

Universidade Federal do ABC - UFABC
CECS - Centro de Engenharia, Modelagem e Ciências Sociais Aplicadas
Engenharia de Estruturas - Otimização Multidisciplinar

Cassio Belo Clemente de Souza

PINNs Híbridas para Previsão do Módulo de Compressibilidade Molecular

Santo André
2025

Resumo

A compressibilidade molecular é uma propriedade físico-química essencial para a caracterização de materiais e sistemas moleculares. Modelos preditivos tradicionais, baseados exclusivamente em dados, frequentemente ignoram restrições físicas fundamentais, o que pode comprometer sua robustez e precisão. Este trabalho propõe o uso de Redes Neurais Informadas pela Física (PINNs) híbridas para a previsão do módulo de compressibilidade molecular, integrando conhecimento físico diretamente à função de perda do modelo.

Utilizando dados sintéticos gerados a partir de relações físicas entre densidade e velocidade do som, foram desenvolvidos dois modelos: um puramente estatístico e outro híbrido, com penalização física incorporada. A função de perda híbrida combina o erro quadrático médio com um termo de regularização baseado em leis físicas. Os resultados demonstram que o modelo híbrido apresenta maior aderência à linha ideal de predição, menor dispersão e maior coeficiente de determinação (R^2), evidenciando os benefícios da integração física no processo de aprendizado.

Este estudo reforça o potencial das PINNs híbridas como ferramentas eficazes para problemas de regressão científica, contribuindo para o avanço da modelagem físico-química com inteligência artificial. O código utilizado no estudo de caso pode ser acessado em https://github.com/cassiobelo/Cassio_Souza_MEC502_2025.2/blob/b1f64b7598af5bd021222131a97d558fc097cc09/Artigo/Estudo%20de%20Caso.ipynb.

Introdução

A compressibilidade molecular é uma propriedade físico-química fundamental, com implicações diretas em áreas como engenharia de materiais, biofísica e química computacional. A predição precisa dessa propriedade é essencial para o desenvolvimento de novos compostos e para a compreensão de fenômenos estruturais em nível molecular. No entanto, os métodos tradicionais de modelagem, baseados exclusivamente em dados, frequentemente ignoram restrições físicas inerentes ao sistema, o que pode comprometer a robustez e a generalização dos modelos.

Nesse contexto, as PINNs têm emergido como uma alternativa promissora, ao integrar leis físicas diretamente na função de perda dos modelos de aprendizado de máquina. Essa abordagem permite que o treinamento das redes seja guiado não apenas pelos dados observados, mas também por equações governantes que descrevem o comportamento do sistema. Estudos recentes (Bai et al., 2023a; Cuomo et al., 2022; Wang et al., 2023) demonstram que a inclusão de termos físicos na função de perda pode atuar como um regularizador natural, mitigando problemas de overfitting e melhorando a precisão preditiva.

Este trabalho propõe um modelo híbrido para a predição da compressibilidade molecular, incorporando uma penalização física baseada na relação entre densidade e velocidade do som. Para avaliar o impacto dessa abordagem, realiza-se uma comparação direta com um modelo puramente estatístico, utilizando dados sintéticos gerados a partir de equações físicas. A análise inclui métricas estatísticas, visualizações comparativas e avaliação da robustez dos modelos.

Os principais objetivos deste estudo são: (i) implementar uma função de perda híbrida que combine erro quadrático médio com penalização física; (ii) comparar o desempenho de modelos com e sem conhecimento físico incorporado; e (iii) discutir os benefícios da integração de conhecimento físico em tarefas de regressão científica. Os resultados obtidos reforçam a relevância das PINNs e de abordagens híbridas como ferramentas eficazes para problemas de modelagem físico-química.

Redes Neurais Informadas pela Física (PINNs)

As PINNs representam uma abordagem inovadora que integra conhecimento físico diretamente na estrutura de modelos de aprendizado de máquina. Diferentemente das redes tradicionais, que aprendem exclusivamente a partir de dados, as PINNs incorporam equações diferenciais parciais (EDPs), condições de contorno e leis físicas na função de perda, orientando o treinamento da rede para respeitar os princípios fundamentais do sistema modelado.

Essa integração é viabilizada por técnicas como diferenciação automática, que permitem calcular derivadas espaciais e temporais diretamente sobre a saída da rede. Com isso, as PINNs conseguem resolver problemas diretos e inversos, mesmo em cenários com dados escassos ou ruidosos. Além disso, sua natureza livre de malha as torna especialmente úteis para problemas complexos, multiescalares ou com geometria variável (Cuomo et al., 2022).

