

UNIVERSIDAD SAN FRANCISCO DE QUITO USFQ

Colegio de Posgrados

**Aplicación de Redes Neuronales Informadas por Física (PINNs) en el
Método de Conjuntos de Nivel**

Proyecto de Titulación

Diego Fernando Heredia Díaz

Israel Pineda, Ph.D.

Director de Trabajo de Titulación

Trabajo de titulación de posgrado presentado como requisito para la obtención del título de Magíster
en Ciencia de Datos

Quito, 02 de diciembre de 2024

UNIVERSIDAD SAN FRANCISCO DE QUITO USFQ

COLEGIO DE POSGRADOS

HOJA DE APROBACIÓN DE TRABAJO DE TITULACIÓN

Aplicación de Redes Neuronales Informadas por Física (PINNs) en el
Método de Conjuntos de Nivel

Diego Fernando Heredia Díaz

Nombre del Director del Programa:	Felipe Grijalva
Título académico:	Ph.D. en Ingeniería Eléctrica
Director del programa de:	Ciencia de Datos
Nombre del Decano del colegio Académico:	Eduardo Alba
Título académico:	Doctor en Ciencias Matemáticas
Decano del Colegio:	Ciencias e Ingenierías
Nombre del Decano del Colegio de Posgrados:	Dario Niebieskikwiat
Título académico:	Doctor en Física

Quito, diciembre 2024

© DERECHOS DE AUTOR

Por medio del presente documento certifico que he leído todas las Políticas y Manuales de la Universidad San Francisco de Quito USFQ, incluyendo la Política de Propiedad Intelectual USFQ, y estoy de acuerdo con su contenido, por lo que los derechos de propiedad intelectual del presente trabajo quedan sujetos a lo dispuesto en esas Políticas.

Asimismo, autorizo a la USFQ para que realice la digitalización y publicación de este trabajo en el repositorio virtual, de conformidad a lo dispuesto en la Ley Orgánica de Educación Superior del Ecuador.

Nombre del estudiante: Diego Fernando Heredia Díaz

Código de estudiante: 00338854

C.I.: 1727138313

Lugar y fecha: Quito, 02 de diciembre de 2024

ACLARACIÓN PARA PUBLICACIÓN

Nota: El presente trabajo, en su totalidad o cualquiera de sus partes, no debe ser considerado como una publicación, incluso a pesar de estar disponible sin restricciones a través de un repositorio institucional. Esta declaración se alinea con las prácticas y recomendaciones presentadas por el Committee on Publication Ethics COPE descritas por Barbour et al. (2017) Discussion document on best practice for issues around theses publishing, disponible en <http://bit.ly/COPETheses>.

UNPUBLISHED DOCUMENT

Note: The following graduation project is available through Universidad San Francisco de Quito USFQ institutional repository. Nonetheless, this project – in whole or in part – should not be considered a publication. This statement follows the recommendations presented by the Committee on Publication Ethics COPE described by Barbour et al. (2017) Discussion document on best practice for issues around theses publishing available on <http://bit.ly/COPETheses>.

DEDICATORIA

A mis padres Ximena y Fernando

A mi hermana Saraí

AGRADECIMIENTOS

A la Universidad San Francisco de Quito y al Colegio de Ciencias e Ingenierías por la formación académica a lo largo del programa de Maestría en Ciencia de Datos.

A mis profesores por haber transmitido sus conocimientos y experiencias. En especial, agradezco a mi director del trabajo de titulación, Dr. Israel Pineda, por el tiempo y apoyo brindado en el desarrollo del proyecto.

RESUMEN

En el presente trabajo se implementan redes neuronales informadas por física (PINNs) para la resolución de ecuaciones diferenciales obtenidas de la aplicación del método de conjuntos de nivel en problemas de evolución de interfaces. Estos problemas son la rotación del círculo, rectángulo y disco de Zalesak a través de un punto en el plano y la deformación de un círculo en un vórtice. Se realizan comparaciones con distintas configuraciones de los parámetros de las PINNs variando la cantidad de capas, neuronas, función de activación de cada neurona, puntos de colocación y número de iteraciones de entrenamiento. Para estas comparaciones se utilizan las métricas L_1 , IoU y porcentaje de pérdida de área. Se concluyó que para estos problemas, la resolución mediante PINNs con redes neuronales completamente conectadas de 5 capas y 200 neuronas, donde se utilizan 10000 puntos de colocación, generalmente obtienen métricas robustas después de 500000 iteraciones de entrenamiento; además, la

función de activación sigmoide tiene un comportamiento más estable que la función tangente hiperbólica. Esta configuración puede servir como punto de partida para investigaciones futuras sobre problemas del método de conjuntos de nivel.

Palabras clave: Método de Conjuntos de Nivel, Curvas de Nivel, Redes Neuronales, Redes Neuronales Informadas por Física, PINN, Funciones de Distancia con Signo, Ecuaciones Diferenciales

ABSTRACT

In the present work, physics informed neural networks (PINNs) are implemented to solve differential equations obtained from the application of the level set method in interface evolution problems. These problems are the rotation of the circle, rectangle and Zalesak disk about a point in the plane and the deformation of a circle into a vortex. Comparisons are made with different configurations of the PINNs parameters by varying the number of layers, neurons, activation function of each neuron, collocation points and number of training iterations. For these comparisons, the metrics L_1 , IoU and area loss percentage are used. It was concluded that for these problems, the resolution by PINNs with fully connected neural networks of 5 layers and 200 neurons, where 10000 collocation points are used, generally obtain robust metrics after 500000 training iterations; in addition, the sigmoid activation function has a more stable behavior than the hyperbolic tangent function. This setup can serve as a starting point for future research on level set method problems.

Key words: Level Set Method, Level Curves, Neural Networks, Physics Informed Neural Networks, PINN, Signed Distance Functions, Differential Equations

TABLA DE CONTENIDO

I.	Introducción	13
II.	Metodología	14
II-A.	Método de Conjuntos de Nivel	14
II-B.	Redes Neuronales Informadas por Física (PINNs)	15
II-C.	Experimentos	16
II-D.	Métricas de Comparación	16
II-D1.	Métrica L_1	16
II-D2.	Intersection Over Union	16
II-D3.	Porcentaje de pérdida de área	16
III.	Resultados	17
III-A.	Rotación del círculo	17
III-B.	Rotación del rectángulo	18
III-C.	Rotación del disco de Zalesak	19
III-D.	Deformación del círculo en vórtice	20
III-E.	Mejores modelos	21
IV.	Conclusiones y Recomendaciones	21
	Referencias	23

ÍNDICE DE TABLAS

I.	Configuraciones de los mejores modelos de cada problema y métricas L_1 , IoU y porcentaje de pérdida de área	22
----	--	----

ÍNDICE DE FIGURAS

1.	Curvas de nivel de las funciones de distancia con signo para el círculo, rectángulo y el Disco de Zalesak. La interfaz de color negro representa la curva de nivel 0.	15
2.	Diagrama esquemático de la PINN para resolver la ecuación del método de conjuntos de nivel.	17
3.	Valores de las métricas L_1 , IoU y porcentaje de pérdida de área de la interfaz teórica en el tiempo $t = 1$, en comparación con la interfaz predicha por cada modelo en $t = 1$ según el número de iteraciones utilizadas en el entrenamiento de cada modelo. Se utilizan $100 \times 100 = 10000$ puntos de colocación. El problema evaluado es la rotación del círculo.	18
4.	Comparación de la interfaz teórica en $t = 1$ con la interfaz predicha por el mejor modelo para el problema de la rotación del círculo. La línea punteada de color negro corresponde a la interfaz teórica y la línea sólida de color azul a la interfaz predicha.	18
5.	Porcentaje de pérdida de área de la interfaz teórica a través del tiempo, utilizando el mejor modelo para el problema de la rotación del círculo.	18
6.	Valores de las métricas L_1 , IoU y porcentaje de pérdida de área de la interfaz teórica en el tiempo $t = 1$, en comparación con la interfaz predicha por cada modelo en $t = 1$ según el número de iteraciones utilizadas en el entrenamiento de cada modelo. Se utilizan $100 \times 100 = 10000$ puntos de colocación. El problema evaluado es la rotación del rectángulo.	19
7.	Comparación de la interfaz teórica en $t = 1$ con la interfaz predicha por el mejor modelo para el problema de la rotación del rectángulo. La línea punteada de color negro corresponde a la interfaz teórica y la línea sólida de color azul a la interfaz predicha.	19
8.	Porcentaje de pérdida de área de la interfaz teórica a través del tiempo, utilizando el mejor modelo para el problema de la rotación del rectángulo.	19
9.	Valores de las métricas L_1 , IoU y porcentaje de pérdida de área de la interfaz teórica en el tiempo $t = 1$, en comparación con la interfaz predicha por cada modelo en $t = 1$ según el número de iteraciones utilizadas en el entrenamiento de cada modelo. Se utilizan $80 \times 80 = 6400$ puntos de colocación. El problema evaluado es la rotación del Disco de Zalesak.	20
10.	Comparación de la interfaz teórica en $t = 1$ con la interfaz predicha por el mejor modelo para el problema de la rotación del Disco de Zalesak. La línea punteada de color negro corresponde a la interfaz teórica y la línea sólida de color azul a la interfaz predicha.	20
11.	Porcentaje de pérdida de área de la interfaz teórica a través del tiempo, utilizando el mejor modelo para el problema de la rotación del Disco de Zalesak.	20
12.	Valores de las métricas L_1 , IoU y porcentaje de pérdida de área de la interfaz teórica en el tiempo $t = 1$, en comparación con la interfaz predicha por cada modelo en $t = 1$ según el número de iteraciones utilizadas en el entrenamiento de cada modelo. Se utilizan $80 \times 80 = 6400$ puntos de colocación. El problema evaluado es la deformación del círculo en un vórtice.	21
13.	Comparación de la interfaz teórica en $t = 1$ con la interfaz predicha por el mejor modelo para el problema de la deformación del círculo en un vórtice. La línea punteada de color negro corresponde a la interfaz teórica y la línea sólida de color azul a la interfaz predicha.	21
14.	Porcentaje de pérdida de área de la interfaz teórica a través del tiempo, utilizando el mejor modelo para el problema de la deformación del círculo en un vórtice.	21
15.	Evolución de la función de nivel y curvas de nivel a través del tiempo, utilizando el mejor modelo para el problema de la rotación del círculo. La línea sólida de color negro representa la curva de nivel 0.	22

