

MEC-502 – Tópicos Especiais em Mecânica dos Sólidos

Prof. Dr. Wallace G. Ferreira / Eng. Paulo de Souza Silva / Prof. Dr. William Maluf Filho

Disciplina: MEC-502 Tópicos Especiais em Mecânica dos Sólidos

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica – PosMEC – UFABC

AE3 – Implementação de Redes Neurais Informadas por Física (PINNs) em Mecânica Computacional

Recomendações de Resolução e Entrega dos Exercícios

- **Leia atentamente** todas as questões antes de começar a resolver;
- Utilize os **Notebooks fornecidos** como base de resolução;
- Montar um **relatório em formato PDF** contendo as solicitações de cada exercício (equações, parâmetros, gráficos comparativos);
- Disponibilizar no PDF o **link do GitHub** para os arquivos de programas desenvolvidos;
- **Descrever (formatação Markdown)** dentro do Notebook de resolução, os passos e as tomadas de decisão.
- Enviar o relatório **por e-mail** para wallace.ferreira@ufabc.edu.br e paulo.s@aluno.ufabc.edu.br
 - Padrão do nome do arquivo: `PrimeiroNome_UltimoSobrenome_AtivPINN_AE3.pdf`

- 1) Implemente em **PyTorch** uma PINN para encontrar o deslocamento no problema da barra unidimensional apresentado na Figura 1.

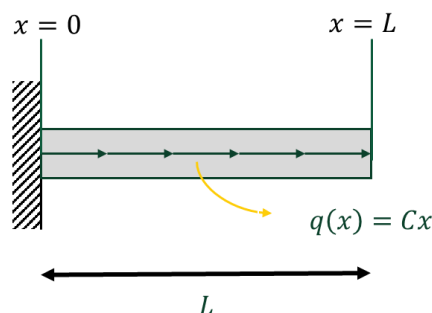


Figura 1: Barra com carregamento axial.

Nesse cenário não existem carregamentos externos e o problema se reduz a:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \left(EA \frac{du}{dx} \right) &= q(x) & \text{em } \Omega \\ u &= g & \text{em } \Gamma_D \end{aligned}$$

Em que: $q(x) = Cx$ e, dessa forma, as condições de contorno de Dirichlet são:

$$u(0) = 0 \quad u(L) = \frac{CL^3}{3EA}$$

levando a solução analítica na forma:

$$u(x) = \frac{C}{EA} \left(\frac{L^2 x}{2} - \frac{x^3}{6} \right)$$

Para a implementação numérica considere os seguintes parâmetros:

- Assuma $EA = 1$ (módulo de elasticidade vezes a área da seção);
- O comprimento da barra é $L = 5$ m;
- A constante $C = 10 \text{ N/m}^2$;

Na sua solução apresente:

- Os passos para obter a solução analítica do problema;
- A estrutura da rede utilizada (número de camadas e neurônios);
- Os parâmetros (quantidade de pontos de colocação, função de ativação).

Teste diferentes cenários referentes aos **otimizadores**, isto é, resolva para o otimizador **Adam** com até **três épocas** e **três taxas de aprendizado**, repita o processo para **LBFGS**. Apresente em uma **tabela** os resultados para a **Loss Total** e o **tempo computacional** para fazer a otimização e se houve **convergência** em cada um dos cenários (total de 18 cenários).

Sugestões de cenários (fique atento a variável `print_every`)

Learning rate: 0.1, 0.01 e $1\text{E-}5$

Épocas: 40, 400, 1000

Para **um** dos cenários anteriores (de preferência que tenha convergido) apresente:

- Qual o otimizador está sendo usado, o número de épocas e a taxa de aprendizado;
- Um gráfico comparativo entre a solução da PINN e a solução analítica;
- Um gráfico dos valores das funções de perda (**PDE**, **BC** e **Total**) pelo número de épocas.

