

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

Cassio Belo Clemente de Souza

Aplicações Específicas de PINNs

Santo André
2025

Introdução

A Inteligência Artificial (IA) tem emergido como uma força transformadora em diversos campos científicos e de engenharia, e a Mecânica Computacional não é exceção. Tradicionalmente, a Mecânica Computacional se baseia em métodos numéricos robustos, como o Método dos Elementos Finitos (MEF), o Método dos Volumes Finitos (MVF) e o Método dos Elementos de Contorno (MEC) para resolver equações diferenciais que governam o comportamento de sólidos, fluidos e estruturas. Esses métodos, embora extremamente poderosos, frequentemente demandam um alto custo computacional, especialmente para problemas complexos, multi físicos, multiescala ou em tempo real.

As Redes Neurais Informadas pela Física (PINNs), sigla para Physics-Informed Neural Networks, demonstram uma notável eficácia na resolução de Equações Diferenciais Parciais (EDPs). Além de sua capacidade intrínseca de lidar com tais equações, estudos recentes indicam que as PINNs possuem uma flexibilidade significativa, permitindo sua customização e adaptação para abordar uma ampla variedade de problemas específicos, desde a modelagem de fenômenos complexos até a otimização de sistemas.

As PINNs representam uma ferramenta poderosa e versátil para a solução de equações diferenciais, problemas inversos e também para a integração de dados e leis físicas em modelos de aprendizado de máquina. No entanto, é reconhecido que há uma necessidade contínua de aprofundar as investigações, visando aprimorar os procedimentos de treinamento dessas redes, tornando-os mais eficientes e robustos. A expansão do escopo das PINNs para resolver sistemas de múltiplas equações é uma fronteira de pesquisa promissora, que poderia desbloquear novas aplicações e avanços.

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.

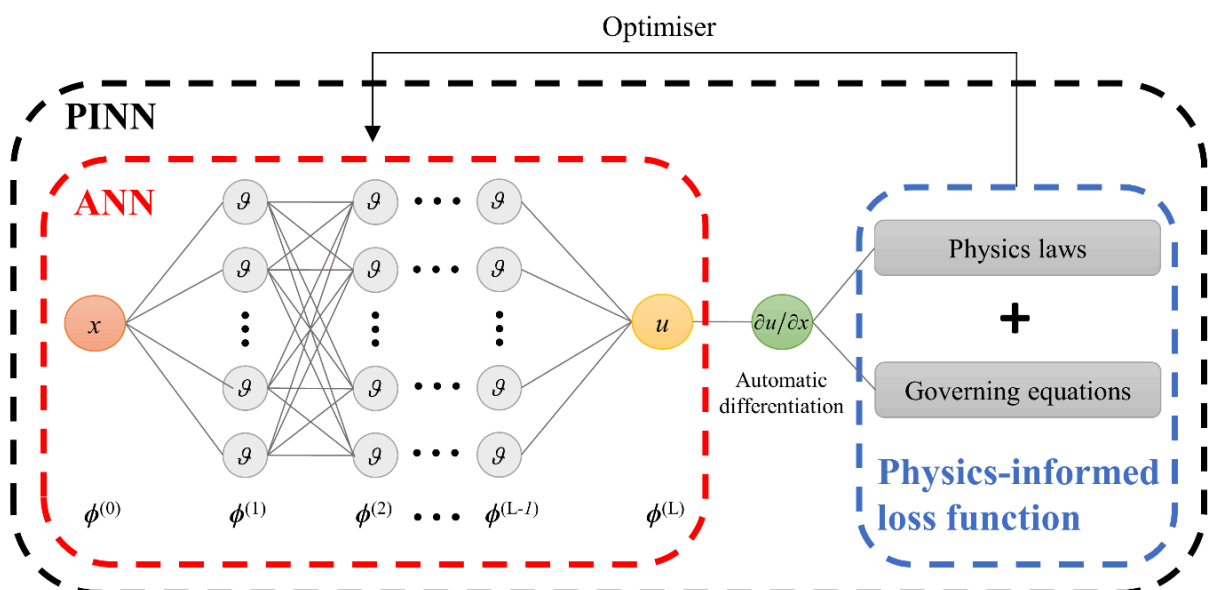


Fig. 1: Uma rede neural informada por física é composta por dois componentes principais, ou seja, uma rede neural artificial (RNA) e uma função de perda informada por física. Um exemplo de uma RNA de L camadas é mostrado na caixa tracejada vermelha. x e u

denotam, respectivamente, a entrada e a saída da RNA. ϑ 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)

Objetivos da Revisão

Os objetivos centrais desta revisão bibliográfica são múltiplos e visam aprofundar a compreensão sobre o campo das PINNs. Primeiramente, propõe-se realizar um estudo detalhado do processo de inovação que impulsionou o desenvolvimento das PINNs, traçando sua evolução desde os conceitos iniciais até as implementações mais recentes.

