

Modelos híbridos: Deep Learning + física

Cesar de Oliveira F. Silva

Setembro / 2026

Integração entre Deep Learning e modelos físicos

- Problemas ambientais são governados por leis físicas, mas também apresentam:
 - incerteza;
 - processos não modelados;
 - dados ruidosos e incompletos.
- Modelos físicos e Deep Learning têm forças complementares.

Objetivo

Combinar **estrutura física** com **aprendizado orientado por dados** para obter modelos mais robustos, eficientes e interpretáveis.

- Aplicações: hidrologia, transporte de sedimentos, qualidade da água, clima.

Modelos puramente físicos

- Baseados em equações diferenciais (EDPs/EDOs).
- Representam explicitamente processos físicos: conservação de massa; transporte; dinâmica de fluidos; balanços energéticos.

Vantagens

- interpretabilidade;
- extrapolação consistente;
- coerência com leis físicas.

Limitações

- custo computacional elevado;
- calibração difícil;
- simplificações estruturais inevitáveis.

Modelos baseados em dados (Deep Learning)

- Aprendem diretamente relações entre entradas e saídas.
- Capazes de aproximar funções altamente não lineares.

Vantagens

- flexibilidade;
- integração de múltiplas fontes de dados;
- bom desempenho empírico.

Limitações

- dependência de dados representativos;
- dificuldade em extrapolação;
- menor interpretabilidade física.

Por que usar modelos híbridos?

- Nem modelos físicos nem modelos puramente data-driven são suficientes isoladamente.

Ideia central

Combinar:

- **estrutura causal e física** (modelos físicos);
 - **capacidade de ajuste e aprendizado** (Deep Learning).
- O objetivo é obter modelos que:
 - generalizem melhor;
 - sejam mais robustos;
 - mantenham consistência física;
 - sejam eficientes computacionalmente.

Tipos de modelos híbridos

- **Residual learning:**
 - modelo físico gera previsão base;
 - DL aprende o erro (resíduo).
- **Parameter learning:**
 - rede estima parâmetros difíceis de medir;
 - parâmetros alimentam o modelo físico.
- **Coupled models:**
 - componentes físicos e neurais interagem ao longo do tempo;
 - integração dinâmica no pipeline.

Leitura prática

Essas abordagens variam de correção leve até integração profunda entre física e aprendizado.

Physics-Informed Neural Networks (PINNs)

- PINNs incorporam equações físicas diretamente na função de perda.

Função objetivo

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{data} + \lambda \mathcal{L}_{physics}$$

- $\mathcal{L}_{data}$: ajuste aos dados observados;
- $\mathcal{L}_{physics}$: violação das equações governantes.

Ideia

A solução aprendida deve ser consistente tanto com os dados quanto com a física.

Como PINNs funcionam

- A rede aproxima diretamente a solução do sistema:

$$u_{\theta}(x, t)$$

- Derivadas espaciais e temporais são obtidas via autograd.
- As equações diferenciais são impostas em pontos de colocation.

Interpretação

O treinamento força a rede a satisfazer as leis físicas ao longo de todo o domínio, não apenas nos pontos observados.

Vantagens e limitações das PINNs

Vantagens

- menor dependência de dados rotulados;
- consistência física explícita;
- úteis para problemas inversos;
- integração natural de conhecimento prévio.

Limitações

- otimização difícil (loss rígida);
- escalabilidade limitada;
- sensibilidade ao peso λ ;
- dificuldade com sistemas muito complexos.

Comparação direta de abordagens

	Físico	DL	Híbrido
Interpretabilidade	Alta	Baixa	Média/Alta
Extrapolação	Boa	Limitada	Boa
Custo computacional	Alto	Médio	Variável
Flexibilidade	Baixa	Alta	Alta

Surrogate models para simulações complexas

- Muitas simulações físicas são computacionalmente caras.
- Surrogate models aproximam essas simulações com redes neurais.

Ideia

parâmetros $\rightarrow$ modelo físico $\approx$ rede neural

- Benefícios:
 - aceleração de ordens de magnitude;
 - viabilização de ensembles grandes;
 - uso em otimização e calibração.

Workflow de surrogate modeling

- 1 Amostrar o espaço de parâmetros do modelo físico.
- 2 Executar simulações numéricas (alto custo).
- 3 Treinar rede para aproximar o mapeamento:

parâmetros $\rightarrow$ saídas

- 4 Validar contra simulações independentes.

Uso típico

Exploração de cenários, calibração e análise de sensibilidade.

Gêmeos digitais ambientais

- Representações digitais dinâmicas de sistemas físicos reais.
- Integram:
 - modelo físico base;
 - dados observacionais em tempo quase real;
 - correções baseadas em aprendizado.

Função

Monitorar, prever e atualizar continuamente o estado do sistema.

Data assimilation híbrida

- Integra observações ao modelo ao longo do tempo.
- Métodos clássicos:
 - Ensemble Kalman Filter (EnKF);
 - métodos variacionais.
- Deep Learning pode:
 - aprender operadores de atualização;
 - reduzir custo computacional;
 - melhorar ajuste em regimes não lineares.

Substituir ou complementar?

- Substituição completa de modelos físicos raramente é adequada em sistemas críticos.
- Estratégia mais robusta:

Complementação

- DL corrige viés;
 - melhora previsões de curto prazo;
 - captura processos não modelados.
-
- A escolha depende de:
 - disponibilidade de dados;
 - custo computacional;
 - exigência de interpretabilidade.

Generalização e extrapolação

- Modelos físicos tendem a extrapolar melhor sob mudanças estruturais.
- Modelos puramente data-driven tendem a interpolar.
- Modelos híbridos podem combinar:
 - estabilidade estrutural da física;
 - capacidade adaptativa do aprendizado.

Mensagem prática

Híbridos são especialmente úteis quando o sistema muda ao longo do tempo (clima, uso do solo, regimes hidrológicos).

Desafios práticos

- Integração de múltiplas escalas:
 - espacial;
 - temporal;
 - física.
- Conflitos entre:
 - dados ruidosos;
 - restrições físicas rígidas.
- Escolha do nível de acoplamento entre modelo físico e rede neural.
- Balanceamento entre:
 - fidelidade física;
 - desempenho empírico.

Quando usar cada abordagem?

- Poucos dados + forte teoria física $\rightarrow$ modelo físico ou PINN
- Muitos dados + baixa estrutura física $\rightarrow$ DL puro
- Sistema complexo + necessidade operacional $\rightarrow$ híbrido

Resumo estratégico

- 1 Use modelos híbridos quando houver conhecimento físico relevante.
- 2 Use PINNs para problemas com poucas observações e forte estrutura física.
- 3 Use surrogate models para acelerar simulações e explorar cenários.
- 4 Prefira complementaridade em vez de substituição total.
- 5 Avalie sempre generalização, consistência física e custo computacional.