

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.

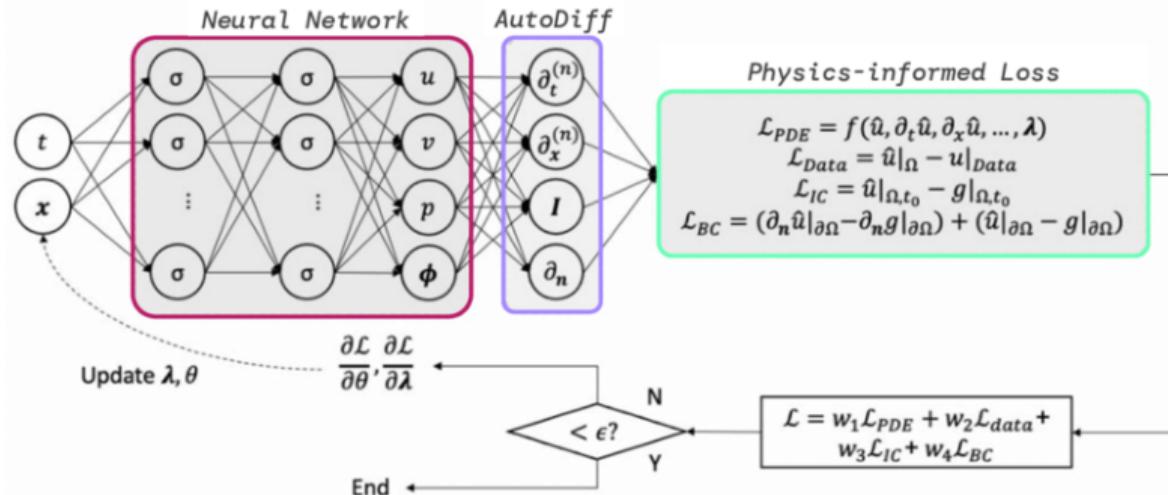


Figure: Diagrama de uma PINN

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 $S_0 \neq S_n$, $S_0 = S_n$, se $S_0 = S_n$ 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

OPTUNA

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.

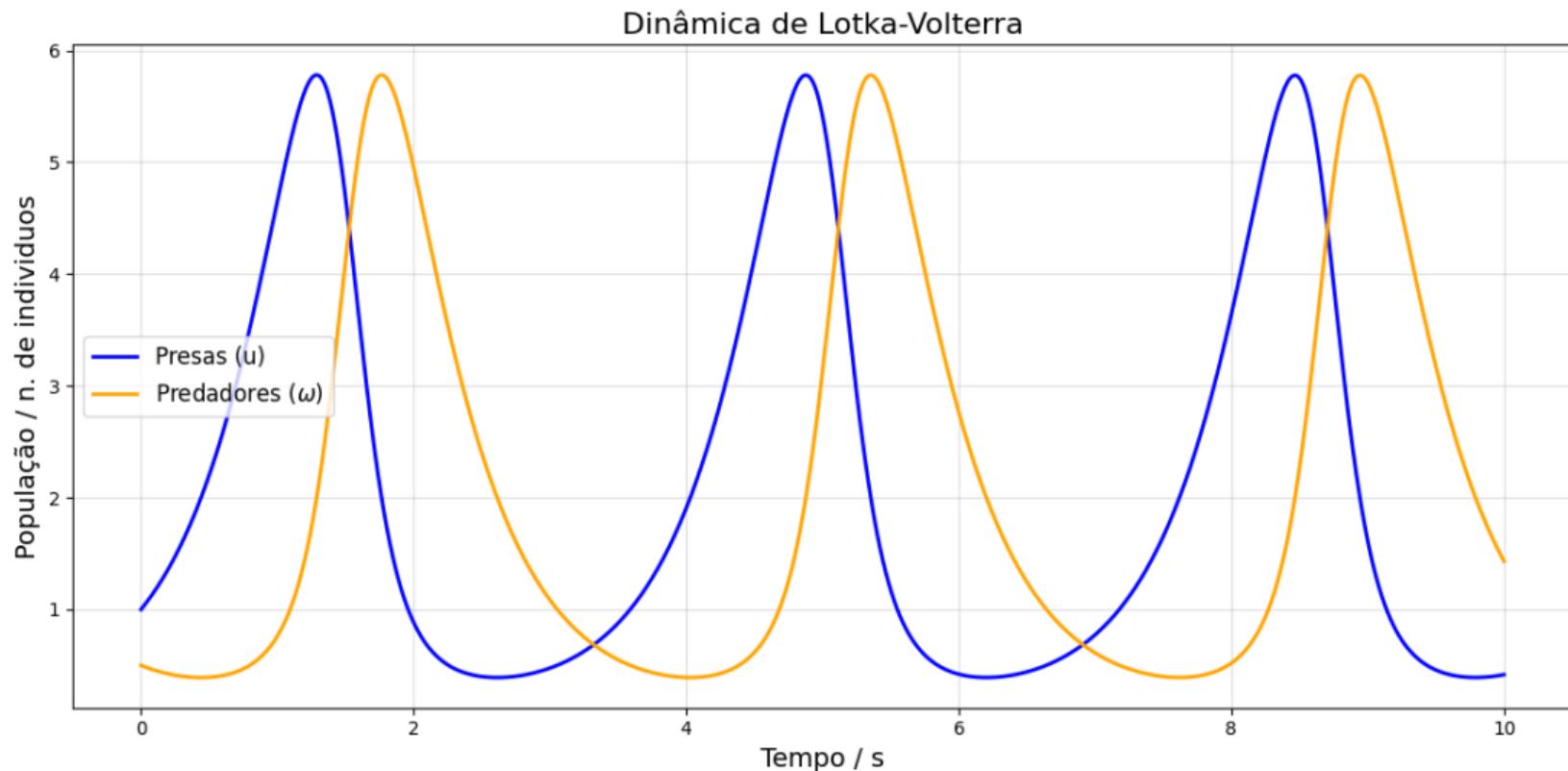
$$\frac{du}{dt} = \alpha u - \beta u\omega \quad (1)$$