2) Escolha **entre** as bibliotecas **SciANN** e **DeepXDE** para implementar uma PINN e encontrar os **deslocamentos** para os seguintes casos:

- A viga de Euler-Bernoulli engastada com carga pontual conforme Figura 2a
- A viga de Euler-Bernoulli bi-apoiada com carga distribuída uniforme, vide Figura 2b

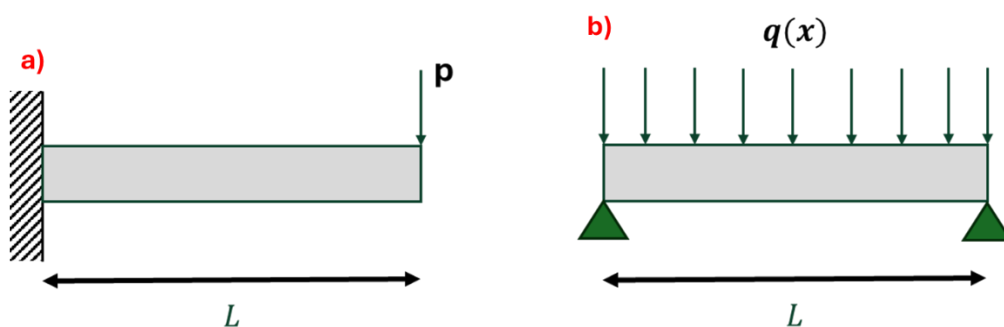


Figura 2: Configurações da viga de Euler-Bernoulli; a) Viga em balanço com carga pontual; b) Viga bi-apoiada com carga distribuída.

Para resolver cada um dos problemas, utilize livros de **Mecânica dos Sólidos** e **Resistência dos Materiais** (**veja as referências ao fim do documento**) para entender quais são as **condições de contorno** em cada caso. É possível obter soluções partindo da **formulação geral da viga** (EDO 4ª ordem) ou de suas variações que dependem de **força cortante** (EDO 3ª ordem) e **momento fletor** (EDO 2ª ordem), tome a decisão de engenharia que lhe seja conveniente.

Os **parâmetros geométricos, materiais** e as **cargas** são:

- Problema a) $L = 3\text{m}$, $I = 6510\text{ cm}^4$, $E = 21000\text{ kN/cm}^2$, $p = 16\text{ kN}$
- Problema b) $L = 6\text{m}$, $I = 22500\text{ cm}^4$, $E = 21000\text{ kN/cm}^2$, $q = 2\text{ kN/m}$

Em cada uma das resoluções apresente:

- A solução analítica do problema;
 - O valor de máxima deflexão e ângulo;
 - A estrutura da rede utilizada (número de camadas e neurônios);
 - Os parâmetros (quantidade de pontos de colocação, função de ativação, otimizador, número de épocas, taxa de aprendizagem).
 - Um gráfico comparativo entre o deslocamento encontrado pela PINN e a solução analítica;
 - Um gráfico dos valores da função de perda (pode ser **somente a Loss Total**) pelo número de épocas.
- 3) Implemente em **PyTorch** uma PINN para encontrar os **deslocamentos** nas direções x e y para o problema da **placa bidimensional**, para cada um dos cenários com condições de contorno e carregamentos definidos conforme as indicações das Figura 3a e 3b.

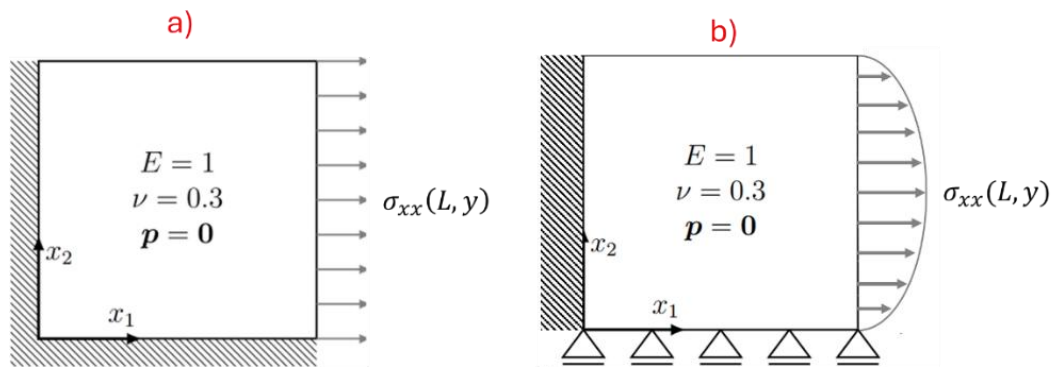


Figura 3: Configurações para o problema de placa bidimensional; a) Engaste nos lados esquerdo e inferior; b) Engaste no lado esquerdo e apoio no lado inferior.

Observações das condições referentes as tensões:

- Assuma para o **item a** que $\sigma_{xx}(L, y) = 1$;
- Assuma para o **item b** que $\sigma_{xx}(L, y) = \sin\left(\frac{\pi y}{L}\right)$
- Em **ambos** os itens a tensão $\sigma_{xy} = 0$ em **todo** o contorno.

