

Estudos de Caso

Disciplina: MEC-502 – Tópicos Especiais em Mecânica dos Sólidos

Nome: Cassio Belo Clemente de Souza

Artigo utilizado:

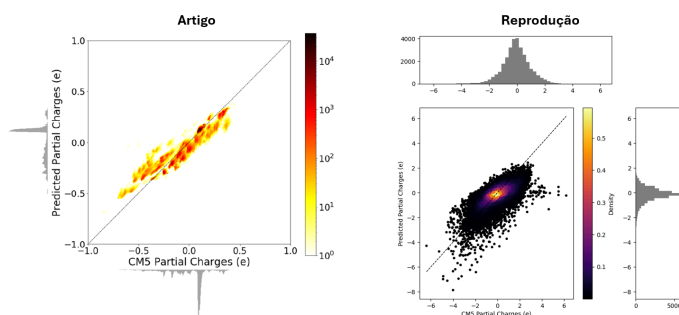
SHAO, Yunqi; HELLSTRÖM, Matti; MITEV, Pavlin D.; KNIJFF, Lisanne; ZHANG, Chao.
PINN: A Python Library for Building Atomic Neural Networks of Molecules and Materials.
Journal of Chemical Information and Modeling, Washington, DC, v. 60, n. 3, p. 1184–1193,
mar. 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.9b00994>. Acesso em: 16 ago. 2025.

- **Estudo de Casos 1: QM9 Dataset**

https://github.com/cassiobelo/Cassio_Souza_MEC502_2025.2/blob/1dd8adf426df746d3f835c7f73cd47d44f2de508/Estudo%20de%20Caso/CaseStudy1.ipynb

Aqui uma pequena diferença entre os resultados que fiz com os do artigo, o eixo X está rotulado como se fossem cargas CM5, quando na verdade os dados representam valores de energia interna U_0 , normalizados e depois desnormalizados.

Isso porque utilizei o Google Colab e seria bem complicado de utilizar a biblioteca CM5 que foi utilizada pelo artigo.



- **Estudo de Casos 2: Materials Project and Perovskite Datasets**

https://github.com/cassiobelo/Cassio_Souza_MEC502_2025.2/blob/1dd8adf426df746d3f835c7f73cd47d44f2de508/Estudo%20de%20Caso/CaseStudy2.rar

Aqui fiz de uma forma bem similar ao artigo. Como foi necessário usar bibliotecas externas, optei por usar o Jupyter Notebook.