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

- 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:

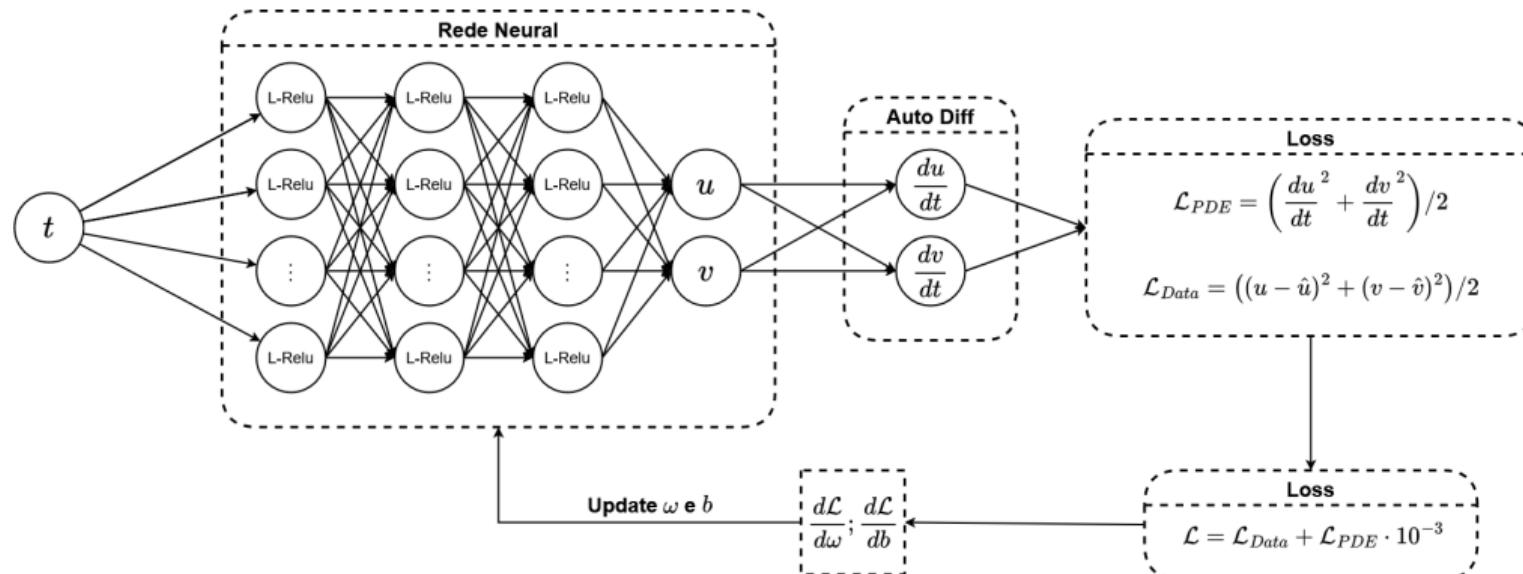


Figure: PINN desenvolvida