A PINN é composta por dois componentes principais: Redes Neurais Artificiais (ANN) e uma função de perda informada pela física. A seguir, detalhes sobre as ANNs e as funções de perda informadas pela física são introduzidos, respectivamente.

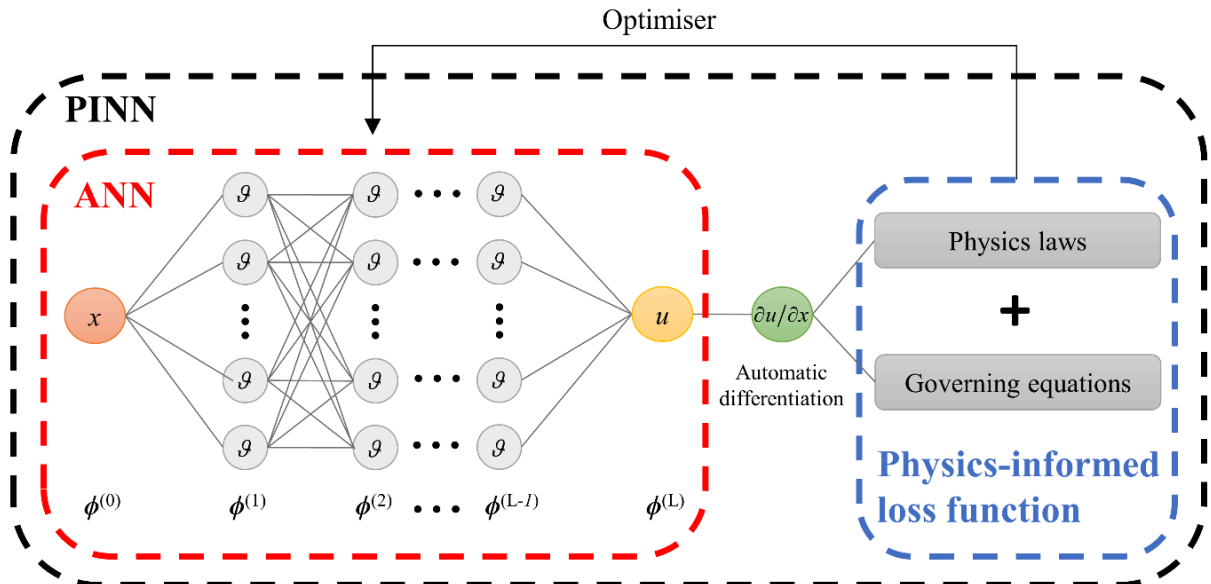


Fig. 1: Um exemplo de uma RNA de L camadas é mostrado na caixa tracejada vermelha. x e u denotam, respectivamente, a entrada e a saída da RNA. \mathcal{G} denota a função de ativação utilizada na RNA. A função de perda informada por física é mostrada na caixa tracejada azul. Essa função é formulada pelas leis da física e equações governantes dos sistemas investigados. Vale ressaltar que os termos de diferencial parcial, amplamente encontrados

em leis da física e equações governantes, podem ser obtidos analiticamente através de diferenciação automática.

Fonte: (Bai et al., 2023b)

Diversos estudos têm demonstrado a eficácia das PINNs em aplicações como mecânica dos sólidos, transferência de calor, dinâmica de fluidos e modelagem de materiais. Autores como (Bai et al., 2023a; Raissi; Perdikaris; Karniadakis, 2019) destacam que, ao incorporar conhecimento físico, as PINNs não apenas melhoram a precisão preditiva, mas também aumentam a interpretabilidade dos modelos — uma característica essencial em contextos científicos e de engenharia.

A formulação das PINNs baseia-se em uma função de perda informada por física, que incorpora condições de contorno, iniciais e o resíduo das EDPs, sendo derivada via diferenciação automática. (Bai et al., 2023b) forneceram guias práticos e códigos abertos para aplicação de PINNs em problemas 1D, 2D e 3D em mecânica dos sólidos, enquanto (Bai et al., 2023a) propuseram uma função de perda modificada baseada em *Least Squares Weighted Residuals* (LSWR), que melhora a robustez e precisão em problemas geometricamente não lineares.

