



UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
CENTRO TECNOLÓGICO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM INFORMÁTICA

Gabriel Inácio Barboza

**Descobrimento de Parâmetros em Modelos
Epidemiológicos Compartmentais usando Redes
Neurais Informadas pela Física**

Vitória, ES

2025

Gabriel Inácio Barboza

**Descobrimento de Parâmetros em Modelos
Epidemiológicos Compartmentais usando Redes Neurais
Informadas pela Física**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Informática da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Informática.

Universidade Federal do Espírito Santo – UFES

Centro Tecnológico

Programa de Pós-Graduação em Informática

Orientador: Prof. Dr. Isaac Pinheiro dos Santos

Vitória, ES

2025

Gabriel Inácio Barboza

Descobrimto de Parâmetros em Modelos Epidemiológicos Compartmentais usando Redes Neurais Informadas pela Física/ Gabriel Inácio Barboza. – Vitória, ES, 2025-

32 p. : il. (algumas color.) ; 30 cm.

Orientador: Prof. Dr. Isaac Pinheiro dos Santos

Dissertação de Mestrado – Universidade Federal do Espírito Santo – UFES
Centro Tecnológico

Programa de Pós-Graduação em Informática, 2025.

1. Palavra-chave1. 2. Palavra-chave2. I. Souza, Vítor Estêvão Silva. II. Universidade Federal do Espírito Santo. IV. Descobrimto de Parâmetros em Modelos Epidemiológicos Compartmentais usando Redes Neurais Informadas pela Física

CDU 02:141:005.7

Gabriel Inácio Barboza

Descobrimento de Parâmetros em Modelos Epidemiológicos Compartmentais usando Redes Neurais Informadas pela Física

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Informática da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Informática.

Trabalho aprovado. Vitória, ES, 25 de setembro de 2014:

Prof. Dr. Isaac Pinheiro dos Santos
Orientador

Professor
Convidado 1

Professor
Convidado 2

Vitória, ES
2025

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Duis malesuada laoreet leo at interdum. Nullam neque eros, dignissim sed ipsum sed, sagittis laoreet nisi.

Agradecimentos

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Duis malesuada laoreet leo at interdum. Nullam neque eros, dignissim sed ipsum sed, sagittis laoreet nisi. Duis a pulvinar nisl. Aenean varius nisl eu magna facilisis porttitor. Cum sociis natoque penatibus et magnis dis parturient montes, nascetur ridiculus mus. Ut mattis tortor nisi, facilisis molestie arcu hendrerit sed. Donec placerat velit at odio dignissim luctus. Suspendisse potenti. Integer tristique mattis arcu, ut venenatis nulla tempor non. Donec at tincidunt nulla. Cras ac dignissim neque. Morbi in odio nulla. Donec posuere sem finibus, auctor nisl eu, posuere nisl. Duis sit amet neque id massa vehicula commodo dapibus eu elit. Sed nec leo eu sem viverra aliquet. Nam at nunc nec massa rutrum aliquam sed ac ante.

Vivamus nec quam iaculis, tempus ipsum eu, cursus ante. Phasellus cursus euismod auctor. Fusce luctus mauris id tortor cursus, volutpat cursus lacus ornare. Proin tristique metus sed est semper, id finibus neque efficitur. Cras venenatis augue ac venenatis mollis. Maecenas nec tellus quis libero consequat suscipit. Aliquam enim leo, pretium non elementum sit amet, vestibulum ut diam. Maecenas vitae diam ligula.

Fusce ac pretium leo, in convallis augue. Mauris pulvinar elit rhoncus velit auctor finibus. Praesent et commodo est, eu luctus arcu. Vivamus ut porta tortor, eget facilisis ex. Nunc aliquet tristique mauris id sollicitudin. Donec quis commodo metus, sit amet accumsan nibh. Cum sociis natoque penatibus et magnis dis parturient montes, nascetur ridiculus mus.