Metodologia: Poda

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.

Metodologia: Poda

Pseudo Código:

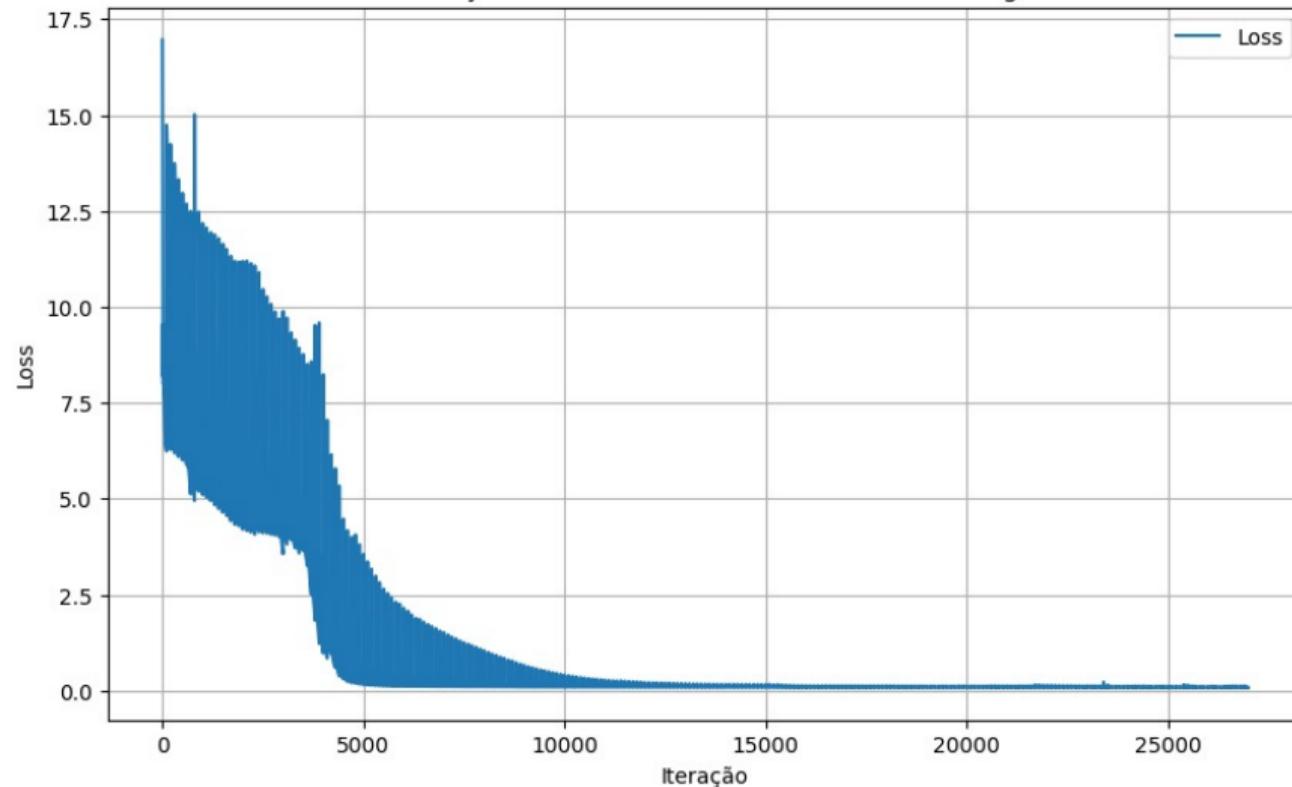
[Clique aqui para ver o pseudocódigo](#)