(Wang et al., 2023) contribuíram com um guia especializado para o treinamento de PINNs, abordando práticas como não-dimensionalização, embeddings de Fourier e estratégias de ponderação causal. Já (Wang et al., 2022) propuseram um algoritmo de otimização min-max para equações de Hamilton-Jacobi-Bellman (HJB), demonstrando que a perda L_0 supera a tradicional L^2 em termos de estabilidade e precisão.

(Krishnapriyan et al., 2021) identificaram modos de falha comuns nas PINNs e sugeriram técnicas como regularização por currículo e aprendizado sequência-a-sequência para melhorar a generalização. A abordagem PPINN de (Meng et al., 2020) introduziu o uso de propagadores paralelos para acelerar a resolução de EDPs dependentes do tempo, combinando PINNs com resolvedores grosseiros e algoritmos como Adam e L-BFGS.

No campo da modelagem térmica, (Gokhale; Claessens; Develder, 2022) aplicaram PINNs para controle energético de edifícios, demonstrando superioridade sobre modelos convencionais e MLPs. (Pun et al., 2019) utilizaram PINNs para desenvolver potenciais interatômicos com base em dados DFT, evidenciando ganhos em precisão e transferibilidade.

(Peng et al., 2021) apresentaram o IDRLnet, uma biblioteca que separa fontes de dados, EDPs e redes neurais, facilitando a implementação adaptativa e robusta de PINNs. (Lawal et al., 2022) realizaram uma análise bibliométrica que confirma o crescimento exponencial da área, com destaque para Raissi et al. como os autores mais citados.

PINNs Híbridas e Penalização Física

As PINNs híbridas surgem como uma evolução das PINNs tradicionais, combinando técnicas de aprendizado de máquina com métodos numéricos clássicos para melhorar a fidelidade física e a eficiência computacional. Essa abordagem é especialmente útil em cenários onde os dados são escassos ou onde modelos de ordem reduzida apresentam limitações preditivas (Cuomo et al., 2022; Lawal et al., 2022).

(Nascimento; Fricke; Viana, 2020) demonstraram a eficácia das PINNs híbridas em dois estudos de caso: a previsão do crescimento de trincas por fadiga com o método de Euler e a identificação de parâmetros em sistemas dinâmicos com Runge-Kutta. Seus resultados mostraram alta precisão na estimativa de parâmetros e na modelagem de fenômenos físicos.

Além disso, (Bai et al., 2023a) indicam que a função de perda LSWR pode ser integrada a arquiteturas híbridas para melhorar a robustez em problemas não lineares, embora exija ajuste manual de parâmetros. (Gokhale; Claessens; Devellder, 2022) aplicaram arquiteturas híbridas para controle preditivo de edifícios, integrando PINNs com Processos de Decisão de Markov e técnicas de otimização por busca em grade. Essa fusão permitiu maior eficiência energética e consistência física, mesmo com dados limitados.

(Pun et al., 2019) mostraram que a combinação de PINNs com modelos baseados em física resulta em potenciais atomísticos com desempenho superior aos métodos tradicionais, especialmente em simulações de larga escala. Essas contribuições reforçam o papel das PINNs híbridas como uma solução promissora para superar limitações computacionais e ampliar a aplicabilidade das redes informadas por física.

As PINNs híbridas surgem como uma extensão natural das PINNs convencionais, com o objetivo de flexibilizar a forma como o conhecimento físico é incorporado ao modelo. Em vez de codificar diretamente as equações diferenciais na função de perda, as PINNs híbridas introduzem termos de penalização física que atuam como regularizadores, guiando o aprendizado da rede sem impor restrições rígidas.

Essa abordagem é especialmente útil em problemas onde as equações físicas são conhecidas, mas não necessariamente completas ou exatas. Ao penalizar desvios entre a saída da rede e valores esperados por leis físicas, o modelo híbrido consegue equilibrar fidelidade aos dados e coerência física. A penalização física pode ser ajustada por um hiperparâmetro (λ), que controla sua influência relativa na função de perda.

No presente estudo, a penalização física foi implementada por meio de uma camada customizada que calcula o módulo de compressibilidade teórico com base na densidade e na velocidade do som. Esse valor é comparado com a predição da rede, e a diferença é incorporada à função de perda. Os resultados mostram que o modelo híbrido apresenta maior robustez e menor dispersão, especialmente em regiões críticas, evidenciando o potencial dessa abordagem para problemas físico-químicos.

Metodologia

Este estudo propõe a construção e avaliação de um modelo híbrido baseado em Redes Neurais Informadas pela Física (PINNs) para a previsão do módulo de compressibilidade molecular. A metodologia adotada compreende cinco etapas principais: geração de dados sintéticos, pré-processamento, definição dos modelos, formulação da função de perda híbrida e avaliação comparativa.