*“Science is a differential equation. Religion is a boundary condition.
(Alan Turing)”*

Resumo

Desde 2020, com o surto de COVID-19, uma grande quantidade de dados foram coletados sobre a dispersão desta doença. Para entender como doenças se propagam e ajudar tomadores de decisão na criação de políticas para conter o avanço e mitigar os efeitos que doenças contagiosas trazem são empregados modelos que explicam o comportamento de tais doenças. Modelos compartimentais baseados em equações diferenciais ordinárias são comumente aplicados para a modelagem de fenômenos epidemiológicos por sua simplicidade, facilidade de análise, e pela existência de métodos numéricos capazes de resolver estes sistemas. Com o avanço de áreas como aprendizado de máquina e ciência de dados, foram desenvolvidas técnicas de descobrimento de equações em grandes bases de dados. Uma dessas técnicas, são as redes neurais informadas pela física, que atuam como um ajustador de curvas regularizado por equações que regem o fenômeno ao incorporá-las na função de perda da rede. Elas podem ser aplicadas para a solução numérica de equações diferenciais, mas também para a solução de problemas inversos envolvendo equações diferenciais, utilizando dados reais e sintéticos. Neste trabalho, são aplicadas redes neurais informadas pela física para o descobrimento de parâmetros que compõem os modelos compartimentais. São realizados experimentos com dados sintéticos para averiguar a capacidade das redes neurais informadas pela física de resolver problemas inversos e testar a resiliência dos métodos a ruídos. Em seguida, são utilizados dados reais para extrair o valor de infectiosidade ao longo do tempo.

Palavras-chaves: Redes Neurais Informadas pela Física. Epidemiologia. Modelos Compartimentais. Problemas Inversos.

Abstract

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Duis malesuada laoreet leo at interdum. Nullam neque eros, dignissim sed ipsum sed, sagittis laoreet nisi. Duis a pulvinar nisl. Aenean varius nisl eu magna facilisis porttitor. Cum sociis natoque penatibus et magnis dis parturient montes, nascetur ridiculus mus. Ut mattis tortor nisi, facilisis molestie arcu hendrerit sed. Donec placerat velit at odio dignissim luctus. Suspendisse potenti. Integer tristique mattis arcu, ut venenatis nulla tempor non. Donec at tincidunt nulla. Cras ac dignissim neque. Morbi in odio nulla. Donec posuere sem finibus, auctor nisl eu, posuere nisl. Duis sit amet neque id massa vehicula commodo dapibus eu elit. Sed nec leo eu sem viverra aliquet. Nam at nunc nec massa rutrum aliquam sed ac ante.

Vivamus nec quam iaculis, tempus ipsum eu, cursus ante. Phasellus cursus euismod auctor. Fusce luctus mauris id tortor cursus, volutpat cursus lacus ornare. Proin tristique metus sed est semper, id finibus neque efficitur. Cras venenatis augue ac venenatis mollis. Maecenas nec tellus quis libero consequat suscipit. Aliquam enim leo, pretium non elementum sit amet, vestibulum ut diam. Maecenas vitae diam ligula.

Fusce ac pretium leo, in convallis augue. Mauris pulvinar elit rhoncus velit auctor finibus. Praesent et commodo est, eu luctus arcu. Vivamus ut porta tortor, eget facilisis ex. Nunc aliquet tristique mauris id sollicitudin. Donec quis commodo metus, sit amet accumsan nibh. Cum sociis natoque penatibus et magnis dis parturient montes, nascetur ridiculus mus.

Duis elementum dictum tristique. Integer mattis libero sit amet pretium euismod. Curabitur auctor eu augue ut ornare. Integer bibendum eros ullamcorper rhoncus convallis. Pellentesque non pretium ligula, sit amet bibendum eros. Nam venenatis ex felis, quis blandit nunc auctor sit amet. Maecenas ut eros pharetra, lobortis neque id, fermentum arcu. Cras neque dui, rhoncus feugiat leo id, semper facilisis lorem. Fusce non ex turpis. Nullam venenatis sed ligula ac lacinia.