Fonte: [Kuo CL, 2022]

Resultados

Loss

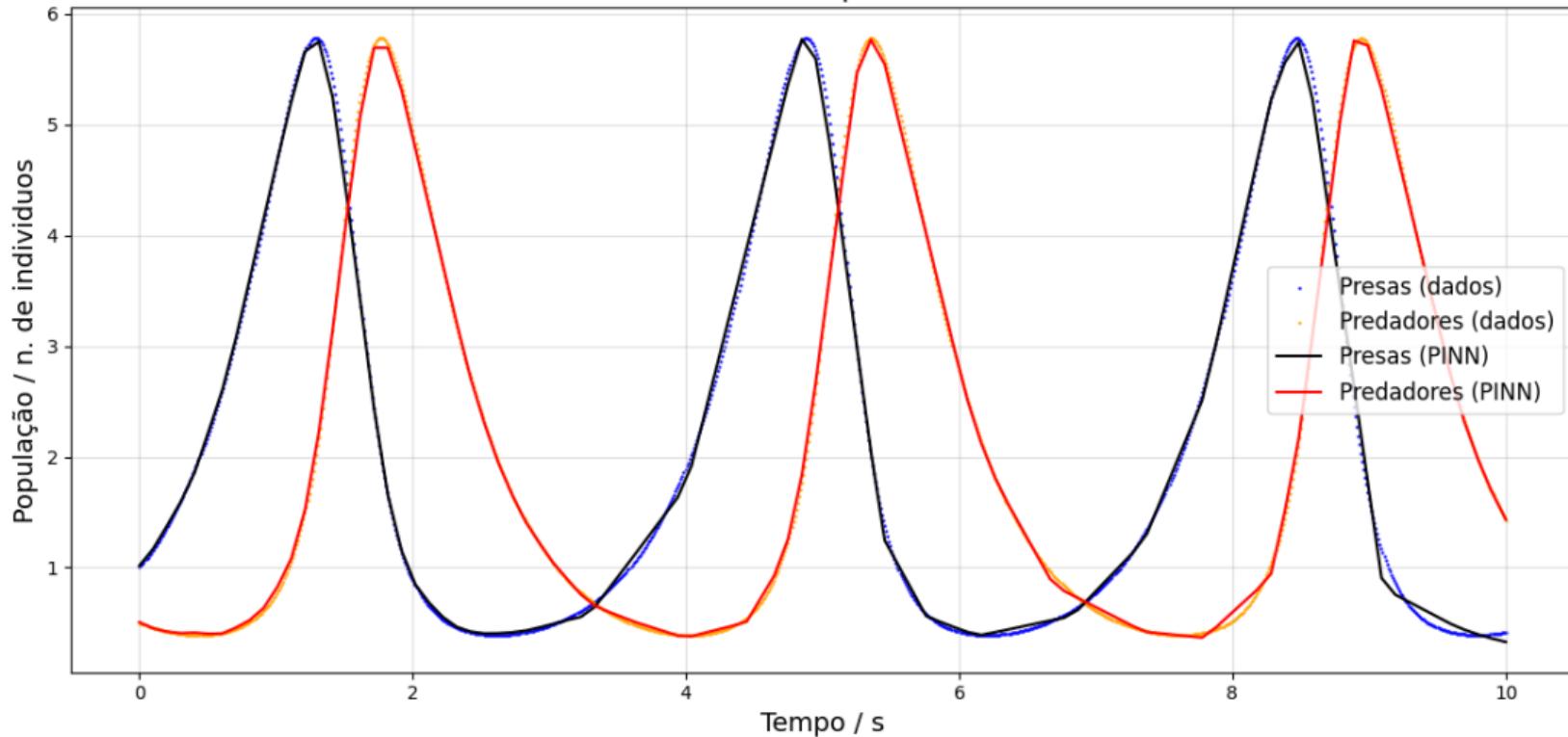
Evolução da Loss durante o Simulated Annealing



Resultados

Testes

Treinamento da PINN para Lotka-Volterra



Resultados

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

Conclusões e atualizações futuras

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

Referências

-  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!