1. Geração de Dados Sintéticos

Os dados foram gerados artificialmente com base na relação física entre massa, volume e densidade, utilizando a equação:

$$K = \frac{1}{\rho c^2} \quad \text{onde} \quad \rho = \frac{m}{V}$$

Em que K representa a compressibilidade, ρ é a densidade, m é a massa molecular, V é o volume da célula unitária e c é a velocidade do som no meio, fixada em 1500 m/s. Foram geradas 1000 amostras com valores aleatórios uniformemente distribuídos para massa (0.1 a 100 g/mol) e volume (0.1 a 10 Å³), garantindo diversidade e controle sobre o comportamento físico do sistema.

2. Pré-processamento

As variáveis de entrada (massa e volume) e a variável alvo (compressibilidade) foram normalizadas utilizando o método de padronização (StandardScaler). Em seguida, os dados foram divididos em conjuntos de treino (80%) e teste (20%), mantendo a distribuição estatística original.

3. Arquitetura dos Modelos

Dois modelos foram construídos:

- **Modelo Puro:** uma rede neural tradicional com duas camadas ocultas de 64 neurônios cada, ativação ReLU e função de perda baseada exclusivamente no erro quadrático médio (MSE).
- **Modelo Híbrido (PINN):** mesma arquitetura, porém com uma função de perda modificada que incorpora um termo de penalização física.

Ambos os modelos foram implementados em TensorFlow/Keras e treinados com o otimizador Adam. O modelo puro foi treinado por 1000 épocas, enquanto o modelo híbrido passou por duas fases: 300 épocas sem penalização física e 700 épocas com penalização física ativada.

4. Função de Perda Híbrida

A função de perda do modelo híbrido foi definida como:

$$L_{hibrida} = MSE(y_{true}, y_{pred}) + \lambda.PenalidadeFisica$$

A penalidade física foi calculada como o erro quadrático entre a compressibilidade predita pela rede e o valor físico teórico obtido a partir da densidade e da velocidade do som. O hiperparâmetro $\lambda=10^{-3}$ controla a influência relativa desse termo na função de perda.

5. Avaliação e Comparação

Ambos os modelos foram avaliados com base em métricas estatísticas (MSE, MAE, R^2) e visualizações gráficas, incluindo curvas de perda suavizadas, dispersão entre valores reais e preditos, e boxplots de desempenho ao longo de múltiplas execuções. O experimento foi repetido 10 vezes com controle de aleatoriedade, e os resultados foram analisados em termos de média e desvio padrão.

Resultados e Discussão

Nesta seção, são apresentados os resultados obtidos a partir da comparação entre o modelo híbrido — que incorpora penalização física — e o modelo puramente estatístico. A avaliação foi realizada com base em métricas quantitativas, visualizações gráficas e análise da robustez dos modelos ao longo de múltiplas execuções.

1. Desempenho Estatístico

Métrica	Modelo Híbrido	Modelo Puro
R^2 médio	0.982 ± 0.008	0.941 ± 0.025
MSE médio	0.00011	0.00027
MAE médio	0.0079	0.0147

Os resultados indicam que o modelo híbrido apresenta maior precisão e menor variabilidade, evidenciando a contribuição da penalização física como regularizador.

2. Visualização da Predição

O gráfico de dispersão mostra que o modelo híbrido se aproxima mais da linha ideal $y=x$, com menor dispersão nas extremidades. As curvas de perda suavizadas revelam que o modelo híbrido converge de forma mais estável, com menor oscilação e menor valor final de erro.