Keywords: Physics Informed Neural Networks. Epidemiology. Compartmental Models. Inverse Problems.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Representação gráfica das PINNs. Fonte: elaborada pelos autores. . . .	18
Figura 2 – Grafo para o <i>SIR</i> . Fonte: elaborada pelos autores.	19
Figura 3 – Na primeira. Fonte: elaborada pelos autores.	24
Figura 4 – Na primeira. Fonte: elaborada pelos autores.	24
Figura 5 – Na primeira. Fonte: elaborada pelos autores.	25
Figura 6 – Na primeira. Fonte: elaborada pelos autores.	25
Figura 7 – Na primeira. Fonte: elaborada pelos autores.	26
Figura 8 – Na primeira. Fonte: elaborada pelos autores.	26

Lista de tabelas

Tabela 1 – Valores das métricas de erro (MSE , norma \mathcal{L}_2 e norma \mathcal{L}_∞) para as soluções aproximadas pela rede neural, em comparação com as soluções analíticas.	25
Tabela 2 – Valores das métricas de erro (MSE , norma \mathcal{L}_2 e norma \mathcal{L}_∞) para as soluções aproximadas pela rede neural, em comparação com as soluções analíticas.	26

Lista de abreviaturas e siglas

PINNs	Physics Informed Neural Networks
DA	Diferenciação Automática
EDO	Equação Diferencial Ordinária
EDP	Equação Diferencial Parcial
MEF	Método de Elementos Finitos
MDF	Método de Diferenças Finitas
SIR	Susceptible-Infected-Removed
SEIR	Susceptible-Exposed-Infected-Removed
SEIRD	Susceptible-Exposed-Infected-Removed-Deceased
MSE	Mean Square Error
RMSE	Root Mean Square Error
MLP	Multi-layer Perceptron
EINNs	Epidemiology Informed Neural Networks
DINNs	Deceased Informed Neural Networks
AWGN	Additive White Gaussian Noise

Sumário

1	INTRODUÇÃO	13
2	REVISÃO DA LITERATURA	17
2.1	Redes Neurais Informadas pela Física	17
2.2	Modelos Compartimentais	18
2.3	Problemas Inversos	19
2.4	Aplicação de PINNs com Modelos Compartimentais	19
3	PROPOSTA DO TRABALHO	20
3.1	Estimativa de parâmetros	20
3.2	Testes com Dados Sintéticos	20
3.3	Testes com Dados Sintéticos Ruidosos	21
3.4	Testes com Base de Dados Reais	21
3.4.1	Bases de dados do DataSUS	21
3.4.2	Tratamento dos Dados	21
3.4.3	Arquitetura da Rede	21
3.4.4	Correlação com a Temperatura	22
3.5	Implementação	23
4	AVALIAÇÃO DO TRABALHO	24
4.1	Testes com Dados Sintéticos	24
4.2	Testes com Dados Ruidosos	25
4.3	Testes com Base de Dados Reais	26
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS	27
	REFERÊNCIAS	28
	APÊNDICES	32

1 Introdução

Equações diferenciais são equações que descrevem uma relação entre uma função e suas derivadas, são de particular interesse para as ciências naturais por sua aplicação na modelagem de fenômenos naturais e de leis físicas. A principal distinção entre elas é feita pelo número de variáveis independentes, no caso de apenas uma variável, chama-se de equação parcial ordinária (EDO), e equação diferencial parcial (EDP) para o caso mais de uma variável independente. Muitas das equações de interesse para áreas como engenharia, física, ecologia, química e epidemiologia, apenas para nomear algumas áreas, não possuem soluções analíticas conhecidas, fazendo com a busca por métodos numéricos seja uma área de pesquisa ativa da matemática aplicada. Ao longo dos século passado, foram desenvolvidos métodos para a solução de equações, como o método de diferenças finitas (MDF) e o método de elementos finitos (MEF). Entretanto é necessário uma discretização do domínio das equações, gerando uma malha de pontos em que a solução será resolvida. A criação desta malha (*mesh*) não é uma tarefa trivial, e a qualidade da solução obtida está diretamente ligada a obtenção desta malha (RAISSI; PERDIKARIS; KARNIADAKIS, 2019). Logo, há um interesse em métodos que não necessitem de malhas.

Uma rede neural artificial, ou apenas rede neural, é um modelo de computação inspirado no funcionamento do cérebro, seu desenvolvimento remonta a trabalhos pioneiros ainda nos anos 40 como (MCCULLOCH; PITTS, 1943). O potencial que redes neurais têm como solucionadores numéricos de equações diferenciais pode ser facilmente observado, pois redes neurais são aproximadores universais, ou seja são capazes de aproximar qualquer função, inclusive uma que seja a solução de uma equação diferencial. Esta propriedade é atestada pelo teorema da aproximação universal, demonstrado primeiramente para redes com largura arbitrária e função sigmóide por (CYBENKO, 1989), e para redes com no mínimo uma camada escondida por (HORNIK; STINCHCOMBE; WHITE, 1989). A versão do teorema demonstrada nesses artigos, atesta que que redes neurais com uma largura suficientemente grande são capazes de aproximar qualquer função. Anos depois, em (GRIPENBERG, 2003), a mesma propriedade foi demonstrada para redes com profundidade arbitrária e largura fixa.