Para cada um dos cenários presente:

- A estrutura da rede utilizada (número de camadas e neurônios);
- Os parâmetros (quantidade de pontos de colocação, função de ativação, otimizador, número de épocas, taxa de aprendizagem);
- Destaque como as condições de deslocamentos foram definidas (*soft* ou *hard*).
- Um gráfico para cada um dos deslocamentos (direções x e y) encontrados pela PINN;
- Um gráfico dos valores da função de perda (pode ser **somente a Loss Total**) pelo número de épocas.

- 4) Resolva o seguinte problema com **uma** das bibliotecas apresentadas **SciANN** e **DeepXDE**. Considere o problema de elasticidade para o plano de deformações do quadrado unitário, sujeito as condições de contorno definidas na Figura 4.

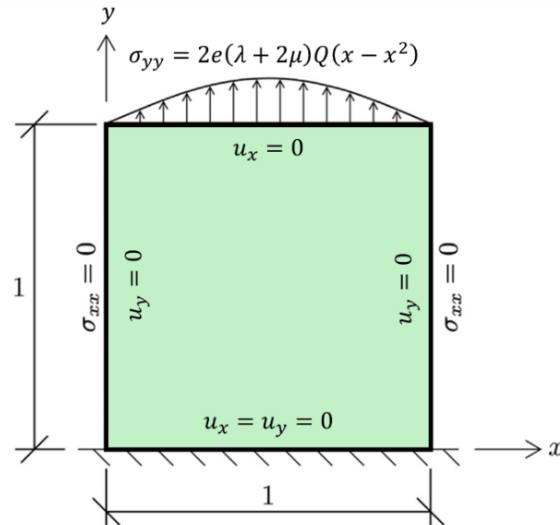


Figura 4: Representação do problema da placa e suas condições. **Obs:** O e é o número de Euler e está multiplicando os demais termos na definição da tensão.

Para essa configuração as **forças de corpo** são:

$$\begin{aligned} f_x &= -2Q\lambda y(1-2x)e^{y^2} + \mu \left(-2Qy(1-2x)e^{y^2} + \pi^2 \sin(\pi y) \right) \\ f_y &= \lambda \left(-4Qy^2(-x^2+x)e^{y^2} - 2Q(-x^2+x)e^{y^2} \right) \\ &\quad + \mu \left(-8Qy^2(-x^2+x)e^{y^2} - 4Q(-x^2+x)e^{y^2} + 2Qe^{y^2} \right) \end{aligned}$$

e a **solução exata** para o problema é

$$\begin{aligned} u_x &= \sin(\pi y) \\ u_y &= Qe^{y^2}(x-x^2) \end{aligned}$$

Para a implementação, como de praxe, apresente:

- A estrutura da rede utilizada (número de camadas e neurônios);
- Os parâmetros (quantidade de pontos de colocação, função de ativação, otimizador, número de épocas, taxa de aprendizagem);
- Um plot comparativo de **três colunas**:
 - na primeira apresente a **solução analítica**,
 - na segunda a **solução da PINN** e
 - na última o **Erro Absoluto** entre as duas soluções.

Esse formato deve ser utilizado para comparar u_x , u_y , σ_{xx} , σ_{yy} e σ_{xy} .

- Um gráfico dos valores da função de perda (pode ser somente a **Loss Total**) pelo número de épocas.

Se a implementação for feita com o DeepXDE comente sobre a escolha de condições de contorno *soft* ou *hard* e apresente alguma motivação (tempo computacional, complexidade de definição) para escolha de uma delas.

5) **Exercício Extra** (será contabilizado se resolvido 3 dos problemas anteriores e pelo menos 2 itens abaixo).

Com **PyTorch** ou uma das **bibliotecas** apresentadas:

- Desenvolva uma PINN para encontrar a solução do **sistema massa-mola-amortecedor não forçado**. Escolha parâmetros (massa, rigidez e coeficiente de amortecimento), para que a solução seja sub-amortecida, isto é, que a oscilação diminua com o tempo (veja o Cap 2 de Rao (2018)).
- Desenvolva uma PINN para o problema da Equação de Poisson (1D) e Equação de Burgers (1D espacial), veja as formulações de cada uma:

Poisson

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &= -\pi^2 \sin(\pi x), & x \in [-1, 1] \\ u(-1) &= 0 & u(1) = 0\end{aligned}$$