Em seguida, a revisão busca analisar criticamente o desenvolvimento das PINNs e suas diversas variantes, destacando as contribuições e modificações que cada uma trouxe para aprimorar sua performance e aplicabilidade. Por fim, dedica atenção especial à exploração de suas inúmeras e promissoras aplicações potenciais em variadas disciplinas científicas e de engenharia.

Metodologia da Revisão

Como estratégia de busca para a revisão bibliográfica desse artigo, foi utilizado o site <https://scholar.google.com/> utilizando como palavra-chave as palavras “physically informed neural network” and “physics informed neural network” e aplicando o critério de número de citações como classificação. Depois, foi utilizado o site <https://www.connectedpapers.com/> para verificar artigos conectados àqueles selecionados. Por fim, foi utilizado o site <https://www.scholarcy.com/> para auxiliar na análise e filtro dos artigos selecionados.

Linhas de Pesquisa

A pesquisa em PINNs avança rapidamente, com diversos métodos sendo explorados para otimizar seu treinamento e aplicação. (Cuomo et al., 2022), por exemplo, demonstram como treinar PINNs minimizando uma função de perda que integra condições iniciais e de contorno, além do resíduo de EDPs, utilizando diferenciação automática para derivar as redes em relação às coordenadas espaço-temporais. Essa abordagem fundamental permite que as PINNs capturem as leis físicas subjacentes aos problemas.

Na aplicação prática, (Bai et al., 2023b) focam na implementação de funções de perda informadas pela física para a mecânica dos sólidos computacional, fornecendo explicações detalhadas e programas em Python com TensorFlow para problemas 1D, 2D e 3D. Complementarmente, (Wang et al., 2023) exploram técnicas avançadas para o treinamento de PINNs, como a não-dimensionalização, o uso de Fourier feature embeddings com perceptrons multicamadas (MLPs) e a aplicação de estratégias de treinamento causal com esquemas de ponderação de perda, visando melhorar a robustez e eficiência dos modelos.

Para a modelagem de materiais, (Pun et al., 2019) combinaram aprendizado de máquina com PINNs para desenvolver potenciais atômicos, treinando-os com grandes conjuntos de dados DFT e utilizando validação cruzada para evitar o overfitting. Em relação à análise de falhas e otimização, (Krishnapriyan et al., 2021) investigaram a superfície de perda de modelos PINN e propuseram soluções como a regularização por currículo e o aprendizado sequência-a-sequência, utilizando uma rede neural de 4 camadas totalmente conectadas com 50 neurônios por camada e função de ativação tangente hiperbólica.

A complexidade de resolver EDPs dependentes do tempo também é abordada pela Rede Neural Informada pela Física Parareal (PPINN), sigla para de (Meng et al., 2020), que emprega propagadores paralelos – um resolvidor CG serial e múltiplas PINNs "finas" – para obter soluções de alta resolução. Essa metodologia utiliza o algoritmo parareal, PINNs e diversos resolvidores "grosseiros", além de otimizadores como Adam e L-BFGS, para treinar as redes neurais de forma eficiente.

(Lawal et al., 2022) empregaram a estrutura PRISMA e análises bibliométricas para identificar as principais fontes de periódicos, autores com altas citações e países com muitas publicações sobre PINNs, abrangendo publicações de 2019 a meados de 2022 nas bases de dados Scopus e Web of Science. Por outro lado, (Nascimento; Fricke; Viana, 2020) focaram na implementação de PINNs híbridas usando TensorFlow e Keras, com ênfase em métodos de integração numérica como o método de Euler e Runge-Kutta, além de ajustar coeficientes em equações diferenciais ordinárias de segunda ordem com base em dados observados.

Outras pesquisas, como a de (Peng et al., 2021), introduziram o IDRLnet, uma estrutura que separa definições de fontes de dados, EDPs e redes neurais, oferecendo suporte a comportamentos definidos pelo usuário e procedimentos de amostragem adaptativos. Já (Wang et al., 2022) investigaram a estabilidade de PINNs para equações de Hamilton-Jacobi-Bellman (HJB), propondo um novo algoritmo de treinamento de PINN que minimiza a perda L^∞ por meio de um procedimento de otimização min-max, com base em análises teóricas e experimentos empíricos usando PyTorch.

