

Otimização de hiperparâmetros de uma PINN

ENGG11

Guilherme S. Freire, Ítalo C. Soares, Matheus M. Bezerra

Departamento de Engenharia Química
Universidade Federal da Bahia

September 20, 2025

Contextualização

A utilização de Redes Neurais Artificiais (RNA):

- Não há necessidade do conhecimento do modelo fenomenológico
- É possível uma otimização utilizando apenas dados

Problemas no desenvolvimento do modelo

A construção de um modelo de RNA pode ser custosa devido a necessidade de adequação dos seus hiperparâmetros.

Objetivos

- Criar um método de otimização dos hiperparâmetros de uma RNA utilizando um método de otimização heurístico
- Obter melhores resultados e menor tempo de cômputo se comparado a otimizadores já estabelecidos na literatura.

Physics Informed Neural Network (PINN)

As PINN's são arquiteturas de RNA que utilizam da modelagem fenomenológico do processo para auxiliar na natureza da solução e melhorar as previsões [Raissi et al., 2017]. Na Figura 1 está uma representação da arquitetura de uma PINN qualquer.

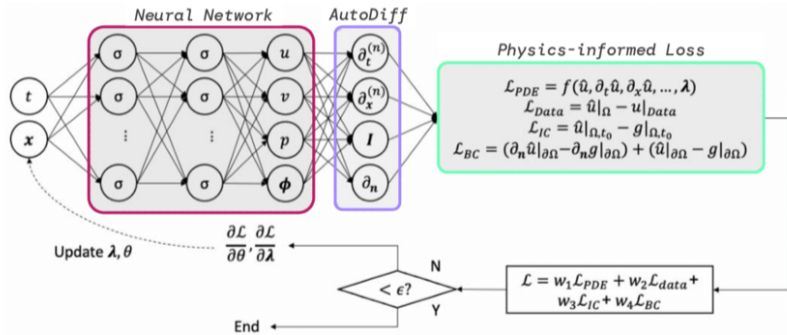


Figure: Diagrama de uma PINN

Fonte: Olexandr Isayev, Research Gate

Simulated Annealing

O Simulated Annealing (SA) é um algoritmo de otimização meta-heurístico que consiste numa técnica de busca local probabilística. O SA se baseia em fenômenos de resfriamento de metais.

Minimização usando SA

- O SA começa com uma solução aleatória S_0 no domínio da função objetivo
- Será analisada uma nova solução vizinha S_n de S_0 , se $S_0 \not\prec S_n$, $S_0 = S_n$, se $S_0 \succ S_n$ existe uma probabilidade P para que $S_0 = S_n$
- P é uma função probabilística dependente da temperatura T , que pode ser escolhida conforme a necessidade do problema.
- T é a temperatura atual do sistema, que irá sofrer também um resfriamento, assim diminuindo a probabilidade de aceite de S_n maiores que S_0

O OPTUNA é um framework de otimização, que possui código aberto, amplamente utilizado para a otimização de RNA's. Esse framework utiliza de um algoritmo de otimização bayesiana para calcular hiperparâmetros de forma dinâmica.

Entretanto, o uso do OPTUNA pode desacelerar ainda mais o processo de treino devido ao tempo consumido para a otimização dos hiperparâmetros, caso a RNA seja muito complexa.

Metodologia: Sistema

Será criada uma PINN como estudo de caso para obter soluções para o sistema de Lotka-Volterra, um sistema de primeira ordem de equações diferenciais não lineares. O sistema descreve a dinâmica de sistemas biológicos onde duas espécies interagem, uma como predador e outra como presa.