16. Evolución de la función de nivel y curvas de nivel a través del tiempo, utilizando el mejor modelo para el problema de la rotación del rectángulo. La línea sólida de color negro representa la curva de nivel 0. 22
17. Evolución de la función de nivel y curvas de nivel a través del tiempo, utilizando el mejor modelo para el problema de la rotación del Disco de Zalesak. La línea sólida de color negro representa la curva de nivel 0. 22
18. Evolución de la función de nivel y curvas de nivel a través del tiempo, utilizando el mejor modelo para el problema de la deformación del círculo en un vórtice. La línea sólida de color negro representa la curva de nivel 0. 23

Aplicación de Redes Neuronales Informadas por Física (PINNs) en el Método de Conjuntos de Nivel

Diego Heredia, Israel Pineda

Resumen—En el presente trabajo se implementan redes neuronales informadas por física (PINNs) para la resolución de ecuaciones diferenciales obtenidas de la aplicación del método de conjuntos de nivel en problemas de evolución de interfaces. Estos problemas son la rotación del círculo, rectángulo y disco de Zalesak a través de un punto en el plano y la deformación de un círculo en un vórtice. Se realizan comparaciones con distintas configuraciones de los parámetros de las PINNs variando la cantidad de capas, neuronas, función de activación de cada neurona, puntos de colocación y número de iteraciones de entrenamiento. Para estas comparaciones se utilizan las métricas L_1 , IoU y porcentaje de pérdida de área. Se reportan los resultados y se presentan conclusiones.

Palabras Clave—Método de Conjuntos de Nivel, Curvas de Nivel, Redes Neuronales, Redes Neuronales Informadas por Física, PINN, Funciones de Distancia con Signo, Ecuaciones Diferenciales

I. INTRODUCCIÓN

EL método de conjuntos de nivel es un algoritmo matemático que permite describir la evolución de una interfaz a través del tiempo mediante la resolución de una ecuación diferencial. La solución de esta ecuación es un campo escalar cuyos conjuntos de nivel 0 en diferentes instantes de tiempo representan los cambios de la interfaz. La principal ventaja de esta representación es la capacidad de abordar los cambios en la topología de forma natural [1]. El método de conjuntos de nivel ha sido ampliamente utilizado en varios campos como el procesamiento de imágenes [2], dinámica de fluidos [3] y el modelado de superficies y gráficos por computadora, por ejemplo, Pineda y Gwun [4] implementaron este método para la simulación del crecimiento de hojas representándolas como interfaces en dos dimensiones.

Una ecuación diferencial puede resolverse por métodos analíticos o numéricos. En aplicaciones del mundo real, pocas veces se puede encontrar una solución exacta mediante métodos analíticos y por esta razón se buscan mayormente aproximaciones numéricas de las soluciones. Estas aproximaciones pueden llegar a ser complejas debido a la generación de grillas y en problemas con alta dimensión. Para este objetivo también se han desarrollado modelos de aprendizaje de máquina, sin embargo su entrenamiento requiere de grandes cantidades de datos y por lo general,

estos no están disponibles para problemas científicos [5]. Bajo este contexto, es necesario implementar modelos que permitan abordar estos problemas y uno de ellos se basa en la incorporación de información de leyes físicas al modelo de redes neuronales, lo que se conoce como Red Neuronal Informada por Física (PINN), con el fin de reducir el tiempo de entrenamiento de los modelos y la cantidad de datos necesarios. En el caso de la ecuación del método de conjuntos de nivel, la información añadida se refiere a la inclusión de la misma ecuación diferencial en la función de pérdida de la PINN, con el objetivo de que su solución sea aproximada mientras se minimiza la pérdida en el entrenamiento de la red.

Se han desarrollado modelos y aplicaciones sobre PINNs en distintos campos. Chacalo et al. [6] implementaron PINNs para la resolución de ecuaciones diferenciales ordinarias de los modelos Lotka Volterra, Fitzhugh Nagumo y el modelo epidemiológico de población susceptible, infectada y recuperada (SIR). También, Zubov et al. [7] presentan algunos ejemplos de aplicaciones de PINNs siendo uno de ellos el estudio de la propagación de incendios forestales mediante una PINN que resuelve una ecuación de conjunto de nivel. Dabrowski et al. [8] presentan este problema con mayor detalle y muestran que el uso de PINNs para el método de conjuntos de nivel puede producir predicciones precisas incluso con la incertidumbre de los datos del mundo real.

En el presente proyecto se implementaron modelos de PINNs para resolver ecuaciones diferenciales del método de conjuntos de nivel relacionadas con la rotación y la deformación de interfaces. Específicamente, se modeló la rotación de un círculo, rectángulo y disco de Zalesak y la deformación de un círculo en un vórtice. El objetivo fue comparar el desempeño de las PINNs en estos problemas y para esto se diseñaron varios modelos con diferentes configuraciones de las PINNs completamente conectadas, modificando la cantidad de capas y neuronas de la red neuronal y las funciones de activación de las neuronas. También se entrenaron las PINNs con distintas cantidades de puntos de datos, que son conocidos como puntos de colocación. Para la comparación se utilizaron las métricas L_1 , IoU y el porcentaje de pérdida de área de las interfaces en el tiempo final de la simulación, con respecto a las interfaces teóricas. Estos experimentos y comparaciones se realizaron con el objetivo de encontrar una configuración que presente resultados adecuados para todos los problemas presentados que puede servir como punto de inicio para

futuras investigaciones en cuanto a problemas relacionados con el método de conjuntos de nivel.

En las siguientes secciones se presenta la metodología del proyecto, donde se expone una explicación teórica del método de conjuntos de nivel y las funciones de distancia con signo, las PINNs, los parámetros de los experimentos implementados y las métricas de comparación que se utilizaron. Luego se presentan los resultados de cada experimento. Finalmente, se presentan las conclusiones y recomendaciones del proyecto.

II. METODOLOGÍA

II-A. Método de Conjuntos de Nivel

El conjunto de nivel k de un campo escalar $f : A \rightarrow \mathbb{R}$, donde A es un conjunto y $k \in \mathbb{R}$; se define como el subconjunto de puntos $x \in A$ tales que $f(x) = k$. Estos conjuntos se denominan curvas de nivel cuando $A = \mathbb{R}^2$, y superficies de nivel cuando $A = \mathbb{R}^3$.

El método de conjuntos de nivel es un algoritmo matemático que permite describir el movimiento de una interfaz en el tiempo. Sea $D \subset \mathbb{R}^n$ el dominio de estudio, dada una región cerrada $\Omega \subset D$, se simboliza la región interior como $\Omega^- \subset \Omega$, la región exterior como $\Omega^+ = D \setminus \Omega^-$ y la interfaz como $\Gamma = \partial\Omega$. El objetivo del método es calcular el movimiento de esta interfaz Γ bajo un campo de velocidad $\vec{v}$; este puede depender de la posición, tiempo, geometría de la interfaz o fenómenos físicos externos. La idea propuesta por Osher y Sethian [3], consiste en definir una función suave o al menos Lipschitz continua $\phi(x, t)$, con $x = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ que represente la interfaz como el conjunto donde $\phi(x, t) = 0$; es decir, el conjunto de nivel 0 de ϕ . La función de nivel ϕ debe cumplir con las siguientes propiedades:

$$\begin{cases} \phi(x, t) > 0 & \text{si } x \in \Omega^+ \\ \phi(x, t) = 0 & \text{si } x \in \partial\Omega = \Gamma(t) \\ \phi(x, t) < 0 & \text{si } x \in \Omega^- \end{cases}$$

De esta forma, la interfaz puede ser identificada en todo momento, localizando el conjunto $\Gamma(t)$ para el cual $\phi(x, t) = 0$. El movimiento es analizado utilizando el campo de velocidad $\vec{v}$; en este caso $\vec{v}$ es la velocidad deseada en la interfaz y es arbitraria en cualquier otro lado. La ecuación que describe este movimiento es:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla\phi = 0$$

Mediante la resolución de la ecuación diferencial anterior, se puede encontrar la función cuyos conjuntos de nivel 0 modelen el movimiento de la interfaz a través del tiempo.

En aplicaciones prácticas del método de conjuntos de nivel, se busca que la función ϕ sea una función de distancia con signo relativa a Γ . Para $x \in \mathbb{R}^n$, una función de distancia $d(x)$ relativa a Γ , se define como [9]:

$$d(x) = \min_{x_I \in \Gamma} \tilde{d}(x, x_I)$$

donde $\tilde{d}(x, x_I)$ representa la distancia entre x y x_I . Para este proyecto se consideró la distancia euclidiana. Esta función cumple que $d(x) = 0$ en la frontera de la interfaz $\partial\Omega = \Gamma$. Luego, una función de distancia con signo relativa a Γ es aquella que cumple con las siguientes propiedades:

$$\begin{cases} \phi(x) = d(x) & \text{si } x \in \Omega^+ \\ \phi(x) = 0 & \text{si } x \in \partial\Omega = \Gamma \\ \phi(x) = -d(x) & \text{si } x \in \Omega^- \end{cases}$$

Este tipo de funciones permiten que ϕ no se vuelva demasiado plana ni demasiado empinada cerca de $\Gamma(t)$, lo que ayuda a evitar problemas con el cálculo de gradientes con algoritmos numéricos [3]. Además, se cumple que $|\nabla\phi| = 1$ casi en todas partes, a excepción de ciertos puntos que son equidistantes de al menos dos puntos en la interfaz; sin embargo, esto no implica un deterioro en el desempeño de los algoritmos numéricos [9]. De esta forma, se utilizaron funciones de distancia con signo como funciones iniciales de los problemas del método de conjuntos de nivel.