Por fim, a integração de conhecimento físico prévio na arquitetura das redes é destacada por (Gokhale; Claessens; Develder, 2022), que desenvolveram e avaliaram arquiteturas como PhysNet e PhysReg MLP para modelagem térmica de edifícios, comparando-as com MLPs convencionais e otimizando hiperparâmetros através de busca em grade. Além disso, (Bai et al., 2023a) introduziram uma função de perda modificada baseada no método dos Mínimos Quadrados (LSWR) para resolver problemas geométricos não lineares em mecânica dos sólidos, empregando esquemas de integração numérica como a Triangulação de Delaunay para distribuição de pontos de amostragem.

Autores e contribuições relevantes

As PINNs representam uma área emergente no aprendizado de máquina científico, combinando o poder das redes neurais artificiais com o conhecimento de leis físicas. Esta abordagem é aplicada em diversas áreas, como a mecânica dos sólidos, onde (Bai et al., 2023a, 2023b) aprimoraram a metodologia e forneceram guias de programação. Além disso, a relevância das PINNs se estende à modelagem térmica de edifícios para controle

(Gokhale; Claessens; Develder, 2022) e à modelagem atomística de materiais (Pun et al., 2019), demonstrando sua versatilidade em diferentes escalas e aplicações práticas.

A pesquisa em PINNs também aborda a compreensão de suas limitações e a otimização de seu desempenho. (Krishnapriyan et al., 2021) investigaram os modos de falha dessas redes, enquanto (Meng et al., 2020) desenvolveram o PPINN para lidar com equações diferenciais parciais dependentes do tempo de forma mais eficiente. Para auxiliar a comunidade, (Huang; Wang, 2022) elaboraram um guia prático para o treinamento de PINNs, consolidando as melhores práticas.

O trabalho de (Lawal et al., 2022) destaca a ampla utilização das PINNs em ciência computacional e engenharia, apontando que 120 artigos foram selecionados para o estudo, com Raissi et al. como os autores mais citados e o Journal of Computational Physics como a principal publicação na área. Além disso, a pesquisa identifica técnicas de otimização de desempenho das PINNs, como o uso de métodos híbridos e decomposição de domínio.

Finalmente, a área está em constante evolução, com (Cuomo et al., 2022) oferecendo uma visão abrangente do estado atual e dos futuros desafios das PINNs. A formulação dessas redes é baseada em uma função de perda informada por física, que incorpora leis e equações governantes dos sistemas, e seus termos diferenciais podem ser obtidos analiticamente através de diferenciação automática, o que otimiza o processo de aprendizado.

Aplicações Recentes

As PINNs são uma ferramenta versátil para problemas em mecânica computacional e outras áreas. (Cuomo et al., 2022), em sua revisão, destacam a capacidade das PINNs de resolver uma gama de problemas fundamentais, incluindo EDPs, problemas diretos e inversos em modelagem física, e o tratamento de equações fracionárias, integro-diferenciais e estocásticas, além da modelagem de fenômenos complexos. Essa visão abrangente ressalta a adaptabilidade das PINNs para diversas formulações matemáticas.

Em aplicações mais específicas, as PINNs são exploradas para simular o comportamento de materiais e estruturas. (Bai et al., 2023b) apresentam exemplos numéricos detalhados para problemas de sólidos em 1D, 2D e 3D, como o alongamento de hastes e placas. (Pun et al., 2019) utilizam o "potencial PINN" para a modelagem atomística de materiais em larga escala, prevendo energias e forças, reproduzindo propriedades físicas e simulando fenômenos como o crescimento de trincas. Para o domínio da transferência de calor, (Gokhale; Claessens; Develder, 2022) aplicam PINNs na construção de modelos térmicos de edifícios, garantindo consistência física e eficiência para aplicações de controle.

Contudo, a aplicação das PINNs em problemas complexos não é isenta de desafios. (Krishnapriyan et al., 2021) alertam que a abordagem "padrão" (Vanilla PINN) pode falhar em regimes de parâmetros mais desafiadores, mesmo para problemas com soluções analíticas simples, como equações de Convecção, Reação e Difusão. Por outro lado, para problemas dependentes do tempo, (Meng et al., 2020) focam na resolução de EDPs dinâmicas, enquanto (Wang et al., 2023) concentram-se em EDPs que servem como benchmarks para testar e validar as melhores práticas de treinamento de PINNs. Essas

pesquisas demonstram um esforço contínuo em refinar as metodologias das PINNs para superar suas limitações e expandir seu campo de aplicação.