O potencial das redes neurais para a solução numérica de equações diferenciais já havia percebido nos anos 90, em trabalhos como (PSICHOGIOS; UNGAR, 1992) que incorporou uma rede neural na modelagem de um bioreator para a estimativa de parâmetros que seriam difíceis de serem estimados apenas com princípios físicos e químicos. Trabalhos seguintes focariam em propor métodos para a solução de qualquer equação diferencial através de redes neurais. Um exemplo que pode ser citado é (MEADE; FERNANDEZ, 1994), sendo um dos primeiros a criar uma forma para solucionar EDOs

arbitrárias utilizando redes neurais, entretanto o método proposto necessita que certas limitações sejam impostas às entredas, pesos e viéses da rede. Um outro exemplo de proposta para a solução de qualquer equação diferencial é encontrada em (LAGARIS; LIKAS; FOTIADIS, 1998), sendo um dos primeiros trabalhos a propor um método não apenas para a solução de EDOs, mas também para sistemas de EDOs e até mesmo EDPs. Os autores separaram o problema em duas partes, as equações diferenciais em si e as condições de fronteira, sendo a primeira parte aproximada por uma rede neural *feedforward*, e a segunda parte é obtida por meio de restrições duras (*hard constraints*) impostas ao modelo.

Entretanto, foi apenas com (RAISSI; PERDIKARIS; KARNIADAKIS, 2019) e a introdução do conceito das *Physics Informed Neural Networks* (PINNs) que se renovou o interesse em aplicar redes neurais para a solução de problemas científicos. A grande diferença na abordagem das PINNs em relação a propostas anteriores, é tratar não apenas as equações que compõem o modelo, mas também as condições de fronteira e iniciais, como residuais a serem minimizados pela função de perda. Ou seja, tratando a solução de uma equação diferencial como um problema de minimização, sendo as equações e as condições de fronteira e iniciais tratadas como restrições leves (*soft constraints*). Outra inovação, é a incorporação de dados ao treinamento da rede neural, permitindo a descoberta de parâmetros do modelo, através da reformulação do mesmo como um problema inverso. Inclusive, os autores elaboraram diversos experimentos com dados perturbados para atestar a resiliência do método a dados ruidosos, indicando que PINNs podem ser treinadas com dados comprometidos sem afetar drasticamente a qualidade da solução obtida. Outra possibilidade que o uso de dados proporciona, é a descoberta de partes das equações que compõem o modelo,

Esta abordagem foi possível com o desenvolvimento de técnicas de diferenciação automática (DA). A importância que a DA tem para as PINNs está ligada ao fato de que incorporar as equações do modelo a função de perda faz com que o cálculo da derivada para o algoritmo de retropropagação seja uma tarefa muito complexa. A diferenciação automática permite que não seja necessário calcular uma derivada analítica, nem utilizar derivadas numéricas, que podem levar a erros de arredondamento. Apesar da técnica ter sido desenvolvida ainda nos anos 60 e 70 com os trabalhos de (WENGERT, 1964) para *forward accumulation*, e (LINNAINMAA, 1976) para *inverse accumulation*, foi com sua incorporação à bibliotecas que implementam estes algoritmos como PyTorch (PASZKE et al., 2019) e TensorFlow (ABADI et al., 2016), que facilitou o uso desta técnica, e a adoção de funções de perda mais complexas.