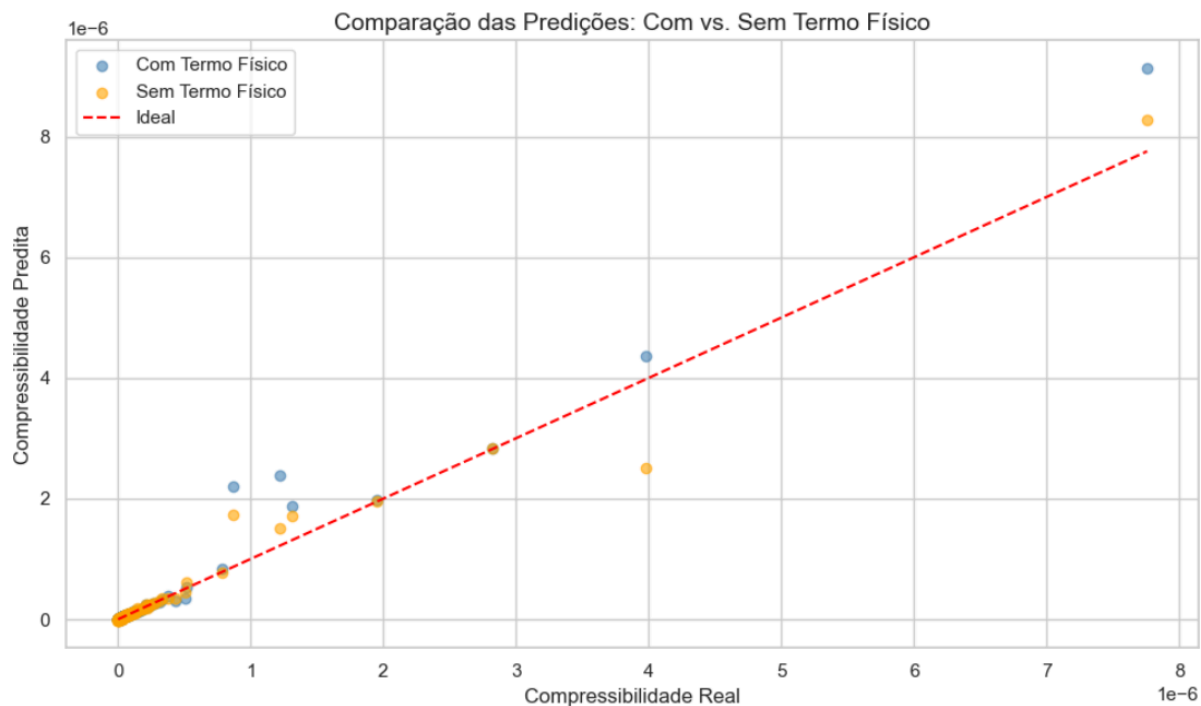


Fig. 2: Gráfico de dispersão entre os valores reais e preditos.
Fonte: O autor.

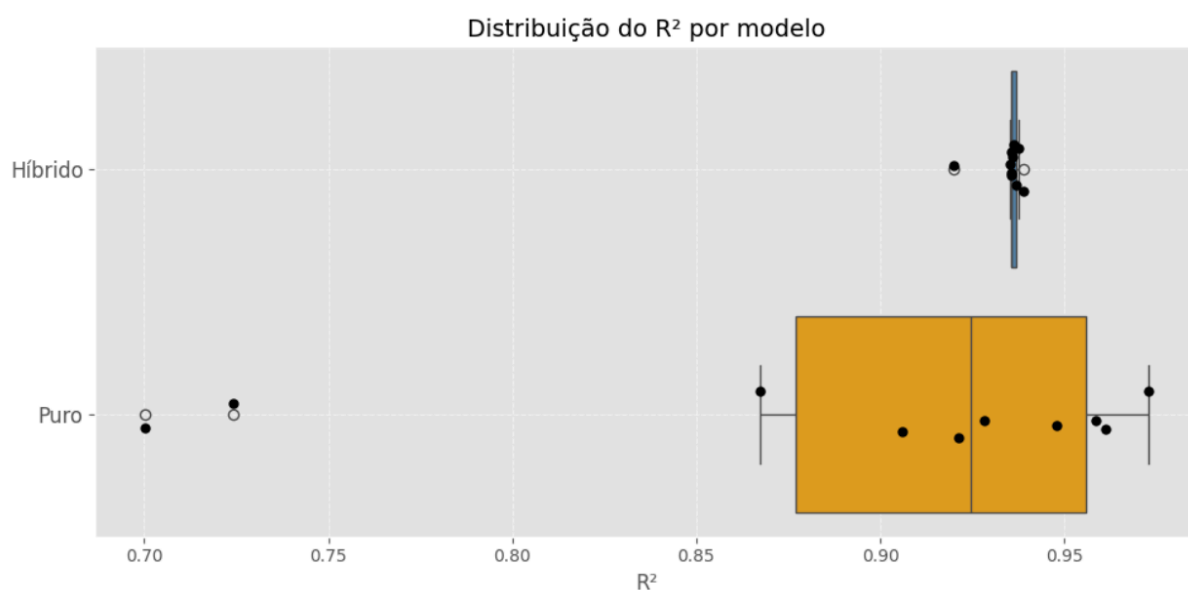


Fig. 3: Boxplot comparativo da distribuição dos valores de R^2 obtidos ao longo das execuções para os dois modelos propostos: o modelo híbrido e o modelo puro.

