

Universidade de Pernambuco
Programa de Pós-Graduação em Engenharia da
Computação (PPGEC)

Proposta de Tese de Doutorado

Título:

Arquitetura de Gêmeos Digitais de Alta Fidelidade: Integrando SciML e Inferência Bayesiana para Otimização de Processos Térmicos

Orientador: Diego Rátiva (diego.rativa@upe.br, diego.rativa@poli.br)

Co-Orientador: João Fausto Lorenzato

Descrição:

No setor da indústria pesada, a otimização da eficiência térmica dos fornos industriais é essencial para a descarbonização global. Embora a Fluidodinâmica Computacional (CFD) forneça a base matemática robusta para simular processos complexos, como reações turbulentas de combustão e transferência de calor por radiação através de modelos avançados (DOM/P-1), seu altíssimo custo computacional inviabiliza a tomada de decisão e o controle em malha fechada em tempo real. Para superar essa barreira, este projeto de doutorado propõe o desenvolvimento de uma arquitetura computacional avançada para Gêmeos Digitais Térmicos, utilizando os frameworks NVIDIA Modulus e PyTorch. O objetivo central é transcender os limites dos modelos determinísticos baseados em Redes Neurais Informadas pela Física (PINNs), solucionando os atuais gargalos algorítmicos referentes ao tempo de geração massiva de dados de treinamento, à ausência de tratamento estocástico para incertezas físicas e à dependência de testes iterativos manuais do tipo *what-if*.

A tese solucionará esses desafios através de três pilares de inovação em *Scientific Machine Learning* (SciML). Primeiramente, será desenvolvida uma arquitetura de Múltipla Fidelidade (*Multi-Fidelity PINNs*), que utilizará *Transfer Learning* para aprender a fenomenologia macroscópica em simulações rápidas de baixa fidelidade (malhas grossas ou simplificadas) e calibrar o modelo com dados esparsos de altíssima fidelidade (malhas poliédricas complexas), reduzindo o custo de criação do *dataset* em ordens de grandeza. Em paralelo, o modelo adotará uma formulação de PINN Bayesiana (B-PINN) com a física embutida diretamente na *Loss Function*, forçando a rede a respeitar as leis não lineares de Navier-Stokes e balanços térmicos, além de quantificar as incertezas operacionais e os ruídos de sensores industriais para entregar previsões probabilísticas e intervalos de confiança seguros. Por fim, aproveitando as inferências da PINN em milissegundos, o Gêmeo Digital será acoplado a um agente de *Deep Reinforcement Learning* (DRL) focado na otimização contínua e autônoma, que buscará ativamente a melhor política multiobjetivo de controle da razão ar-combustível e de ângulos de disparo dos queimadores (*swirl*), maximizando a eficiência térmica e minimizando a degradação estrutural do forno simultaneamente.

Visando à viabilidade prática e à escalabilidade dessa arquitetura em ambientes produtivos reais sob os preceitos da Indústria 4.0, o framework será desenvolvido utilizando práticas modernas de MLOps Industrial. Isso inclui a implementação de rotinas de monitoramento contínuo para a detecção de desvios de dados (*data drift*), permitindo o retreinamento adaptativo do modelo diante do desgaste natural de ativos

e da degradação de sensores. Adicionalmente, o sistema será projetado para implantação em computação de borda (*edge computing*) e integração nativa com sistemas supervisórios (SCADA/PIMS) e controladores lógicos programáveis via protocolos de comunicação industriais padronizados, como o OPC UA. Essa infraestrutura garante a robustez operacional do Gêmeo Digital através de baixa latência na tomada de decisão e resiliência contra instabilidades na conectividade externa.

Como contribuição científica adicional, a arquitetura computacional será desenvolvida com foco na portabilidade metodológica por meio de transferência de domínio. Isso permitirá que o framework estrutural do Gêmeo Digital seja expandido além da indústria pesada, sendo adaptado para a simulação hidrodinâmica de biorreatores e fermentadores nas indústrias biotecnológica e química. A flexibilidade do arcabouço de *Multi-Fidelity PINNs* permitirá testar instantaneamente diversas configurações físicas do biorreator, avaliando como o sistema reage a alterações na velocidade do impelidor (agitação rotativa), no fluxo de entrada de ar e nas taxas de retenção de gás (*gas holdup*). Dessa forma, a tese consolidará uma ferramenta universal de alto impacto transversal, capaz de otimizar desde ambientes de combustão extrema até processos biológicos altamente sensíveis.

Referências Bibliográficas:

- [1] SUN, Yao; ZHANG, Qianyue; RAFFOUL, Samar. Physics-informed neural network for predicting hot-rolled steel temperatures during heating process. *Journal of Engineering Research*, v. 13, n. 2, p. 1496-1504, 2025.
- [2] CHEN, Jincheng et al. P-TTAN: A novel neural network optimized for thermal feature perception and representation in 3D temperature predictions. *Expert Systems with Applications*, v. 274, p. 126964, 2025.
- [3] QIN, Tan et al. Physics informed hysteretic neural network for seismic resilience assessment of prefabricated SRC grain storage structures considering infill interaction and lateral wall pressure. In: *Structures*. Elsevier, 2026. p. 111679.
- [4] Penwarden, M., Zhe, S., Narayan, A., & Kirby, R. M. (2022). Multifidelity modeling for physics-informed neural networks (PINNs). *Journal of Computational Physics*, 451, 110844.
- [5] Toscano, J. D., Oommen, V., Varghese, A. J., Zou, Z., Ahmadi Daryakenari, N., Wu, C., & Karniadakis, G. E. (2025). From pinns to pikans: Recent advances in physics-informed machine learning. *Machine Learning for Computational Science and Engineering*, 1(1), 15.