Técnicas de IA aplicadas

As PINNs emergem como a técnica central de IA na resolução de problemas de mecânica computacional e outras áreas científicas, conforme amplamente discutido por (Cuomo et al., 2022). Eles destacam a versatilidade das PINNs, que incorporam Redes Neurais Feed-forward (FFNNs/MLPs) e utilizam Diferenciação Automática (AD) para otimização baseada em gradiente. Essa abordagem fundamental é estendida com variantes como PCNNs, VPINNs e CPINNs, e se integra com outras técnicas de Deep Learning, incluindo Redes Neurais Bayesianas (BNNs) e Redes Adversariais Generativas (GANs), permitindo lidar com complexos problemas multidisciplinares através de aprendizado multitarefa.

A aplicação prática e o aprimoramento das PINNs são evidenciados por diversos estudos. (Bai et al., 2023b) aprofundam-se nas funções de perda informadas pela física e na imposição de condições de contorno fixas para problemas de mecânica dos sólidos, enquanto (Wang et al., 2023) focam em melhores práticas de treinamento de Redes Neurais Profundas para PINNs, abordando escolhas de arquitetura e estratégias para patologias de treinamento. No contexto da modelagem atômica de materiais, (Pun et al., 2019) desenvolveram um "potencial PINN" que combina regressão por rede neural com modelos baseados em física e treinamento com dados DFT.

Além disso, a otimização e a superação de desafios são temas recorrentes. (Krishnapriyan et al., 2021) propõem técnicas de regularização (como regularização por currículo e aprendizado sequência-a-sequência) para aprimorar a aplicação de PINNs em problemas de mecânica computacional. Para problemas dependentes do tempo, (Meng et al., 2020) exploram o Parallel-in-Time (Algoritmo Parareal) integrado às PINNs. Já (Gokhale; Claessens; Develder, 2022) aplicam PINNs e ANNs na modelagem térmica de edifícios, utilizando também Processos de Decisão de Markov (MDP) e busca em grade para otimização. Complementarmente, (Bai et al., 2023a) contribuem com modificações na função de perda (LSWR) e esquemas de integração numérica para problemas de mecânica dos sólidos.

Resultados e contribuições

As PINNs se destacam pela sua eficácia e versatilidade na resolução de EDPs, incluindo problemas diretos e inversos, e por sua natureza livre de malha, conforme apontado por (Cuomo et al., 2022). Essa inovação na integração de dados e física tem demonstrado grande potencial em diversas áreas. Contribuições específicas em mecânica dos sólidos incluem os trabalhos de (Bai et al., 2023b), que evidenciam a eficácia de funções de perda e a precisão do campo de tensão das PINNs, além de sua eficiência computacional e facilidade de implementação, e de (Bai et al., 2023a), que introduzem uma função de perda modificada (LSWR) para problemas geometricamente não lineares, melhorando a precisão e estabilidade.

A comunidade de pesquisa tem focado também em refinar as metodologias e identificar as melhores práticas. (Wang et al., 2023) validaram melhores práticas de

treinamento de PINNs, obtendo resultados de ponta em problemas benchmark desafiadores e fornecendo um guia útil para usuários. Por outro lado, (Krishnapriyan et al., 2021) contribuíram significativamente ao identificar modos de falha em PINNs e propor soluções eficazes, como a regularização por currículo e o aprendizado sequência-a-sequência, o que é crucial para o diagnóstico e a robustez dos modelos.

Em outros trabalhos, (Nascimento; Fricke; Viana, 2020) demonstram a eficácia de PINNs híbridas em dois estudos de caso: a integração do crescimento de trincas por fadiga com o método de Euler e a identificação de parâmetros de um sistema dinâmico de dois graus de liberdade usando Runge-Kutta. Seus resultados confirmam a precisão na estimativa do crescimento de trincas e na identificação de parâmetros do modelo, resultando em previsões precisas. Já (Peng et al., 2021) aplicaram com sucesso o IDRLnet em diversos problemas, incluindo a identificação robusta de equações de onda e a resolução de equações integro-diferenciais, mostrando sua capacidade de lidar com problemas inversos ruidosos e minimização variacional. Por fim, (Wang et al., 2022) apresentaram um algoritmo que aprimora significativamente a precisão das PINNs na resolução de problemas de controle ótimo, comprovando que a perda L^∞ é mais eficaz que a perda L_2 para o treinamento de PINNs em equações HJB.