Solução Analítica: $u(x) = \sin(\pi x)$

Burgers (assuma $\beta = 0.01/\pi$)

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} - \beta \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &= 0, & x \in [-1, 1], \quad t \in [0, 1] \\ u(0, x) &= -\sin(\pi x) \\ u(t, -1) &= u(t, 1) = 0\end{aligned}$$

Solução Analítica apresentada em Basdevant et al (1986):

$$u(x, t) = 4\pi\beta \left[\frac{\sum_{n=1}^{\infty} n a_n e^{-n^2 \pi^2 t \beta} \sin n\pi x}{a_0 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{-n^2 \pi^2 t \beta} \cos n\pi x} \right]$$

em que

$$a_n = (-1)^n I_n\left(\frac{1}{2\pi\beta}\right)$$

com $I_n(z)$ sendo a função de Bessel modificada de primeira espécie.

- Desenvolva uma PINN na forma **Energética (Deep Energy Method)** para o mesmo problema da barra do exercício 1. Como base tenha o capítulo 6 do livro do Kollmannsberger (1ed) e os exemplos disponibilizados em <https://github.com/cmpmech/deep-learning-in-computational-mechanics>
- Escolha **uma** das variações da **PINN Forte (PIELM, XPINN, hp-vPINNs etc)** para resolver um dos problemas da lista.

Com alguma biblioteca de PINNs (**sem ser** o SciANN e o DeepXDE) desenvolva:

- Resolva o problema da viga engastada com carga distribuída (cenário presente nos notebooks da aula prática).
- Resolva o problema plano de tensões elásticas (cenário presente nos notebooks da aula prática).

Bibliografia Principal:

Anand, L. and S. Govindjee. *Continuum Mechanics of Solids*. 2020.

Beer, F., E. Johnston, J. DeWolf and D. Mazurek. *Mechanics of Materials, 7e in SI Units*. Stress 1.11 (2017): 1-12.

Gaspar, R. e L. Trauwtein. *Introdução à Mecânica dos Sólidos, 2e*. 2018.

Kollmannsberger, S., D. D'Angella, M. Jokeit and L. Herrmann. *Deep Learning in Computational Mechanics: An Introduction Course*, 1e. 2021.

Rao, S.S. *Mechanical Vibrations, 6e in SI Units*. 2018

Zhang, A., Z. C. Lipton, Mu Li, and A. J. Smola. *Dive into Deep Learning*, Release 0.17.1. 2021.

Bibliografia Complementar:

C. Basdevant, M. Deville, P. Haldenwang, J. Lacroix, J. Ouazzani, R. Peyret, P. Orlandi, A. Patera, Spectral and finite difference solutions of the Burgers equation, *Computers & uids* 14 (1986) 2341. DOI: [https://doi.org/10.1016/0045-7930\(86\)90036-8](https://doi.org/10.1016/0045-7930(86)90036-8)

Documentação DeepXDE - <https://deepxde.readthedocs.io/en/latest/index.html>

Documentação SciANN - <https://www.sciann.com/>

Dwivedi, V., & Srinivasan, B. (2020). Physics informed extreme learning machine (pielm)—a rapid method for the numerical solution of partial differential equations. *Neurocomputing*, 391, 96-118. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.neucom.2019.12.099>

Enginnering at Alberta. Approximate Methods: The Rayleigh Ritz Method: Bars Under Axial Loads. Disponível em: <https://engcourses-uofa.ca/books/introduction-to-solid-mechanics/approximate-methods/approximate-methods-the-rayleigh-ritz-method/bars-under-axial-loads/>

Haghighat, E., Raissi, M., Moure, A., Gomez, H., & Juanes, R. (2021). A physics-informed deep learning framework for inversion and surrogate modeling in solid mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 379, 113741. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cma.2021.113741>

Jagtap, A. D., & Karniadakis, G. E. (2020). Extended physics-informed neural networks (XPINNs): A generalized space-time domain decomposition based deep learning framework for nonlinear partial differential equations. *Communications in Computational Physics*, 28(5).

Kharazmi, E., Zhang, Z., & Karniadakis, G. E. (2021). hp-VPINNs: Variational physics-informed neural networks with domain decomposition. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 374, 113547. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cma.2020.113547>

Kollmannsberger, S., D. D'Angella, M. Jokeit and L. Herrmann. *Deep Learning in Computational Mechanics: An Introduction Course*, 2e (supplementary material). 2025. <https://github.com/cmpmech/deep-learning-in-computational-mechanics>