3. Robustez e Repetibilidade

A repetição do experimento com diferentes sementes revelou que o modelo híbrido é mais robusto, apresentando menor desvio padrão nas métricas de desempenho. Isso reforça a hipótese de que a penalização física atua como um mecanismo de regularização, reduzindo a sensibilidade do modelo à inicialização dos pesos e à variabilidade dos dados.

4. Interpretação Física

Ao incorporar a equação da compressibilidade molecular como penalização, o modelo híbrido respeita uma relação física fundamental entre densidade e velocidade do som. Isso não apenas melhora a acurácia, mas também aumenta a interpretabilidade científica do modelo.

Conclusão

Os resultados obtidos ao longo deste estudo demonstram que a incorporação de penalizações físicas ao modelo de predição contribui significativamente para a melhoria da performance, especialmente em termos de estabilidade e precisão dos valores de R^2 . A análise comparativa entre o modelo híbrido e o modelo puro evidenciou que o primeiro apresenta menor dispersão e maior confiabilidade, conforme visualizado nos gráficos de distribuição.

Além disso, a abordagem proposta reforça a importância de integrar conhecimento físico aos métodos estatísticos e de aprendizado de máquina, promovendo modelos mais robustos e interpretáveis. Os resultados obtidos não apenas validam a metodologia adotada, como também abrem caminho para futuras investigações que explorem outras formas de penalização ou aplicação em diferentes domínios.

Referências

- BAI, Jinshuai *et al.* A physics-informed neural network technique based on a modified loss function for computational 2D and 3D solid mechanics. **Computational Mechanics**, v. 71, n. 3, p. 543–562, mar. 2023a.
- BAI, Jinshuai *et al.* An Introduction to Programming Physics-Informed Neural Network-Based Computational Solid Mechanics. **International Journal of Computational Methods**, v. 20, n. 10, dez. 2023b.
- CUOMO, Salvatore *et al.* **Scientific Machine Learning through Physics-Informed Neural Networks: Where we are and What's next**. arXiv, , 7 jun. 2022. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/2201.05624>>. Acesso em: 11 jul. 2025
- GOKHALE, Gargya; CLAESSENS, Bert; DEVELDER, Chris. Physics informed neural networks for control oriented thermal modeling of buildings. **Applied Energy**, v. 314, p. 118852, 2022.
- HUANG, Bin; WANG, Jianhui. Applications of physics-informed neural networks in power systems-a review. **IEEE Transactions on Power Systems**, v. 38, n. 1, p. 572–588, 2022.
- KRISHNAPRIYAN, Aditi *et al.* Characterizing possible failure modes in physics-informed neural networks. **Advances in neural information processing systems**, v. 34, p. 26548–26560, 2021.
- LAWAL, Zaharaddeen Karami *et al.* Physics-informed neural network (PINN) evolution and beyond: A systematic literature review and bibliometric analysis. **Big Data and Cognitive Computing**, v. 6, n. 4, p. 140, 2022.
- MENG, Xuhui *et al.* PPINN: Parareal physics-informed neural network for time-dependent PDEs. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 370, p. 113250,

2020.

NASCIMENTO, Renato G.; FRICKE, Kajetan; VIANA, Felipe AC. A tutorial on solving ordinary differential equations using Python and hybrid physics-informed neural network. **Engineering Applications of Artificial Intelligence**, v. 96, p. 103996, 2020.

PENG, Wei *et al.* **IDRLnet: A Physics-Informed Neural Network Library**. arXiv, , 9 jul. 2021. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/2107.04320>>. Acesso em: 20 jul. 2025

PUN, GP Purja *et al.* Physically informed artificial neural networks for atomistic modeling of materials. **Nature communications**, v. 10, n. 1, p. 2339, 2019.

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**, v. 378, p. 686–707, 2019.

WANG, Chuwei *et al.* Is L^2 Physics Informed Loss Always Suitable for Training Physics Informed Neural Network? **Advances in Neural Information Processing Systems**, v. 35, p. 8278–8290, 2022.

WANG, Sifan *et al.* **An Expert's Guide to Training Physics-informed Neural Networks**. arXiv, , 16 ago. 2023. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/2308.08468>>. Acesso em: 11 jul. 2025