Além disso, a aplicação das PINNs abrange desde a modelagem atomística de materiais, onde (Pun et al., 2019) demonstraram melhorias drásticas na transferibilidade e precisão em nível DFT, até a aceleração da resolução de EDPs transientes com a abordagem PPINN proposta por (Meng et al., 2020). No campo da engenharia térmica, (Gokhale; Claessens; Develder, 2022) pioneiramente aplicaram PINNs para controle térmico de edifícios, revelando seu desempenho superior e consistência física em modelagem, com validação em dados reais e simulados. Essa vasta gama de resultados sublinha a capacidade das PINNs de oferecer soluções computacionais eficientes e precisas em múltiplos domínios científicos e de engenharia.

Comparação com abordagens diferentes

A comparação das PINNs com métodos numéricos tradicionais, como MEF e MVF, é um ponto crucial na literatura. (Cuomo et al., 2022) destacam as vantagens das PINNs, como sua natureza livre de malha, a capacidade inata de resolver problemas inversos e a facilidade de integrar informações físicas. No entanto, reconhecem desvantagens como o alto custo computacional de treinamento em comparação com a avaliação direta de soluções de EDPs mais simples e a dificuldade em determinar parâmetros de rede ideais. Além disso, o artigo compara explicitamente variantes de PINNs, explorando como diferentes funções de perda, ativação e otimizadores afetam a qualidade e eficiência dos resultados.

Em estudos mais específicos, as comparações focam no aprimoramento da própria metodologia PINN e em suas aplicações. (Bai et al., 2023b) analisam a precisão, derivadas necessárias e eficiência computacional de diferentes funções de perda informadas pela física, abordando o problema do desequilíbrio de treinamento. Da mesma forma, (Bai et al., 2023a) comparam a PINN padrão com uma PINN que utiliza uma função de perda LSWR (Least Squares Weighted Residuals) modificada, buscando melhorias em precisão e estabilidade para problemas não lineares. No contexto da modelagem de materiais, (Pun et al., 2019) confrontam seu "potencial PINN" com potenciais interatômicos tradicionais e

modelos emergentes de aprendizado de máquina, demonstrando a superioridade da abordagem híbrida.

A eficácia das PINNs também é validada através de comparações com outras técnicas. (Meng et al., 2020) demonstram a aceleração proporcionada pela abordagem PPINN em relação a métodos sequenciais padrão e diferentes resolvidores "grosseiros", evidenciando a flexibilidade e o desempenho otimizado. Para modelagem térmica de edifícios, (Gokhale; Claessens; Develder, 2022) comprovam a superioridade das PINNs em relação a modelos de redes neurais convencionais e modelos de caixa cinza tradicionais, ressaltando sua robustez e consistência física. Por fim, (Krishnapriyan et al., 2021), embora não comparem com métodos numéricos tradicionais, concentram-se na análise da superfície de perda das PINNs, propondo técnicas para aprimorar sua metodologia e resolver os desafios de otimização inerentes a esses modelos.

Avanços e inovações

As PINNs representam uma das inovações mais significativas no aprendizado de máquina científico, conforme destacado por (Cuomo et al., 2022). Sua concepção integra Diferenciação Automática para resolver eficazmente problemas inversos e equações complexas, além de permitir a quantificação de incertezas e o desenvolvimento contínuo de variantes, o que as posiciona como transformadoras na mecânica computacional e outras áreas.

No campo da mecânica dos sólidos, as PINNs têm visto avanços notáveis. (Bai et al., 2023b) inovaram ao estender e programar PINNs para essa área, fornecendo um guia prático com código aberto e explicações detalhadas, e comparando exaustivamente funções de perda. Complementarmente, (Bai et al., 2023a) introduziram uma função de perda LSWR modificada que aprimora significativamente a robustez e precisão das PINNs em problemas geometricamente não lineares.

A robustez e usabilidade das PINNs também são áreas de foco para inovação. (Wang et al., 2023) concentram-se em identificar e mitigar patologias de treinamento, oferecendo diretrizes de especialistas e recursos de código aberto para estabelecer baselines fortes e aprimorar a experiência do usuário. Para problemas de otimização e limitações, (Krishnapriyan et al., 2021) contribuíram com um diagnóstico profundo dos modos de falha das PINNs e propuseram soluções inovadoras de treinamento, como a regularização por currículo e o aprendizado sequência-a-sequência.

