

Descubrimiento de leyes constitutivas a partir de datos mediante TensOpSciML, un marco de cálculo tensorial basado en Python para el aprendizaje automático científico.

Rubén Muñoz-Sierra¹, Jacobo Ayensa-Jiménez^{1, 2}, Manuel Doblaré¹

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: rmunoz@unizar.es

² Department of Mechanical Engineering, Universidad Politécnica de Madrid (UPM),
José Gutiérrez Abascal, 2, 28006 Madrid, Spain

Resumen

Se introduce TensOpSciML, una librería en Python orientada al cálculo tensorial y diferencial para aplicaciones de Aprendizaje Automático Científico (SciML). Su utilidad se demuestra aplicando Redes Neuronales Guiadas por Física con Variables Internas (PGNNIV) para la identificación de la ley constitutiva de materiales a partir de datos observables.

Cuerpo

En los últimos años, la transición metodológica desde enfoques paramétricos hacia modelos basados en datos ha cobrado gran importancia. Esto se debe al avance en los sistemas de adquisición de medidas experimentales, el aumento de la capacidad de cómputo, y el desarrollo de *software open-source* y especializado. Sin embargo, la utilización de modelos de aprendizaje automático clásico como son las Redes Neuronales Artificiales (ANNs) [1] convencionales en problemas físicos se enfrenta a desafíos en términos de generalización, demandas masivas de datos y opacidad metodológica. Una estrategia eficaz para resolver estas deficiencias consiste en acotar el espacio de soluciones, incluyendo de forma explícita las leyes físicas fundamentales dentro de la arquitectura de la red neuronal. De esta forma se fuerza el cumplimiento intrínseco de principios fundamentales, como los de conservación y simetría [2].

Las Redes Neuronales Guiadas por Física con Variables Internas (PGNNIV) [3] representan un avance en este ámbito. Estas habilitan la obtención de variables internas no medibles a partir de campos continuos de datos observables en problemas de mecánica computacional [4, 5]. No obstante, la formulación de estos problemas es matemáticamente compleja, y la traslación de operadores diferenciales rigurosos, tales como ecuaciones en derivadas

parciales y campos tensoriales de orden superior, a los algoritmos de aprendizaje profundo tradicionales exige arquitecturas computacionales optimizadas que soporten diferenciación automática y ejecución eficiente en unidades de procesamiento gráfico (GPU).

Para resolver este conflicto de compatibilidad y rendimiento se presenta TensOpSciML, una librería de Python que presenta una colección de operadores diferenciales fundamentados en esquemas de convolución de tipo diferencias finitas, permitiendo aproximaciones completamente diferenciables de campos tensoriales arbitrarios. Una innovación fundamental de TensOpSciML reside en el enriquecimiento de los tensores numéricos con metadatos matemáticos explícitos, lo cual transforma los arreglos/hipermatrices de datos en objetos matemáticos estructurados que preservan la geometría de la variedad subyacente. El marco conceptual implementado soporta álgebra lineal multilineal y operadores diferenciales esenciales en la mecánica computacional. Estos incluyen contracciones, productos internos y externos, así como gradientes, divergencias y rotacionales, en coordenadas euclídeas, y con capacidad para generalizarse a coordenadas curvilíneas y métricas arbitrarias. Aunque su núcleo operativo actual está desarrollado sobre PyTorch, la arquitectura de TensOpSciML es agnóstica respecto al motor de ejecución, asegurando su portabilidad a plataformas como TensorFlow o JAX.

Conclusiones

La principal contribución de este trabajo radica en el desarrollo y consolidación de TensOpSciML como una herramienta computacional robusta, versátil y escalable, con aplicaciones en el ámbito del Aprendizaje Automático Científico (SciML). Además, se han realizado aplicaciones a la metodología PGNNIV (una metodología de SciML

utilizada para la identificación de leyes constitutivas de materiales) como un caso de éxito para ilustrar su viabilidad, aunque el alcance de la librería es significativamente más amplio. TensOpSciML resuelve de manera general el desafío de integrar operaciones tensoriales complejas y derivadas espaciales rigurosas dentro de los modernos marcos de aprendizaje profundo con diferenciación automática de forma sencilla para el usuario. En definitiva, esta librería proporciona un puente computacional esencial entre el formalismo matemático de la física y la inteligencia artificial, dotando a la comunidad científica de un entorno flexible para desarrollar nuevas arquitecturas predictivas híbridas que garanticen el rigor matemático, la consistencia física y la eficiencia algorítmica.

Referencias y Citas

- [1]. CUOMO, Salvatore, et al. Scientific machine learning through physics-informed neural networks: Where we are and what's next. *Journal of Scientific Computing*, 2022, vol. 92, no 3, p. 88.
- [2]. RAISSI, Maziar; PERDIKARIS, Paris; KARNIADAKIS, George E. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational physics*, 2019, vol. 378, p. 686-707.
- [3]. AYENSA-JIMENEZ, Jacobo, et al. Prediction and identification of physical systems by means of physically-guided neural networks with meaningful internal layers. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2021, vol. 381, p. 113816.
- [4]. AYENSA-JIMÉNEZ, Jacobo; ORERA-ECHEVERRÍA, Javier; DOBLARE, Manuel. 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, p. 573-598.
- [5]. MUÑOZ-SIERRA, Rubén; AYENSA-JIMÉNEZ, Jacobo; DOBLARÉ, Manuel. On the application of physically-guided neural networks with internal variables to continuum problems. *Mechanics of Materials*, 2025, vol. 205, p. 105317.