En este proyecto se consideró el dominio $D = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid 0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1\}$ y se utilizaron funciones de distancia con signo como funciones iniciales del método, cuando la interfaz es un círculo, rectángulo y disco de Zalesak. La función para el círculo es:

$$\phi_{0,c}(x, y) = \sqrt{(x - 0.5)^2 + (y - 0.5)^2} - 0.15 \quad (1)$$

La función para el rectángulo es:

$$\phi_{0,r}(x, y) = \frac{\min(0, \max(r_1, r_2)) + \sqrt{\max(0, r_1)^2 + \max(0, r_2)^2}}{2} \quad (2)$$

donde r_1 y r_2 se calcula de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} r_1 &= \max(P_{1,x} - x, x - P_{2,x}) \\ r_2 &= \max(P_{1,y} - y, y - P_{2,y}) \end{aligned}$$

donde $P_{1,x}, P_{1,y}$ son las coordenadas x, y del punto de la esquina inferior izquierda del rectángulo y $P_{2,x}, P_{2,y}$ son las coordenadas del punto de la esquina superior derecha del rectángulo. Así, para este caso se consideró que $P_{1,x} = 0.4$, $P_{1,y} = 0.2$, $P_{2,x} = 0.6$, $P_{2,y} = 0.8$. Finalmente, la función inicial del disco de Zalesak se obtiene combinando la función del círculo y del rectángulo de la siguiente forma:

$$\phi_{0,z}(x, y) = \max(\phi_{0,c}(x, y), -\phi_{0,r}(x, y)) \quad (3)$$

con la diferencia de que los puntos para el cálculo de $\phi_{0,r}(x, y)$ fueron $P_1 = (0.45, 0.50)$ y $P_2 = (0.55, 0.80)$. En la Figura 1 se presentan las curvas de nivel de las funciones de distancia con signo para el círculo, rectángulo y el disco de Zalesak.

En este proyecto se analizaron dos problemas del método de conjuntos de nivel, que son la rotación y la deformación de interfaces. Se parametrizaron las ecuaciones para que la interfaz regrese a la posición inicial en el tiempo $t = 1$. De esta forma, el campo vectorial para la rotación de una interfaz sobre el punto $(0.5, 0.5)$ que se utilizó fue:

$$\vec{v} = \begin{pmatrix} -2\pi(y - 0.5) \\ 2\pi(x - 0.5) \end{pmatrix}$$

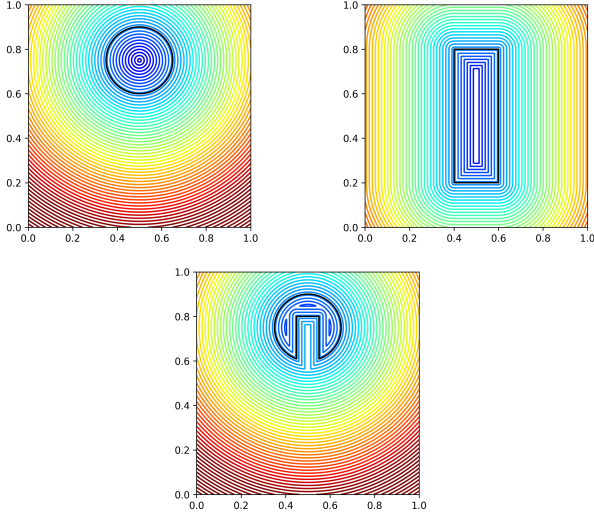


Figura 1. Curvas de nivel de las funciones de distancia con signo para el círculo, rectángulo y el Disco de Zalesak. La interfaz de color negro representa la curva de nivel 0.

y el campo vectorial que se utilizó para la deformación de la interfaz en un vórtice es:

$$\vec{v} = \begin{pmatrix} 8\sin^2(\pi x)\sin(2\pi y)\cos(\pi t) \\ -8\sin(2\pi x)\sin^2(\pi y)\cos(\pi t) \end{pmatrix}$$

De esta forma, la ecuación diferencial para la rotación sobre el punto (0,5,0,5) es:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - 2\pi(y - 0,5)\frac{\partial \phi}{\partial x} + 2\pi(x - 0,5)\frac{\partial \phi}{\partial y} = 0 \quad (4)$$

y la ecuación diferencial para la deformación de una interfaz en un vórtice es:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} = & -8\sin^2(\pi x)\sin(2\pi y)\cos(\pi t)\frac{\partial \phi}{\partial x} \\ & + 8\sin(2\pi x)\sin^2(\pi y)\cos(\pi t)\frac{\partial \phi}{\partial y} \end{aligned} \quad (5)$$

II-B. Redes Neuronales Informadas por Física (PINNs)

Una red neuronal informada por física (PINN) es un tipo de red neuronal en la que el aprendizaje no se enfoca únicamente en el procesamiento de datos como inputs de la red, sino que también utiliza la información física disponible del problema para mejorar la velocidad del entrenamiento. Una ventaja de esta metodología es que la incorporación de este tipo de información también permite reducir la cantidad de datos necesarios para el entrenamiento [10].

Hornik et al. [11] plantean que una red neuronal puede aproximar cualquier función con la suficiente información y entrenamiento. Con este razonamiento, estos modelos han sido utilizados con el fin de resolver ecuaciones diferenciales. La incorporación de información física en la red está relacionada con la resolución de una ecuación; y se la realiza en la función de pérdida de la red neuronal, la cual debe ser minimizada. De esta forma, cuando el algoritmo converge también se resuelve la ecuación diferencial.

Raissi et al. [12] presentan el método de resolución de ecuaciones diferenciales mediante PINNs. Específicamente, se desarrollan soluciones basadas en datos para ecuaciones diferenciales parciales de la forma general:

$$u_t + \mathcal{N}[u] = 0, \quad x \in \Omega, t \in [0, T] \quad (6)$$

donde $u(t, x)$ es la solución oculta de la ecuación, $\mathcal{N}[\cdot]$ es un operador diferencial no lineal y Ω es un subconjunto de $\mathbb{R}^D$. Los autores desarrollan algoritmos tanto para problemas continuos con respecto al tiempo y problemas discretos. En este caso, el objeto de estudio son los problemas continuos. Se define $f(t, x)$ como el lado izquierdo de la ecuación (6), es decir,

$$f := u_t + \mathcal{N}[u] \quad (7)$$

y se procede a aproximar $u(t, x)$ mediante una red neuronal profunda (DNN). Esta suposición junto con la ecuación (7) dan como resultado la PINN $f(t, x)$. De esta forma, se pueden aprender los parámetros compartidos entre las redes neuronales $u(t, x)$ y $f(t, x)$ minimizando la pérdida de error cuadrático medio (MSE):

$$MSE = MSE_u + MSE_f \quad (8)$$

donde:

$$\begin{aligned} MSE_u &= \frac{1}{N_u} \sum_{i=1}^{N_u} |u(t_u^i, x_u^i) - u^i|^2 \\ MSE_f &= \frac{1}{N_f} \sum_{i=1}^{N_f} |f(t_f^i, x_f^i)|^2 \end{aligned}$$

En esta definición, el conjunto $\{t_u^i, x_u^i, u^i\}_{i=1}^{N_u}$ representa los datos de entrenamiento de las condiciones iniciales y de frontera en $u(t, x)$; y el conjunto $\{t_f^i, x_f^i\}_{i=1}^{N_f}$ especifica los puntos de colocación para $f(t, x)$. De esta forma, la pérdida MSE_u corresponde a los datos de las condiciones iniciales y de frontera de la ecuación, mientras que MSE_f refuerza la estructura impuesta por la ecuación (6) en un conjunto finito de puntos de colocación [12]. Cabe mencionar que el cálculo del operador diferencial, que es incluido en la función de pérdida, se realiza mediante diferenciación automática, tomando las derivadas con respecto a las coordenadas de entrada de la red (espacio y tiempo). En general, los autores indican que a pesar de que no existe garantía teórica de que el procedimiento converja a un mínimo global, la evidencia empírica indica que, si la ecuación diferencial parcial dada está bien planteada y su solución es única, entonces el método es capaz de lograr una buena precisión de predicción dada una arquitectura de red neuronal suficientemente expresiva y un número suficiente de puntos de colocación N_f [12].

La función de pérdida en una PINN puede incluir pesos para cada uno de los términos de ecuación (8), es decir, la función de pérdida de la PINN es:

$$MSE = w_u MSE_u + w_f MSE_f$$

donde w_u y w_f son los pesos utilizados para balancear la interacción de los términos.

En los problemas del método de conjuntos de nivel de este trabajo, para la función de pérdida proveniente de los datos MSE_u se consideró las condiciones iniciales de cada problema. Es decir, que la función de nivel en el tiempo $t = 0$ ϕ_0 , sea la propuesta en cada modelo. Además, se considera la misma incidencia para esta pérdida y la relacionada con la ecuación diferencial, es decir, se consideró que:

$$w_u = w_f = 1$$

Esta consideración se plantea debido a que el objetivo del proyecto es comparar modelos de PINNs que no tengan alteraciones ni consideraciones especiales diferentes de un modelo de redes neuronales normal.

En la Figura 2 se presenta el diagrama utilizado para la implementación de la PINN en la resolución de la ecuación del método de conjuntos de nivel.