Além disso, as inovações em PINNs abrangem a fusão com outras metodologias e aplicações pioneiras. (Meng et al., 2020) combinaram PINNs com métodos paralelos no tempo (PPINN), acelerando simulações físicas complexas e expandindo o potencial das PINNs para problemas dinâmicos. Já na modelagem térmica de edifícios para controle, (Gokhale; Claessens; Develder, 2022) realizaram uma aplicação pioneira de PINNs, superando modelos tradicionais e de caixa cinza e habilitando o controle preditivo avançado. Finalmente, (Pun et al., 2019) inovaram na modelagem atomística, propondo o "potencial PINN" que integra profundamente física e machine learning, resultando em melhorias sem precedentes na transferibilidade e precisão.

Lacunas e Limitações

Apesar do vasto potencial das PINNs, diversas limitações ainda desafiam sua aplicação generalizada. (Cuomo et al., 2022) apontam para o alto custo computacional do treinamento, a dificuldade em determinar os parâmetros ideais da rede para EDPs específicas e a importância crítica da posição dos locais de treinamento. Similarmente, (Bai et al., 2023b) observam que a insuficiência de dados pode levar a falhas graves e que certas funções de perda, embora exijam menos derivadas, podem gerar grandes erros em previsões de tensão, sendo seus estudos limitados por problemas simplificados em 1D e 2D.

Outros estudos aprofundam-se nas nuances das limitações das PINNs. (Wang et al., 2023) alertam que seu pipeline de treinamento pode não ser universal e que o uso de descida de gradiente full-batch pode induzir overfitting nos resíduos das EDPs. Para a modelagem atomística, (Pun et al., 2019) destacam as limitações de precisão e transferibilidade de potenciais tradicionais e de aprendizado de máquina, ressaltando que o desempenho do potencial PINN depende criticamente da qualidade e diversidade do conjunto de dados de treinamento. Por sua vez, (Krishnapriyan et al., 2021), embora proponham soluções inovadoras, reconhecem que suas propostas podem não ser eficazes para todos os tipos de problemas, especialmente os mais complexos.

Finalmente, a otimização e aplicação em cenários específicos também revelam desafios. A abordagem PPINN de (Meng et al., 2020), por exemplo, exige um resolvidor de "grão-grosso" (CG) eficiente para garantir precisão e acelerações satisfatórias. No campo da modelagem térmica de edifícios, (Gokhale; Claessens; Develder, 2022) observam que o desempenho das arquiteturas PINN degrada com o aumento do horizonte de previsão e que as vantagens sobre MLPs convencionais diminuem com o aumento do tamanho dos dados. Além disso, (Bai et al., 2023a) apontam que a função de perda LSWR, que aprimora a robustez, requer um parâmetro determinado manualmente, o que pode ser uma limitação e aumentar o custo computacional, e que a técnica pode não ser adequada para todos os problemas de mecânica dos sólidos.

(Lawal et al., 2022) destacam que as PINNs podem apresentar altos custos de treinamento, lentidão e a necessidade de grandes volumes de dados. No entanto, sugerem que essas questões podem ser mitigadas por meio de técnicas emergentes, como PINNs Estendidas, PINNs Híbridas e técnicas de Minimização de Perda. Além disso, o próprio estudo de (Lawal et al., 2022) reconhece suas próprias restrições, como a utilização de uma única palavra-chave para a busca de artigos e a exclusão de documentos não em inglês, bem como de outros formatos que não sejam artigos de pesquisa, revisões ou capítulos de livros. Essa abordagem de escopo pode não ter abrangido todas as pesquisas relevantes.

(Nascimento; Fricke; Viana, 2020) observam que a eficiência computacional de modelos de ordem reduzida pode comprometer a fidelidade física, e que as implementações híbridas de PINNs podem reduzir essa lacuna entre previsões e dados observados. Contudo, seus resultados são sensíveis à escolha inicial dos hiperparâmetros e ao desempenho do otimizador. Já (Peng et al., 2021) apontam que o IDRLnet ainda não explora completamente os recursos de computação de alto desempenho do PyTorch, incluindo a paralelização entre CPU e GPU. Por fim, (Wang et al., 2022) mencionam a complexidade de seu algoritmo proposto e a necessidade de mais investigações sobre a relação entre a

estabilidade de EDPs e a perda informada pela física, além de limitar o escopo de seu estudo apenas às equações de HJB.

