoca en la aproximación numérica del problema inverso de Poisson en varias dimensión utilizando PIKANS y PINNs. Se cubrirá la modelación matemática de la forma de la ecuación, la implementación de la red y la optimización de los hiperparámetros. Este enfoque permitirá obtener soluciones precisas y eficientes, aprovechando las ventajas de las KAN y las PINNs en la integración de principios físicos y matemáticos.

El proyecto no abarcará 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 las técnicas clásicas para resolver problemas usando KAN, PINN y PIKAN, así como el estudio detallado el problema de Poisson. 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 y se implementará una en Python utilizando paquetes adecuados. Dicha red será entrenada con una combinación del residual de la ecuación, datos en la frontera y datos reales de la solución

Obtención y análisis de resultados: En esta etapa se montará una red para resolver el problema inverso de Poisson, optimizando los hiperparámetros de la red (número de capaz, 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 para solucionar problemas inversos	*90%*																		
Estudio de la ecuación de Poisson	*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 y PINN inversas 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%*																		
Comparación de ambos métodos propuestos	*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 [11]. 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 [12]. 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] R. Gharechahi, J. Koohbor, and M. Nouri-Zonoz, "General relativistic analogs of Poisson's equation and gravitational binding energy," Physical Review D, vol. 99, no. 8, p. 084046, Apr. 2019. Available: https://arxiv.org/abs/1812.07373

[3] W. Arendt and K. Urban, Partial Differential Equations: An Introduction to Analytical and Numerical Methods, Graduate Texts in Mathematics, vol. 294. Springer, 2023. Available: https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-031-13379-4

[4] 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.

[5] 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.

[6] J. Schmidt-Hieber, "The Kolmogorov-Arnold Representation Theorem Revisited," arXiv preprint arXiv:2007.15884, 2020. Available: https://arxiv.org/abs/2007.15884

[7] 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.

[8] Y. Wang, J. W. Siegel, Z. Liu, y T. Y. Hou, "On the expressiveness and spectral bias of KANs," arXiv preprint arXiv:2410.01803, 2024. [En línea]. Disponible en: https://arxiv.org/abs/2410.01803.

[9] U. EAFIT, Generalidades, pregrado en ingeniería física, EAFIT. Disponible: https://www.eafit.edu.co/programas-academicos/pregrados/ingenieria-fisica/Paginas/inicio.aspx.

[10] G. Pérez Bernal and N. Guarín-Zapata, Kolmogorov-Arnold Networks: A rebirth of artificial intelligence towards solving differential equations? Research Report, Universidad EAFIT, Medellín, Colombia, Nov. 2024.

[11] Consejo Académico de la Universidad EAFIT, Reglamento Académico de los Programas de Pregrado, April 2014

[12] 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