II-C. Experimentos

En este proyecto, se implementaron PINNs para resolver los siguientes problemas:

- Rotación del círculo, utilizando la ecuación diferencial (4) con la función inicial de la ecuación (1)
- Rotación del rectángulo, utilizando la ecuación diferencial (4) con la función inicial de la ecuación (2)
- Rotación del disco de Zalesak, utilizando la ecuación diferencial (4) con la función inicial de la ecuación (3)
- Deformación del círculo en un vórtice, utilizando la ecuación diferencial (5) con la función inicial de la ecuación (1)

Para cada uno de los problemas, se consideraron las siguientes configuraciones de la PINN completamente conectada:

- 3 capas con 100 neuronas cada una
- 5 capas con 200 neuronas cada una

Además, para las neuronas de cada configuración anterior, se consideraron las siguientes funciones de activación:

- Sigmoide
- Tangente Hiperbólica

Los puntos de colocación de las PINNs fueron seleccionados de forma aleatoria en cada iteración del algoritmo. El procedimiento fue seleccionar aleatoriamente una cantidad n de números entre 0 y 1 para cada eje x e y y luego formar una malla con estos números de tal forma que se tengan $n \times n$ coordenadas de puntos (x, y) . Se emparejó a cada una de estas coordenadas con un tiempo aleatorio entre 0 y 1, que es la ventana de simulación con la cual se parametrizaron los experimentos. Así, la cantidad de puntos de colocación por cada configuración de la PINN fue:

- $80 \times 80 = 6400$ puntos de colocación
- $100 \times 100 = 10000$ puntos de colocación

Finalmente, todos los casos se entrenaron con 2000000 de iteraciones y se tabularon los resultados cada 50000 iteraciones. Los entrenamientos fueron realizados utilizando una GPU NVIDIA RTX 4070 de 12 GB de VRAM.

II-D. Métricas de Comparación

Con el objetivo de comparar las interfaces predichas por el modelo con las interfaces teóricas, se utilizaron las siguientes métricas:

II-D1. Métrica L_1 : Esta métrica representa la precisión de la ubicación de la interfaz. Se calcula el área donde las interfaces no se solapan y se divide este resultado para el perímetro de la interfaz teórica L . La fórmula, propuesta por Sussman y Fatemi [13], es:

$$\frac{1}{L} \int |H(\phi_{\text{teórico}}) - H(\phi_{\text{predicho}})| dx dy$$

donde $H(\phi)$ es la función de Heaviside evaluada en la función de nivel. En este caso, la función de Heaviside se define como:

$$H(z) = \begin{cases} 1 & \text{si } z < 0 \\ 0 & \text{caso contrario} \end{cases}$$

Se utiliza la función de Heaviside para capturar las áreas de cada interfaz ya que, por la naturaleza de las funciones de nivel en esta aplicación, todos los valores de ϕ menores a 0 proyectados perpendicularmente en el plano xy se encuentran en el interior de la interfaz.

II-D2. Intersection Over Union: La métrica Intersection Over Union (IoU), también conocida como índice de Jaccard, es la relación entre el área de intersección y el área de unión entre dos figuras. Así, esta métrica cuantifica qué tan bien se alinean dos interfaces. Sean dos figuras $A, B \subseteq S \in \mathbb{R}^n$, entonces [14]:

$$IoU = \frac{|A \cap B|}{|A \cup B|}$$

En este caso, A y B representan las interfaces teóricas y predichas por el modelo. Una puntuación de IoU más alta implica una predicción más precisa y sus valores se encuentran en el rango de 0 a 1.

II-D3. Porcentaje de pérdida de área: Se calcula el porcentaje de pérdida del área de la interfaz predicha, en relación con el área de la interfaz teórica para cada problema. La fórmula es:

$$\frac{A_{\text{teórica}} - A_{\text{predicha}}}{A_{\text{teórica}}} \times 100$$

Si el valor es positivo, el área predicha es menor que la teórica; mientras que si es negativo, entonces el área inferida es mayor.

Para cada uno de los escenarios propuestos para el proyecto, es decir, para cada PINN, se calculan las métricas L_1 , IoU y el porcentaje de pérdida de área de la interfaz predicha por la PINN en comparación con la interfaz teórica en el tiempo $t = 1$.

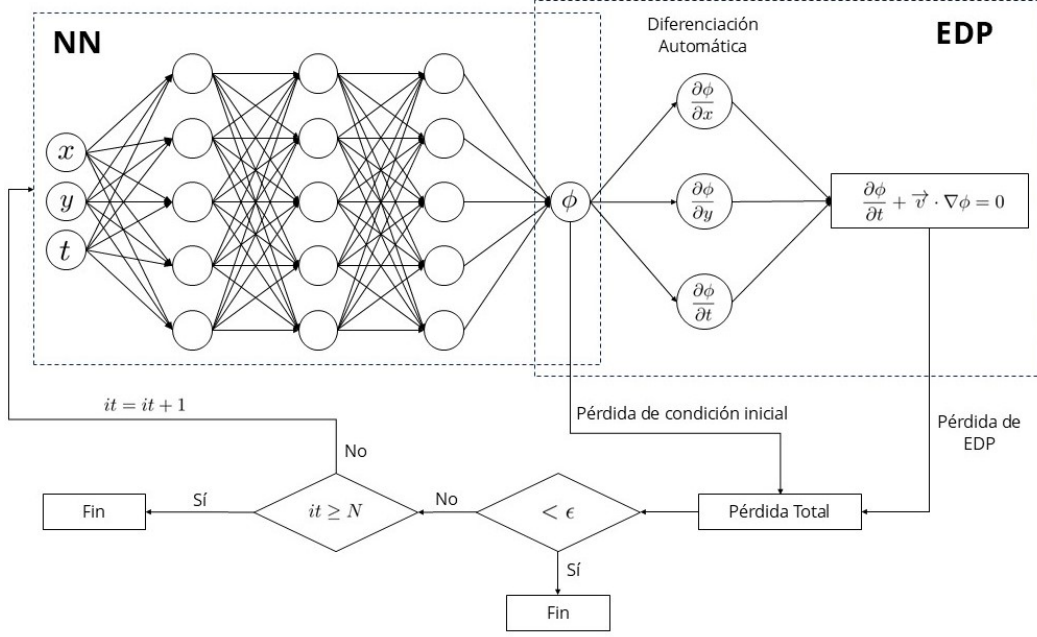


Figura 2. Diagrama esquemático de la PINN para resolver la ecuación del método de conjuntos de nivel.

Los códigos para la implementación de los experimentos del proyecto se encuentran disponibles en GitHub en <https://github.com/dherediad/PINNs-LSM>.

III. RESULTADOS

En esta sección se presentan los resultados de la implementación de los experimentos. Primero se grafica la evolución de las métricas L_1 , IoU y porcentaje de pérdida de área en el tiempo $t = 1$ de cada modelo implementado para cada experimento (círculo, rectángulo, disco de Zalesak y vórtice) cada 50000 iteraciones de entrenamiento. Para diferenciar los modelos en la leyenda de cada gráfico, se utiliza la notación: “número de capas + c + número de neuronas + n + función de activación”. De cada problema se obtiene el mejor modelo comparando los valores de las métricas. Para determinar el mejor modelo, se selecciona la configuración de la red neuronal que alcance el máximo valor de IoU, mínimo de L_1 y mínimo del valor absoluto del porcentaje de pérdida de área; o aquel que cumpla con 2 de los 3 criterios.

Después, de los mejores modelos se presenta la evolución a través del tiempo de la función de nivel junto con la curva de nivel 0, se realiza una comparación gráfica de las interfaces teóricas y predichas en el tiempo $t = 1$ y se grafica la pérdida de área con respecto a la interfaz teórica en varios instantes de tiempo.

III-A. Rotación del círculo

En la Figura 3 se presenta la evolución de las métricas para el problema de la rotación del círculo de los modelos cuyos entrenamientos incluyeron $100 \times 100 = 10000$ puntos de colocación. Se puede ver que casi todas las

configuraciones obtienen buenos resultados a partir de las 200000 iteraciones, con valores de IoU mayores a 0,8. En general, los modelos con 5 capas y 200 neuronas tienen un mejor desempeño en comparación con los de 3 capas y 100 neuronas. Sin embargo, cuando se utiliza la función de activación tangente hiperbólica existe mayores oscilaciones en las métricas, lo que implica que en ciertas iteraciones el error L_1 sea menor con esta función de activación.

Es interesante notar que para los modelos con redes de 3 capas, las configuraciones con función sigmoide o tangente hiperbólica no se diferencian en estabilidad a través de las iteraciones. El problema con estos modelos es que pueden empezar con métricas muy deficientes; como es el caso de la función sigmoide que en 50000 iteraciones tiene IoU de 0 y pérdida de área del 100 %. Por lo tanto, para utilizar estos modelos en diferentes aplicaciones se debe tomar en cuenta que requieren una mayor cantidad de iteraciones para alcanzar buenos resultados.

El mejor modelo para este problema, que obtuvo el mayor valor de IoU y menor valor de L_1 fue el de 5 capas con 200 neuronas cada una, con función de activación sigmoide utilizando $100 \times 100 = 10000$ puntos de colocación y con 1700000 iteraciones de entrenamiento. El tiempo de ejecución del entrenamiento fue 4 horas y 31 minutos.

