

Optimización en el descubrimiento del comportamiento de materiales mediante Redes Neuronales Guiadas por Física con Variables Internas.

Rubén Muñoz-Sierra^{1,2}, Jacobo Ayensa-Jiménez¹, Manuel Doblaré^{1,2}

¹TME Lab

Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón (I3A)
Universidad de Zaragoza, Mariano Esquillor s/n, 50018, Zaragoza, Spain.
Tel. +34-976762707, e-mail: 739163@unizar.es

²Instituto de Investigación Sanitaria de Aragón (IISA)
Avda. San Juan Bosco, 13, 50009, Zaragoza, Spain.

Resumen

Este estudio combina algoritmos de aprendizaje automático con principios físicos para descubrir el comportamiento constitutivo en distintos materiales, utilizando métodos para reducir el coste computacional en el entrenamiento. Dichos métodos incluyen técnicas de *embedding*, que permiten aprender una representación de los datos experimentales en un espacio latente reducido, y técnicas de *transfer learning* para, una vez aprendido dicho espacio latente, obtener el comportamiento de un nuevo material de forma más rápida.

Introducción

Las Redes Neuronales Guiadas por la Física con Variables Internas (PGNNIV) [1, 2] son una familia de modelos del paradigma del *Physics Informed Machine Learning* que, además de obtener predicciones físicamente consistentes, tienen la capacidad de descubrir el comportamiento interno de un sistema únicamente a partir de datos observables. Esto es posible debido a que incluyen las Leyes Universales tanto en los términos de penalización, lo que reduce el espacio de soluciones posibles a las que son consistentes con la física; como en la arquitectura de la red, permitiendo interpretar algunas neuronas de la red como variables internas. Así, se pueden obtener las ecuaciones de estado interno como proceso del entrenamiento sin explicitar la estructura particular del modelo.

No obstante, estas presentan una principal limitación: la componente predictiva opera a nivel de píxel, lo que complica su escalabilidad para imágenes de alta resolución o dimensiones superiores. Para solucionar este problema, se propone una representación de orden reducido de la red predictiva del modelo, capaz de codificar en un espacio latente la información del sistema experimental del que se han obtenido los datos. Así, se obtiene una representación de orden

inferior manteniendo la capacidad explicativa del modelo, y que es escalable sin aumentar significativamente el coste computacional.

Finalmente, es importante señalar que el objetivo principal de las PGNNIV es descubrir comportamientos constitutivos. Por ello, una pregunta fundamental es si es posible aprovechar los conocimientos ya adquiridos sobre un sistema para aplicarlo a un material diferente, sin necesidad de afrontar el problema desde cero. Una vez aprendido el espacio latente reducido en el que se codifica el sistema experimental, se van a aprovechar las ventajas del *transfer learning*, aplicando el modelo pre-entrenado a nuevos datos del mismo experimento con un nuevo material y ahorrando así recursos computacionales.

Metodología

Embedding

Sean $x \mapsto y$ una aplicación que empareja los datos en pares *input* y *output*, que en las PGNNIV se abordan utilizando una red neuronal. Nuestro objetivo es representar esta relación en un espacio latente de dimensión reducida

$$z = \phi(x), y = \psi(z)$$

donde $\phi : \Omega \rightarrow (\mathbb{R}^c)^n$ y $\psi : (\mathbb{R}^c)^n \rightarrow (\mathbb{R}^c)^N$, con $n \ll N$. Dependiendo de la estructura de ϕ y de ψ , hay diferentes enfoques de como llevar a cabo este problema. La idea más directa es asumir *a priori* una estructura específica para una base reducida y así aprender la estructura de ϕ , aunque también existen enfoques que se centran en construir la representación latente a partir de datos empíricos *a posteriori*. Como método *a priori*, el más ampliamente utilizado es la descomposición espectral en series de Fourier, en el que se expresa

una función como suma de funciones sinusoidales. Como métodos *a posteriori*, los utilizados son dos: por un lado, la *Proper Orthogonal Decomposition* (POD) es un enfoque que se centra en una elección particular de funciones que actúan como base, construidas mediante la descomposición en valores singulares de los datos recogidos en una matriz. Por otro lado, los *autoencoders* son un tipo de red neuronal en cuyo entrenamiento los datos de entrada y salida son los mismos, por que aproximan el operador identidad y aprenden una representación compacta de los datos, lo que permite aproximaciones flexibles y no lineales en los datos.

Transfer Learning

Una vez entrenada una PGNNIV para un material utilizando suponemos que hemos aprendido correctamente la representación reducida en el espacio latente para un sistema experimental. De esta forma, no será necesario volver a entrenar el *encoder* cuando se trata de aprender el comportamiento de un nuevo material. Así, el *encoder* solo se tendrá que entrenar una vez para un sistema experimental completo, y solo hay que reentrenar el *decoder* y la red explicativa para un nuevo material, que es de tamaño mucho menor y por tanto menos exigente desde el punto de vista computacional.

Resultados

Para evaluar esta metodología vamos a utilizar la ecuación no lineal del calor

$$\nabla \cdot (K(u) \cdot \nabla u) = f$$

En el primer material será $K(u) = u(1 - u)$ y en el segundo material será $K(u) = \sigma(u) = (1 + e^{-x})^{-1}$.

En la Tabla 1 se comparan los resultados para los diferentes modelos con $N = 1000$ datos y un espacio latente de dimensión 10. En la Tabla 2 se comparan los resultados del *transfer learning* para los dos materiales.

Tabla 1. Diferentes *embeddings* en la red predictiva.

Base reducida	N_{param}	t (min)	E(K)
<i>Baseline</i>	4501	264.38	1.91×10^{-1}
Fourier	2181	182.59	2.30×10^{-2}

POD	2181	254.07	3.27×10^{-2}
Autoencoder	7161	162.90	3.15×10^{-2}

Tabla 2. Comparación de modelos de *transfer learning*

Entrenamiento	t (min)	E(K)
<i>Baseline</i>	21.89	2.28×10^{-2}
Fine tuning	21.66	1.76×10^{-2}
Transfer learning	16.18	3.21×10^{-2}

Conclusiones

Las PGNNIV permiten descubrir la ley de comportamiento interno de un material a partir de datos observables. Sin embargo, uno de sus principales problemas es su escalabilidad. Es por esto, que en esta metodología se han propuesto dos métodos de optimización. Por un lado, diferentes técnicas de *embedding*, aprendiendo en vez de la solución en el espacio original, un espacio latente reducido, pero que posteriormente se proyecta en el espacio de soluciones. Por otro lado, la utilización de técnicas de *transfer learning* mediante las cuales, una vez se ha aprendido el sistema experimental con los datos de un material, se utilice parte del modelo pre-entrenado para que un segundo entrenamiento sea mucho más eficiente.

REFERENCIAS

- [1]. MUÑOZ-SIERRA, R., AYENSA-JIMÉNEZ, J. and DOBLARÉ, M. *On the application of Physically-Guided Neural Networks with Internal Variables to Continuum Problems*. Mechanics of Materials, 2025, vol. 205, 105317.
- [2]. AYENSA-JIMÉNEZ, J., ORERA-ECHEVERRÍA, J. and DOBLARÉ, M. *Predicting and explaining nonlinear material response using deep physically guided neural networks with internal variables*. Mathematics and Mechanics of Solids, 2025, vol. 30, no. 2, pp. 573–598.
- [3]. JIA, W., SUN, M., LIAN, J. *et al.* Feature dimensionality reduction: a review. *Complex Intell. Syst.* 8, 2663–2693 (2022).