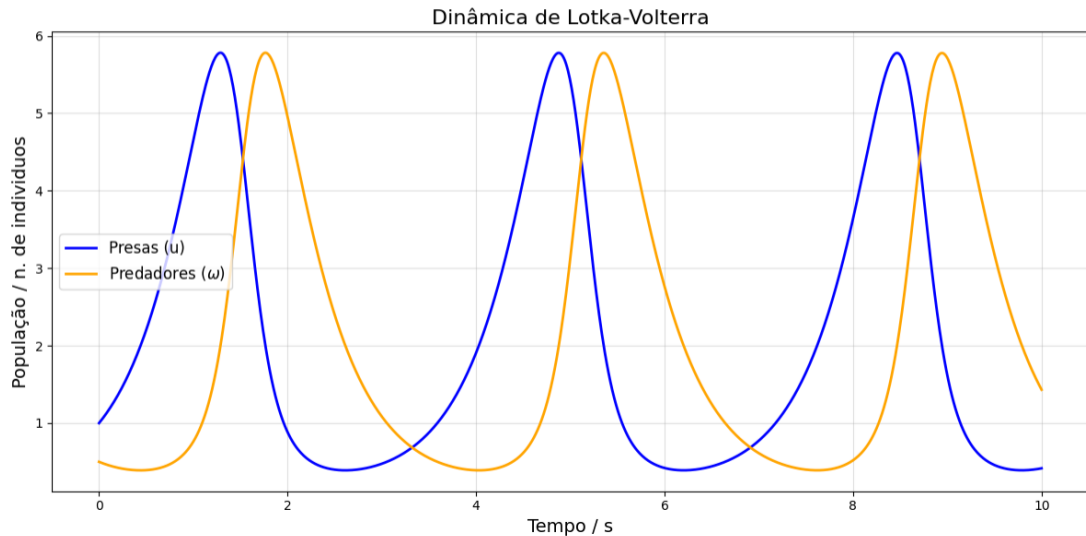
$$\frac{du}{dt} = \alpha u - \beta u \omega \quad (1)$$

$$\frac{d\omega}{dt} = -\gamma \omega + \delta u \omega \quad (2)$$

- u - Densidade populacional
- ω - Densidade populacional do predador
- α - Taxa de crescimento máxima da presa
- β - Efeito da presença dos predadores na taxa de morte da presa
- γ - Taxa de morte do predador
- δ - Efeito da presença das presas no crescimento populacional do predador

Metodologia: Sistema

A simulação se comporta da seguinte maneira:



Metodologia: PINN

A PINN segue o diagrama:

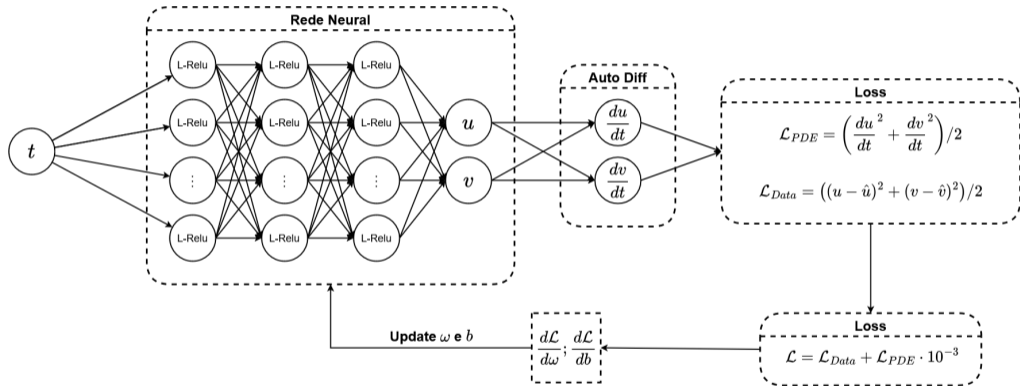


Figure: PINN desenvolvida

Após a criação da PINN, foi criado um método de aplicação do SA para definir os números de neurônios em cada camada.

A partir de um número inicial de neurônios em cada camada, utilizamos o SA para desativar neurônios específicos (levando seus pesos e vieses para 0). Logo, com a propriedade do SA é possível explorar a influência das ativações e desativações de cada neurônio na função de perda da rede.

Ou seja

Com a ajuda do SA a PINN já feita será "podada", em busca de menor custo computacional.