En la Figura 4 se presenta la comparación de la interfaz teórica y predicha por el mejor modelo mencionado anteriormente, en el tiempo $t = 1$. Visualmente no existe una diferencia entre ambas interfaces, por lo que el modelo es aceptable en este aspecto. Sin embargo, existe una pérdida de área del 0,12% con respecto al área teórica. Cabe destacar que si el objetivo práctico de la implementación

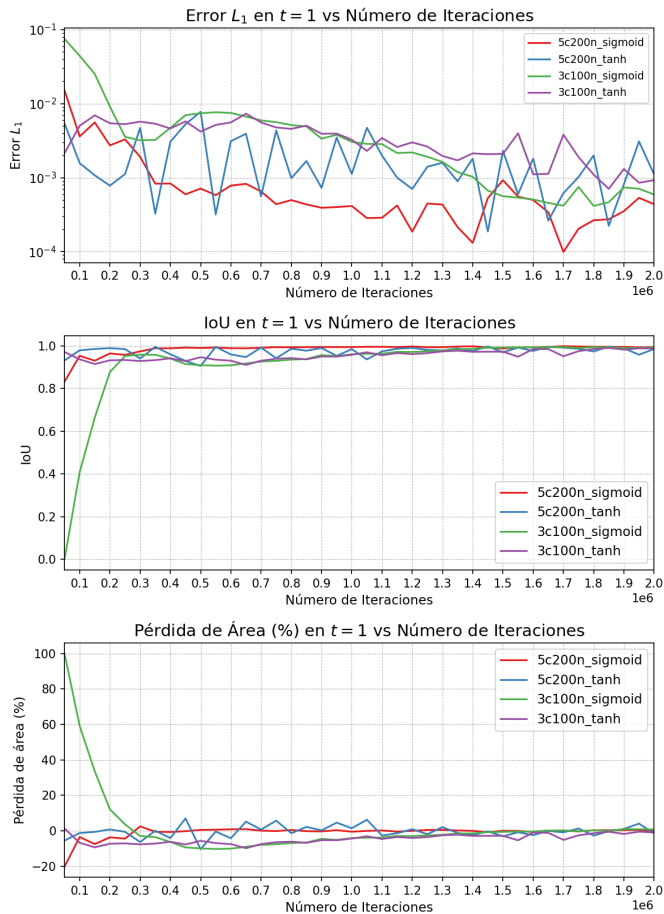


Figura 3. Valores de las métricas L_1 , IoU y porcentaje de pérdida de área de la interfaz teórica en el tiempo $t = 1$, en comparación con la interfaz predicha por cada modelo en $t = 1$ según el número de iteraciones utilizadas en el entrenamiento de cada modelo. Se utilizan $100 \times 100 = 10000$ puntos de colocación. El problema evaluado es la rotación del círculo.

del modelo es de carácter visual, entonces el modelo cumple con las expectativas.

Finalmente, en la Figura 5 se presentan los porcentajes de pérdida de área de la interfaz predicha con respecto a la interfaz teórica a través del tiempo, utilizando el mejor modelo. En este gráfico se evidencia que durante toda la trayectoria de la interfaz, existen pequeños porcentajes de pérdida de área, siendo el mayor porcentaje en valor absoluto de 0,13% aproximadamente. Los porcentajes negativos indican aumento de área con respecto a la interfaz teórica y los positivos disminución del área. En el tiempo $t = 0,43$ el modelo alcanza el mínimo porcentaje en valor absoluto. Antes de este tiempo, la interfaz predicha era más grande que la teórica y después de este instante de tiempo, fue perdiendo área progresivamente. En general, el comportamiento no fue completamente monótono sino que constantemente fue perdiendo y ganando área.

III-B. Rotación del rectángulo

En la Figura 6 se presenta la evolución de las métricas para el problema de la rotación del rectángulo de los

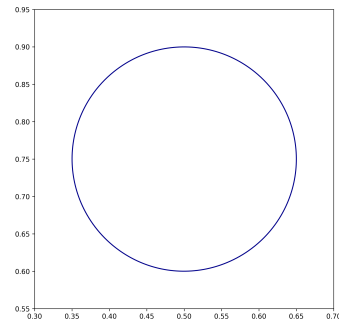


Figura 4. Comparación de la interfaz teórica en $t = 1$ con la interfaz predicha por el mejor modelo para el problema de la rotación del círculo. La línea punteada de color negro corresponde a la interfaz teórica y la línea sólida de color azul a la interfaz predicha.

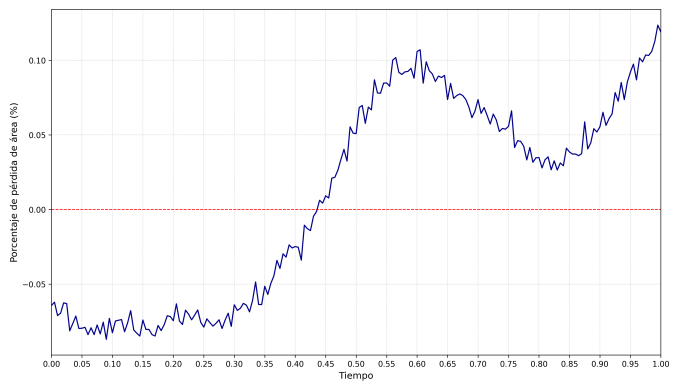


Figura 5. Porcentaje de pérdida de área de la interfaz teórica a través del tiempo, utilizando el mejor modelo para el problema de la rotación del círculo.

modelos cuyos entrenamientos incluyeron $100 \times 100 = 10000$ puntos de colocación. Se evidencia un comportamiento inestable del modelo con 5 capas y 200 neuronas con la función tangente hiperbólica. Existen ciertas iteraciones donde este modelo es mejor que el que utiliza la función sigmoide; sin embargo, el de la función sigmoide no presenta cambios drásticos. En este problema se puede evidenciar con mayor facilidad la diferencia entre los modelos con función sigmoide y tangente hiperbólica en las primeras iteraciones. Para el modelo de 5 capas se puede ver que la función sigmoide alcanza IoU mayor a 0,9 a partir de las 400000 iteraciones; mientras que los modelos con tangente hiperbólica alcanzan valores cercanos a 0,95 únicamente con 100000 iteraciones.

El mejor modelo para este problema, que obtuvo el mayor valor de IoU y menor valor de L_1 fue el de 5 capas con 200 neuronas cada una, con función de activación sigmoide utilizando $100 \times 100 = 10000$ puntos de colocación y con 1900000 iteraciones de entrenamiento. El tiempo de ejecución del entrenamiento fue 5 horas y 4 minutos.

En la Figura 7 se presenta la comparación de la interfaz teórica y predicha por el mejor modelo mencionado anteriormente, en el tiempo $t = 1$. Se puede ver que las líneas verticales del rectángulo predicho son más rectas que las líneas horizontales. La interfaz se deforma en las

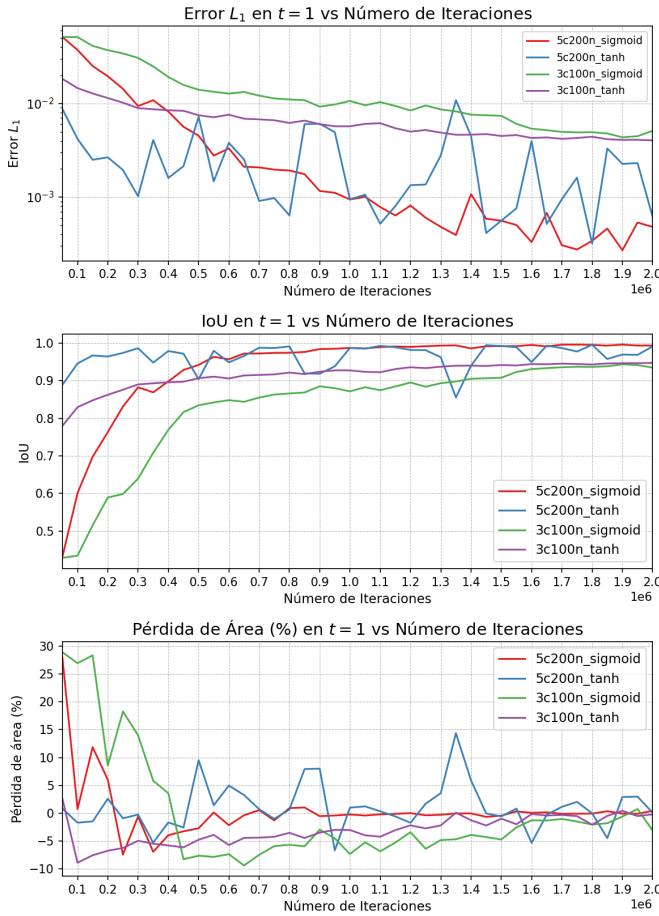


Figura 6. Valores de las métricas L_1 , IoU y porcentaje de pérdida de área de la interfaz teórica en el tiempo $t = 1$, en comparación con la interfaz predicha por cada modelo en $t = 1$ según el número de iteraciones utilizadas en el entrenamiento de cada modelo. Se utilizan $100 \times 100 = 10000$ puntos de colocación. El problema evaluado es la rotación del rectángulo.

esquinas y no es completamente igual al rectángulo teórico. Aquí se empieza a notar la dificultad propia del método de conjuntos de nivel para capturar esquinas en las interfaces.

Finalmente, en la Figura 8 se presentan los porcentajes de pérdida de área de la interfaz predicha con respecto a la interfaz teórica a través del tiempo, utilizando el mejor modelo. Dado que todos los valores del gráfico son negativos, entonces el rectángulo predicho siempre tuvo mayor área en comparación con el teórico; con un máximo porcentaje de crecimiento de 0,26 %, en $t = 0$. En los tiempos siguientes, este porcentaje disminuye, por lo que la interfaz se corrige al pasar el tiempo. A pesar de que en ningún momento la interfaz predicha es idéntica a la teórica se debe considerar que los porcentajes en los que ambos no son iguales son pequeños.

III-C. Rotación del disco de Zalesak

En la Figura 9 se presenta la evolución de las métricas para el problema de la rotación del Disco de Zalesak de los modelos cuyos entrenamientos incluyeron $80 \times 80 = 6400$ puntos de colocación. De forma similar que los problemas

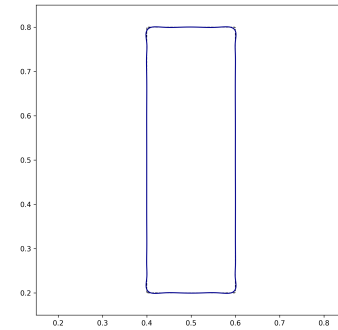


Figura 7. Comparación de la interfaz teórica en $t = 1$ con la interfaz predicha por el mejor modelo para el problema de la rotación del rectángulo. La línea punteada de color negro corresponde a la interfaz teórica y la línea sólida de color azul a la interfaz predicha.