Tendências e Perspectivas Futuras

O futuro das PINNs aponta para o aprimoramento de sua precisão, eficiência e aplicabilidade em problemas mais complexos. (Cuomo et al., 2022) sugerem investigar EDPs mais elaboradas, explorar aprendizado por transferência para otimização e desenvolver novos procedimentos de treinamento, com o objetivo de estender as PINNs para múltiplas equações e problemas do mundo real. Essa visão é corroborada por (Huang; Wang, 2022), que propõem a exploração de técnicas adicionais para estabilizar o treinamento e melhorar o desempenho dos modelos, incluindo arquiteturas MLP modificadas e treinamento por currículo.

Na mecânica dos sólidos, as direções futuras incluem a extensão das PINNs para cenários mais desafiadores. (Bai et al., 2023b) indicam a necessidade de aplicá-las a problemas de não linearidade geométrica, hiperelasticidade e fratura, e a uma avaliação mais aprofundada em cenários 3D e com materiais não lineares. (Bai et al., 2023a) complementam, sugerindo o aprimoramento da função de perda LSWR e a investigação de esquemas de aprendizado adaptativo para otimizar o parâmetro de controle. Em termos de modelagem atomística, (Pun et al., 2019) preveem a aplicação de potenciais PINN em simulações de dinâmica molecular e Monte Carlo em larga escala, focando na melhoria contínua da precisão e transferibilidade para outros materiais e sistemas.

(Lawal et al., 2022) sugerem que pesquisas futuras se concentrem no desenvolvimento de novas técnicas para otimizar o desempenho das PINNs, visando melhorar suas capacidades de generalização e reduzir os custos de treinamento. Eles ressaltam a importância da pesquisa contínua no campo para explorar novas aplicações e otimizar a performance, especificamente através do desenvolvimento de técnicas híbridas e métodos de decomposição de domínio. Os autores também planejam implementar um novo modelo que combine PINNs com redes neurais gráficas ou recorrentes, utilizando conjuntos de dados de séries temporais.

Em um caminho complementar, (Nascimento; Fricke; Viana, 2020) propõem que o trabalho futuro explore a aplicação de PINNs híbridas em áreas como quantificação de incertezas e análise de robustez. Eles vislumbram a aplicação da abordagem a outros problemas em mecânica e física, além do desenvolvimento de métodos mais avançados para o ajuste de coeficientes em sistemas de equações diferenciais ordinárias. A expansão da implementação para o CUDA de baixo nível e a aplicação em controles em tempo real também são consideradas. (Peng et al., 2021) planejam continuar o desenvolvimento e aprimoramento do IDRLnet, aplicando-o a problemas mais complexos e aplicações do mundo real, com foco na melhoria do desempenho e usabilidade, inclusive abordando as capacidades de computação de alto desempenho. Por fim, (Wang et al., 2022) sugerem futuras investigações sobre a relação entre a estabilidade de EDPs e a perda informada pela física, além da aplicação de seu algoritmo proposto a outros tipos de EDPs, com foco em investigações teóricas de outras equações importantes.

Para problemas específicos, a pesquisa futura visa expandir o escopo e a robustez das PINNs. (Krishnapriyan et al., 2021) planejam testar e aprimorar as soluções propostas

para lidar com as limitações das PINNs em problemas complexos e explorar métodos mais sofisticados para previsão de passos de tempo. A abordagem PPINN de (Meng et al., 2020) será investigada para problemas de alta dimensão, múltiplas escalas e até para modelagem multifidelidade em problemas inversos. Por fim, (Gokhale; Claessens; Develder, 2022) indicam o desenvolvimento de algoritmos de controle utilizando arquiteturas PINN para modelos de construção mais complexos, com a integração de algoritmos de aprendizado por reforço para obter ações de controle ótimas e avançar na eficiência energética de edifícios.

Conclusão

As PINNs são reconhecidas como uma ferramenta poderosa e versátil para resolver EDPs e problemas inversos, com grande potencial de personalização, conforme apontado por (Cuomo et al., 2022). Esses autores enfatizam a importância da informação física na condução das PINNs e a necessidade de pesquisas futuras para otimizar os procedimentos de treinamento e estender sua aplicação a múltiplas equações. Corroborando essa perspectiva, (Bai et al., 2023) concluem que a mecânica computacional baseada em PINNs tem a capacidade de resolver sistemas não lineares, é de fácil implementação e oferece vantagens significativas sobre métodos tradicionais, especialmente para problemas inversos.