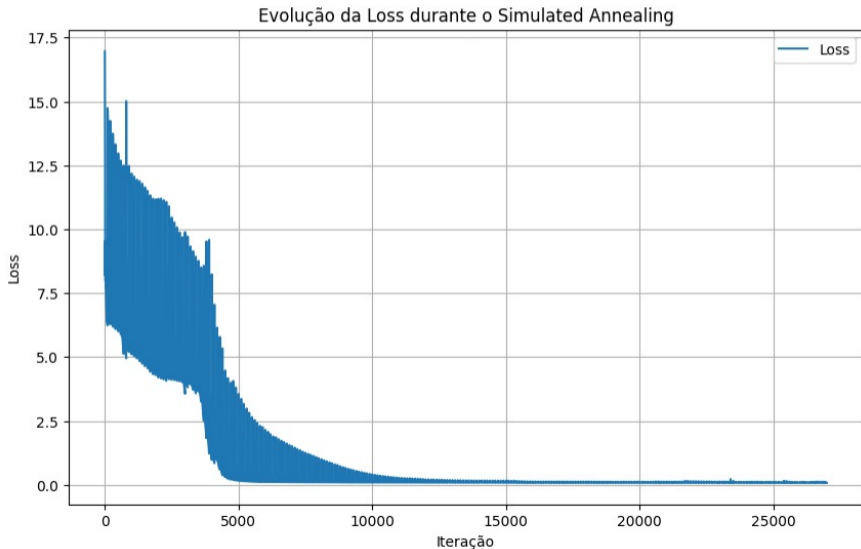
Pseudo Código:

[Clique aqui para ver o pseudocódigo](#)

Fonte: [Kuo CL, 2022]

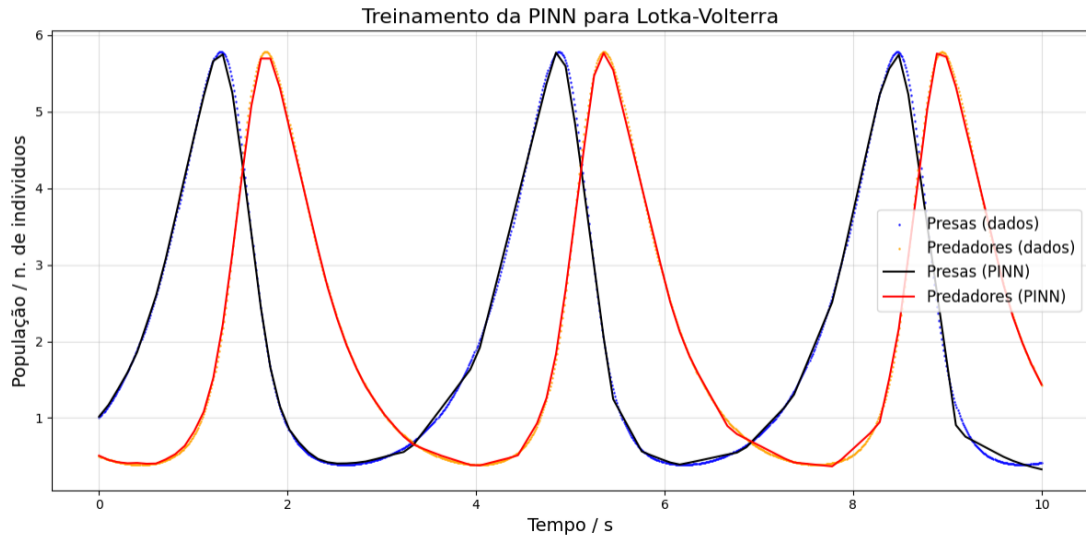
Resultados

Loss



Resultados

Testes



Número de Neurônios no fim do Treinamento

Ao fim do treinamento, essa foi a configuração final:

- **Neurônios ativos por camada:** [61, 109, 53, 2]
- **Total de neurônios ativos:** 225

Temos que polir um pouco mais o método, a fim de fazer com os resultados fiquem ainda melhores, porém, o método demonstrou potencial, conseguindo alcançar uma loss baixa e diminuindo consideravelmente o número de neurônios, por consequência, a complexidade da rede.

Próximos passos:

- Visualizador da poda de neurônios
- Melhorar a função de perda
- Comparação com OPTUNA e a PINN sem a poda



Kuo CL, Kuruoglu EE, C. W. (2022).

Neural network structure optimization by simulated annealing.

Entropy (Basel).



Raissi, M., Perdikaris, P., and Karniadakis, G. E. (2017).

Physics informed deep learning (part i): Data-driven solutions of nonlinear partial differential equations.

Obrigado!