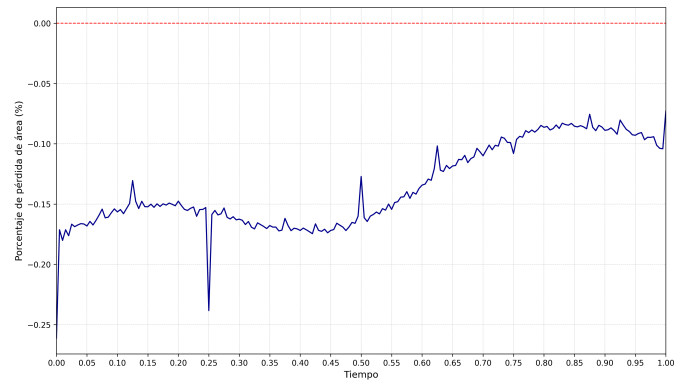


Figura 8. Porcentaje de pérdida de área de la interfaz teórica a través del tiempo, utilizando el mejor modelo para el problema de la rotación del rectángulo.

anteriores, se evidencia un comportamiento inestable del modelo con 5 capas y 200 neuronas con la función tangente hiperbólica. A pesar de tener este comportamiento, este modelo se mantiene en valores de IoU mayores a 0,8, aproximadamente. Se observa una mayor diferencia entre los modelos con 5 y 3 capas, ya que los de 3 capas no logran superar valores de IoU de 0,9 y presentan valores menores a 0,6 hasta 1250000 iteraciones. Cuando se utilizan 10000 puntos de colocación el modelo con tangente hiperbólica supera un IoU de 0,8 en 850000 iteraciones; sin embargo no alcanza valores mayores a los modelos con 5 capas.

El mejor modelo para este problema, que obtuvo el mayor valor de IoU y menor valor de L_1 fue el de 5 capas con 200 neuronas cada una, con función de activación tangente hiperbólica utilizando $80 \times 80 = 6400$ puntos de colocación y con 1750000 iteraciones de entrenamiento. El tiempo de ejecución del entrenamiento fue 3 horas y 44 minutos.

En la Figura 10 se presenta la comparación de la interfaz teórica y predicha por el mejor modelo mencionado anteriormente, en el tiempo $t = 1$. La parte circular del disco es idéntica visualmente, mientras que la parte rectangular tiene problemas similares a la rotación del rectángulo; es decir, no se logra capturar de manera idéntica las esquinas.

Finalmente, en la Figura 11 se presentan los porcentajes

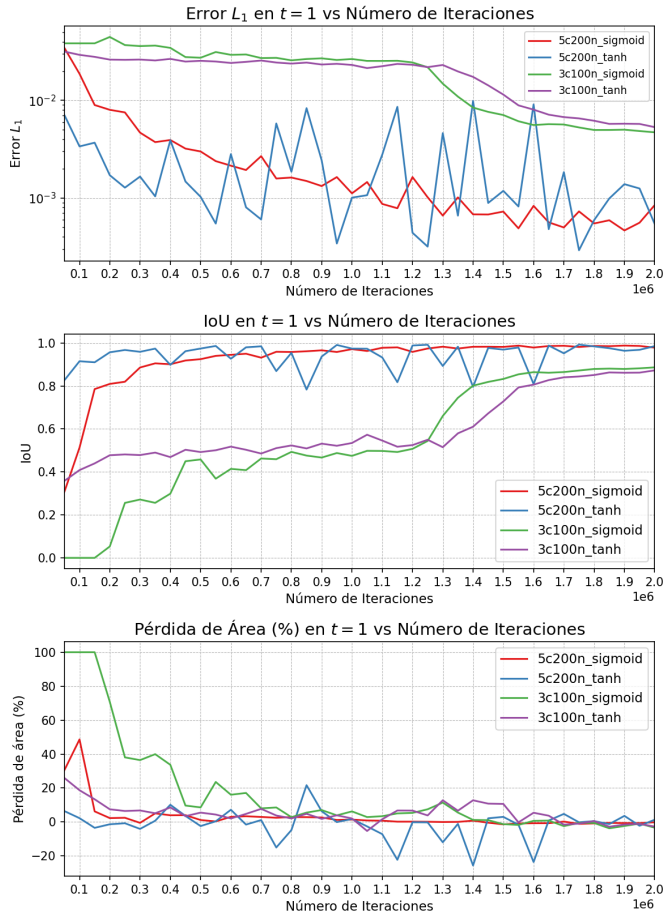


Figura 9. Valores de las métricas L_1 , IoU y porcentaje de pérdida de área de la interfaz teórica en el tiempo $t = 1$, en comparación con la interfaz predicha por cada modelo en $t = 1$ según el número de iteraciones utilizadas en el entrenamiento de cada modelo. Se utilizan $80 \times 80 = 6400$ puntos de colocación. El problema evaluado es la rotación del Disco de Zalesak.

de pérdida de área de la interfaz predicha con respecto a la interfaz teórica a través del tiempo, utilizando el mejor modelo. De forma similar que en la rotación del rectángulo, el disco predicho siempre tuvo mayor área en comparación con el teórico pues sus valores de porcentaje de pérdida siempre son menores a 0. El máximo porcentaje de crecimiento es de 0,24 % aproximadamente y se mantiene entre 0,15 % y 0,20 % a partir de $t = 0,65$. A pesar de que estos porcentajes no decrecen en el tiempo, se debe considerar que sus valores son pequeños y que visualmente la diferencia se encuentra únicamente en las esquinas de la interfaz.

III-D. Deformación del círculo en vórtice

En la Figura 12 se presenta la evolución de las métricas para el problema de la deformación del círculo en un vórtice de los modelos cuyos entrenamientos incluyeron $80 \times 80 = 6400$ puntos de colocación. En este problema también se observa un comportamiento inestable del modelo con 5 capas y 200 neuronas con la función tangente hiperbólica, especialmente a partir de 1400000 iteraciones, puesto que se

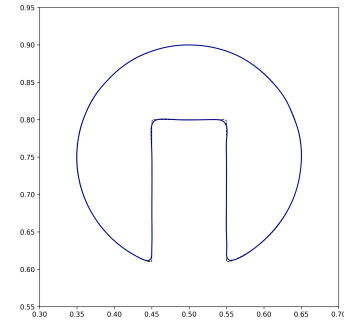


Figura 10. Comparación de la interfaz teórica en $t = 1$ con la interfaz predicha por el mejor modelo para el problema de la rotación del Disco de Zalesak. La línea punteada de color negro corresponde a la interfaz teórica y la línea sólida de color azul a la interfaz predicha.

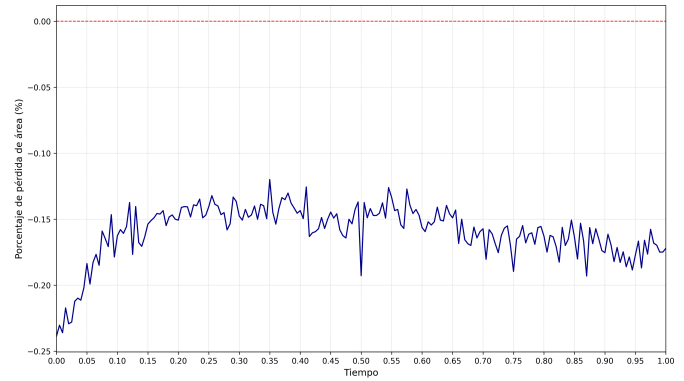


Figura 11. Porcentaje de pérdida de área de la interfaz teórica a través del tiempo, utilizando el mejor modelo para el problema de la rotación del Disco de Zalesak.

obtienen valores de IoU menores a 0,8, que fueron superados anteriormente en 200000 iteraciones. Se puede ver que para este problema, los modelos con 3 capas no obtienen buenas métricas en las primeras iteraciones; por ejemplo, con la función de activación sigmoide, la métrica IoU es igual a 0 hasta 650000 iteraciones.

El mejor modelo para este problema, que obtuvo el mayor valor de IoU y menor valor de L_1 fue el de 5 capas con 200 neuronas cada una, con función de activación sigmoide utilizando $80 \times 80 = 6400$ puntos de colocación y con 2000000 iteraciones de entrenamiento. El tiempo de ejecución del entrenamiento fue 4 horas y 59 minutos.

En la Figura 13 se presenta la comparación de la interfaz teórica y predicha por el mejor modelo mencionado anteriormente, en el tiempo $t = 1$. Visualmente se pueden encontrar diferencias entre las dos interfaces, especialmente en la parte inferior del círculo. Sin embargo, estas diferencias no representan un cambio drástico en la figura; además en $t = 1$ el valor de la métrica IoU fue 0,976 y ganó únicamente 0,45 % de área aproximadamente.

Finalmente, en la Figura 14 se presentan los porcentajes de pérdida de área de la interfaz predicha con respecto a la interfaz teórica a través del tiempo, utilizando el mejor modelo. Durante el proceso de deformación, el

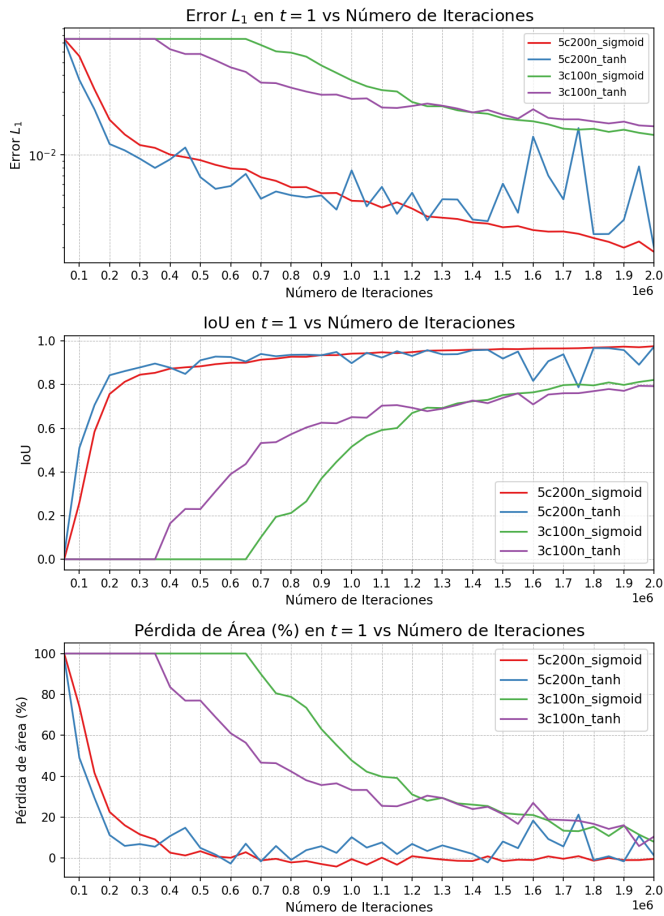


Figura 12. Valores de las métricas L_1 , IoU y porcentaje de pérdida de área de la interfaz teórica en el tiempo $t = 1$, en comparación con la interfaz predicha por cada modelo en $t = 1$ según el número de iteraciones utilizadas en el entrenamiento de cada modelo. Se utilizan $80 \times 80 = 6400$ puntos de colocación. El problema evaluado es la deformación del círculo en un vórtice.