No entanto, as pesquisas também delineiam as limitações e os avanços necessários para as PINNs. (Krishnapriyan et al., 2021) alertam que as PINNs podem ser limitadas na sua capacidade de aprender fenômenos físicos em casos não triviais, propondo métodos alternativos como a regularização por currículo para melhorar o desempenho. Em resposta a desafios de otimização, (Huang; Wang, 2022) concluem que a não-dimensionalização, random Fourier feature embeddings e estratégias de treinamento causal são essenciais para a eficiência e precisão das PINNs. Além disso, (Pun et al., 2019) destacam o potencial dos "potenciais PINN" para melhorar a transferibilidade de modelos de aprendizado de máquina na modelagem atomística, ao incorporar insights físicos.

(Lawal et al., 2022) afirmam que, embora amplamente empregadas, as PINNs necessitam de otimização contínua, impulsionada por novas técnicas propostas. Eles ressaltam o potencial das PINNs para impulsionar o avanço do campo e enfatizam a importância da pesquisa contínua para otimizar seu desempenho e descobrir novas aplicações.

Em complemento, (Nascimento; Fricke; Viana, 2020) concluem que as PINNs híbridas podem ter um impacto significativo em aplicações reais, especialmente onde modelos de ordem reduzida exibem limitações preditivas devido a incertezas. Para eles, essa abordagem é eficaz na estimativa do crescimento de trincas por fadiga e no ajuste de coeficientes em equações diferenciais ordinárias. (Peng et al., 2021) apontam o IDRLnet como uma estrutura robusta para resolver problemas diretos e inversos modelados por EDPs, destacando seu vasto potencial de aplicação em diversas áreas. Por fim, (Wang et al., 2022) concluem que a perda L2 não é adequada para o treinamento de PINNs em equações de HJB, recomendando a perda L^∞ como uma escolha superior e confirmando que seu algoritmo proposto melhora significativamente a precisão das PINNs na resolução de problemas de controle ótimo.

A contínua evolução das PINNs é demonstrada por inovações metodológicas e aplicações em diversos domínios. A abordagem PPINN de (Meng et al., 2020) se mostra um método inovador para resolver problemas dependentes do tempo, alcançando aceleração significativa e convergindo em poucas iterações ao decompor problemas de longa duração. No campo da modelagem térmica de edifícios, (Gokhale; Claessens; Develder, 2022) concluem que as arquiteturas PINN propostas podem efetivamente modelar o comportamento térmico para controle, otimizar a eficiência energética e são mais adequadas para cenários com menos dados de treinamento. Por fim, (Bai et al., 2023a) enfatizam a eficácia da função de perda LSWR modificada para melhorar a generalização e aliviar o treinamento tendencioso em problemas de mecânica dos sólidos, superando outras funções de perda na previsão de campos de tensão.

Considerações finais

A ascensão das PINNs representa um paradigma revolucionário na Mecânica Computacional, oferecendo uma alternativa robusta aos métodos numéricos tradicionais. Sua capacidade de integrar leis físicas diretamente nas redes neurais e resolver problemas complexos, diretos e inversos, sem a necessidade de malhas, as posiciona como uma ferramenta de grande potencial. Pesquisas recentes demonstraram a versatilidade das PINNs em diversas aplicações, desde a modelagem de sólidos e materiais até a simulação de fenômenos térmicos e o desenvolvimento de potenciais interatômicos.

No entanto, o campo das PINNs ainda enfrenta desafios, como o alto custo computacional de treinamento, a sensibilidade à quantidade e qualidade dos dados, e a necessidade de aprimoramento em estratégias de otimização para garantir robustez e generalização. Apesar dessas limitações, as inovações contínuas, incluindo o desenvolvimento de novas funções de perda, técnicas de regularização e a combinação com abordagens paralelas, têm impulsionado a eficácia e aplicabilidade das PINNs.

As perspectivas futuras para as PINNs são promissoras, com a pesquisa focando na expansão para problemas mais complexos, o aprimoramento da eficiência e precisão, e a integração com outras metodologias de IA, como o aprendizado por reforço. A busca por soluções que otimizem o treinamento, melhorem a transferibilidade e lidem com desafios específicos de diferentes domínios é contínua. Em suma, as PINNs estão redefinindo a forma como a mecânica computacional é abordada, oferecendo um caminho inovador para a resolução de problemas científicos e de engenharia complexos.

Lista de 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.

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