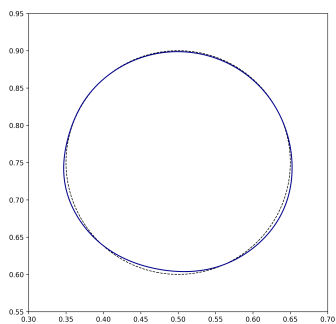


Figura 13. Comparación de la interfaz teórica en $t = 1$ con la interfaz predicha por el mejor modelo para el problema de la deformación del círculo en un vórtice. La línea punteada de color negro corresponde a la interfaz teórica y la línea sólida de color azul a la interfaz predicha.

área de la interfaz siempre fue mayor al del círculo teórico siendo el porcentaje máximo de crecimiento de 1 % aproximadamente; y por lo general, esta disparidad estuvo entre el 0,8 % y 1 % durante el tiempo de simulación. En $t = 1$ el porcentaje se redujo a 0,45 %.

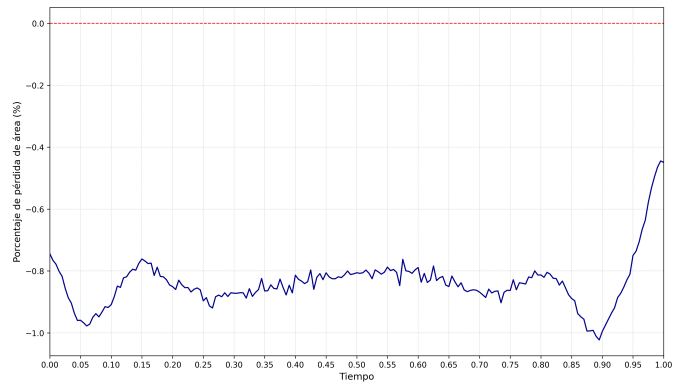


Figura 14. Porcentaje de pérdida de área de la interfaz teórica a través del tiempo, utilizando el mejor modelo para el problema de la deformación del círculo en un vórtice.

III-E. Mejores modelos

En la Tabla I se resumen las configuraciones de las redes neuronales de los mejores modelos por problema y se presentan los valores de sus métricas. La característica en común de los mejores modelos es que sus redes están formadas por 5 capas con 200 neuronas cada una. Las redes con funciones de activación sigmoide resultaron ser mejores en 3 de los 4 problemas y la cantidad de iteraciones mínima fue 1700000. A pesar de que con mayor cantidad de puntos de colocación se obtienen mejores resultados, para dos problemas el mejor modelo se obtuvo con 6400 puntos. En estos modelos, se puede observar que el problema que alcanzó menor valor de L_1 y mayor de IoU fue el de la rotación del círculo; sin embargo, el menor porcentaje de pérdida de área en valor absoluto se alcanzó en la rotación del rectángulo.

En las Figuras 15, 16, 17 y 18 se presenta la evolución de la función de nivel predicha junto con las curvas de nivel en diferentes tiempos utilizando los mejores modelos para cada problema. En los problemas de rotación se puede observar que durante toda la trayectoria, la curva de nivel 0 y las curvas cercanas a esta no se deforman, mientras que las curvas más alejadas tienden a perder forma, especialmente aquellas cerca de los extremos del dominio. Sin embargo, estas diferencias no afectan directamente a la curva de nivel 0.

IV. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

En este trabajo se implementaron modelos de redes neuronales informadas por física (PINNs) para la resolución de ecuaciones diferenciales obtenidas de la aplicación del método de conjuntos de nivel en problemas de evolución de interfaces. Específicamente, los problemas fueron la rotación del círculo, rectángulo y disco de Zalesak a través de un punto en el plano y la deformación de un círculo en un vórtice. Se realizaron experimentos variando la cantidad de capas y neuronas de las PINNs (3 capas con 100 neuronas cada una y 5 capas con 200 neuronas cada una), la función de activación de las neuronas (sigmoide y tangente hiperbólica), la cantidad de puntos de colocación

Tabla I
CONFIGURACIONES DE LOS MEJORES MODELOS DE CADA PROBLEMA Y MÉTRICAS L_1 , IoU Y PORCENTAJE DE PÉRDIDA DE ÁREA

Problema	Configuración de la PINN					Métricas		
	# Capas	# Neu	Función Activación	Iteraciones	Pts. Colocación	L1	IoU	% P.A.
Círculo	5	200	sigmoide	1700000	10000	0,000099	0,998701	0,119033
Rectángulo	5	200	sigmoide	1900000	10000	0,000270	0,996454	-0,072918
Zalesak	5	200	tangente hiperbólica	1750000	6400	0,000291	0,992540	-0,172103
Vórtice	5	200	sigmoide	2000000	6400	0,001850	0,975693	-0,448991

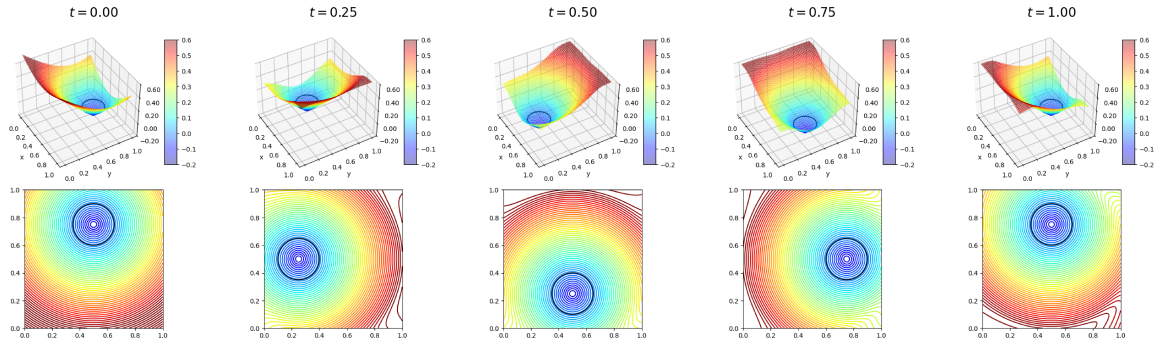


Figura 15. Evolución de la función de nivel y curvas de nivel a través del tiempo, utilizando el mejor modelo para el problema de la rotación del círculo. La línea sólida de color negro representa la curva de nivel 0.

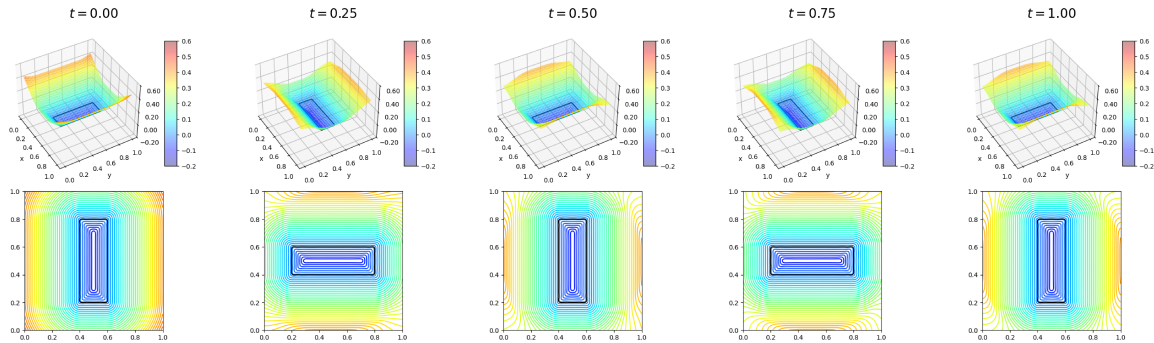


Figura 16. Evolución de la función de nivel y curvas de nivel a través del tiempo, utilizando el mejor modelo para el problema de la rotación del rectángulo. La línea sólida de color negro representa la curva de nivel 0.

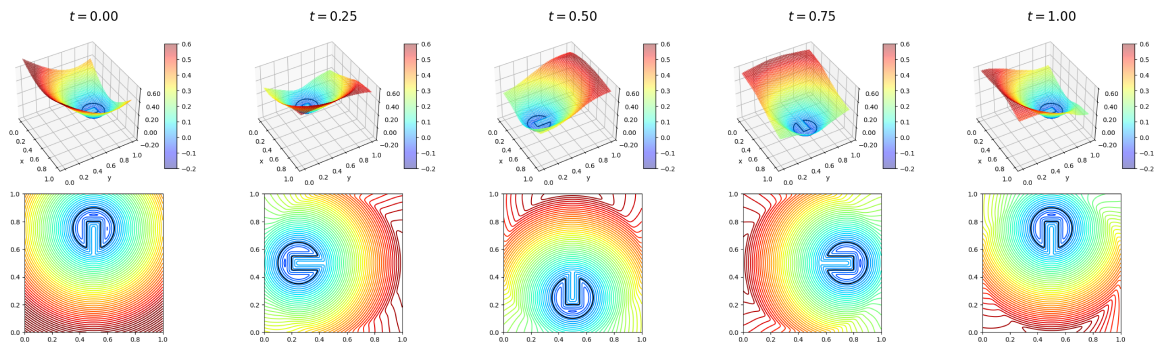


Figura 17. Evolución de la función de nivel y curvas de nivel a través del tiempo, utilizando el mejor modelo para el problema de la rotación del Disco de Zalesak. La línea sólida de color negro representa la curva de nivel 0.

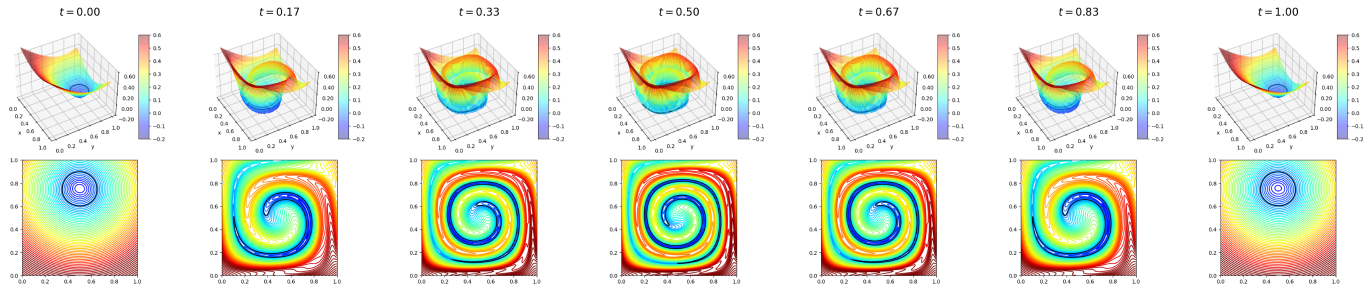


Figura 18. Evolución de la función de nivel y curvas de nivel a través del tiempo, utilizando el mejor modelo para el problema de la deformación del círculo en un vórtice. La línea sólida de color negro representa la curva de nivel 0.

(6400 y 10000); y para cada experimento se obtuvieron los valores de las métricas L_1 , IoU y porcentaje de pérdida de área cada 50000 iteraciones de entrenamiento hasta 2000000 de iteraciones. De los resultados obtenidos de las implementaciones de los modelos de PINNs, se obtienen las siguientes conclusiones:

- Las ecuaciones diferenciales obtenidas de la aplicación del método de conjuntos de niveles al problema de evolución de interfaces pueden resolverse utilizando PINNs, en un intervalo de tiempo determinado.
- Para el problema de evolución de interfaces utilizando el método de conjuntos de nivel, su resolución mediante PINNs con redes neuronales completamente conectadas de 5 capas y 200 neuronas, donde se utilizan 10000 puntos de colocación, generalmente obtienen métricas robustas después de 500000 iteraciones de entrenamiento. En estos modelos, la función de activación sigmoide tiene un comportamiento más estable que la función tangente hiperbólica, ya que los modelos donde se utilizó esta última función presentaron mejoramiento y empeoramiento de las métricas constantemente.
- Los modelos de PINNs implementados resolvieron con mayor exactitud los problemas de rotación de interfaces en comparación con el problema de deformación. Visualmente, las diferencias con las interfaces teóricas fueron pequeñas y se evidenció la dificultad propia del método de conjuntos de nivel para capturar las esquinas de las figuras. Numéricamente, los mejores modelos de los problemas de rotación tuvieron valores de la métrica IoU mayores a 0,99, mientras que el problema de deformación alcanzó el valor de 0,97.
- Los modelos de PINNs permiten realizar predicciones de la evolución de la interfaz en cualquier instante de tiempo debido a la naturaleza de la inferencia en las redes neuronales. En las simulaciones con los mejores modelos se demostró que dentro del intervalo de tiempo, se obtiene porcentajes de pérdida de área en valor absoluto de máximo 1 % aproximadamente. Esto asegura una buena precisión de las inferencias dentro del intervalo.

Con el objetivo de profundizar en el conocimiento sobre la resolución de ecuaciones diferenciales mediante PINNs

y como trabajo a futuro, se consideran las siguientes recomendaciones:

- En el presente trabajo se implementaron 32 modelos de PINNs, los cuales alcanzaron diferentes niveles de precisión. Factores importantes a considerar al momento de desarrollar estos modelos son la infraestructura tecnológica para el entrenamiento y el tiempo de ejecución. Se debe escoger una configuración de parámetros de las PINNs adecuada de acuerdo con la disponibilidad de estos dos factores y el nivel de precisión que se quiere alcanzar según el propósito de la investigación.
- El resultado de esta investigación indica que una PINN con 5 capas y 200 neuronas con función de activación sigmoide y 10000 puntos de colocación es un punto de partida adecuado para empezar a investigar otros problemas del método de conjuntos de nivel que requieran de una mayor complejidad. Ejemplos de estos problemas pueden ser deformaciones de interfaces distintas al problema del vórtice, o evolución de volúmenes; es decir, que el conjunto de nivel tenga 3 dimensiones.
- Un problema que se podría investigar a partir de este proyecto es la segmentación de imágenes. Chan y Vese [15] desarrollaron un método para segmentación de imágenes mediante un problema de minimización y Getreuer [16] presentó la adaptación de este problema a la resolución de una ecuación del método de conjuntos de nivel. Sin embargo, la dificultad de aplicar PINNs directamente en este problema se encuentra en que las imágenes deben estar incluidas en la ecuación como matrices numéricas fijas; pero se ha demostrado que la aleatorización de los puntos de colocación juega un papel importante en el entrenamiento de las PINNs [17].

REFERENCIAS

- [1] F. Gibou, R. Fedkiw, and S. Osher, “A review of level-set methods and some recent applications,” *Journal of Computational Physics*, vol. 353, pp. 82–109, 2018. [Online]. Available: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999117307441>
- [2] S. Osher and R. Tsai, “REVIEW ARTICLE: Level Set Methods and Their Applications in Image Science,” *Communications in Mathematical Sciences*, vol. 1, no. 4, pp. 1 – 20, 2003.

- [3] S. Osher and R. P. Fedkiw, "Level set methods: An overview and some recent results," *Journal of Computational Physics*, vol. 169, no. 2, pp. 463–502, 2001. [Online]. Available: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999100966361>
- [4] I. Pineda and O. Gwun, "Leaf modeling and growth process simulation using the level set method," *IEEE Access*, vol. 5, pp. 15 948–15 959, 2017.
- [5] G. E. Karniadakis, I. G. Kevrekidis, L. Lu, P. Perdikaris, S. Wang, and L. Yang, "Physics-informed machine learning," *Nature Reviews Physics*, vol. 3, no. 6, p. 422–440, May 2021. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1038/s42254-021-00314-5>
- [6] R. Chachalo, J. Astudillo, S. Infante, and I. Pineda, "Physics informed neural networks and gaussian processes-hamiltonian monte carlo to solve ordinary differential equations," in *Information and Communication Technologies*, S. Berrezueta-Guzman, R. Torres, J. L. Zambrano-Martinez, and J. Herrera-Tapia, Eds. Cham: Springer Nature Switzerland, 2025, pp. 253–268.
- [7] K. Zubov, Z. McCarthy, Y. Ma, F. Calisto, V. Pagliarino, S. Aze-glio, L. Bottero, E. Luján, V. Sulzer, A. Bharambe, N. Vinchhi, K. Balakrishnan, D. Upadhyay, and C. Rackauckas, "Neuralpde: Automating physics-informed neural networks (pinns) with error approximations," 2021.
- [8] J. J. Dabrowski, D. E. Pagendam, J. Hilton, C. Sanderson, D. MacKinlay, C. Huston, A. Bolt, and P. Kuhnert, "Bayesian physics informed neural networks for data assimilation and spatio-temporal modelling of wildfires," *Spatial Statistics*, vol. 55, p. 100746, Jun. 2023. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1016/j.spasta.2023.100746>
- [9] S. Osher and R. Fedkiw, *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*. Springer New York, 2003. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1007/b98879>
- [10] M. Raissi, P. Perdikaris, and G. 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, 2019. [Online]. Available: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999118307125>
- [11] K. Hornik, M. Stinchcombe, and H. White, "Multilayer feedforward networks are universal approximators," *Neural Networks*, vol. 2, no. 5, pp. 359–366, 1989. [Online]. Available: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0893608089900208>
- [12] M. Raissi, P. Perdikaris, and G. E. Karniadakis, "Physics informed deep learning (part I): data-driven solutions of nonlinear partial differential equations," *CoRR*, vol. abs/1711.10561, 2017. [Online]. Available: <http://arxiv.org/abs/1711.10561>
- [13] M. Sussman and E. Fatemi, "An efficient, interface-preserving level set redistancing algorithm and its application to interfacial incompressible fluid flow," *SIAM Journal on Scientific Computing*, vol. 20, no. 4, pp. 1165–1191, 1999. [Online]. Available: <https://doi.org/10.1137/S1064827596298245>
- [14] H. Rezatofighi, N. Tsoi, J. Gwak, A. Sadeghian, I. Reid, and S. Savarese, "Generalized intersection over union: A metric and a loss for bounding box regression," 2019. [Online]. Available: <https://arxiv.org/abs/1902.09630>
- [15] T. Chan and L. Vese, "Active contours without edges," *IEEE Transactions on Image Processing*, vol. 10, no. 2, pp. 266–277, 2001.
- [16] P. Getreuer, "Chan–Vese segmentation," *Image Processing On Line*, 2012.
- [17] A. Daw, J. Bu, S. Wang, P. Perdikaris, and A. Karpadne, "Mitigating propagation failures in physics-informed neural networks using retain-resample-release (r3) sampling," 2023. [Online]. Available: <https://arxiv.org/abs/2207.02338>