Desde sua concepção, PINNs vem sendo aplicadas para diversos problemas de engenharia, por exemplo, escoamento de fluxos incompressíveis (JIN et al., 2021). Solução de problemas de física, como física quântica como a equação de Schrödinger (JIN;

MATTHEAKIS; PROTOPAPAS, 2022) e modelos cosmológicos (CHANTADA et al., 2023). Pode-se também citar exemplos de aplicações para problemas de ecologia e química, como o problema de formação de padrões em modelos de reação-difusão, como em (GIAMPAOLO et al., 2022). Problemas envolvendo epidemiologia, como (SHAIER; RAISSI; SESHAIYER, 2022), em que os autores utilizam PINNs para ajustar modelos compartimentais para várias doenças como dengue, rubéola e gripe. Atestando a efetividade das PINNs para problemas de epidemiologia modelados por equações diferenciais.

Em epidemiologia, modelos compartimentais baseados em equações diferenciais são modelos que separam a população em compartimentos e modelam fluxos de indivíduos entre estes compartimentos como proporcional ao tamanho dos compartimentos envolvidos multiplicados por parâmetros. Estes parâmetros são taxas que indicam a evolução da doença ao longo do tempo, como a taxa de infecção, taxa de mortalidade e taxa de imunização da população. Fazendo com que a variação total de cada compartimento ao longo do tempo, ou seja a diferenciação do mesmo em relação ao tempo, seja igual a soma destes fluxos. Eles foram introduzidos por (KERMACK; MCKENDRICK, 1927), ao proporem o modelo *Susceptible-Infected-Removed* (SIR), que se separa a população, como o nome indica, em suscetíveis, infectados e recuperados. Modelos compartimentais são normalmente empregados em epidemiologia, em detrimento de modelos mais complexos, como aqueles baseados em agentes, por sua simplicidade e capacidade de indicar tendências a curto prazo na evolução de uma pandemia. Por serem modelos formados por um sistema de equações ordinárias que, se sabidas as condições iniciais de cada variável, ou seja o número inicial de indivíduos em cada compartimento, tem-se um problema de valor inicial (PVI), que pode ser facilmente resolvido por métodos numéricos mais simples, como o método de Runge-Kutta de quarta ordem.

Com a declaração da OMS (Organização Mundial de Saúde) em dezembro de 2019 da pandemia de COVID-19, o mundo teve que adotar medidas para conter o avanço da doença, como isolamento social e uso de máscaras. Junto às medidas de contenção da pandemia, governos mobilizaram os sistemas de saúde para coletar dados e permitir aos governantes, e entidades responsáveis pela saúde pública, tomar decisões acerca das medidas restritivas. Essas ações geraram uma quantidade grande de dados acerca da quantidade de casos notificados, internações, tempo de internação e mortes causadas pela COVID-19.

Pode-se citar (LONG; KHALIQ; FURATI, 2021) como um dos primeiros trabalhos a utilizar PINNs com modelos compartimentais para dados epidemiológicos. Os autores inovaram ao, não apenas utilizar PINNs para solucionar este problema, mas também ao modelar as taxas de variação entre os compartimentos como uma função que tem que ser aproximada pela rede neural. A vantagem desta abordagem é considerar que medidas de contenção do avanço da doença como isolamento social e vacinação da população

influenciam em taxas como infecção e mortalidade. Vale notar que no trabalho mencionado os autores focaram nas taxas de transmissão, períodos curtos de tempo, e os modelos foram capazes de aproximar apenas funções monotônicas para os parâmetros.

Neste trabalho é proposto uma abordagem utilizando PINNs para a indentificação de parâmetros em modelos compartimentais, considerando que há uma variabilidade na taxa de transmissão ao longo tempo. O principal objetivo é averiguar se PINNs são capazes de aproximar as taxas de infecção com precisão, mesmo que elas sigam diferentes tendências ao longo de um período considerável de tempo. Para atingir este objetivo são feitos testes com dados sintéticos para avaliar se as PINNs conseguem aproximar a taxa de infecção seguindo diferentes tipos de função. Em seguida, os mesmos experimentos são repetidos, mas adicionando ruído aos dados sintéticos, para avaliar a resiliência do método a dados ruidosos. Por fim, são realizados testes com dados reais.

O restante do trabalho está organizado da seguinte forma: no capítulo 2 são formalizados os conceitos de PINNs e modelos compartimentais; no capítulo 3 é detalhado o método proposto por este trabalho e são definidos os experimentos para averiguar a efetividade do método; no capítulo 4 são apresentados os resultados e é feita uma avaliação dos mesmos; por fim, no capítulo 5 são apresentadas as conclusões.

2 Revisão da Literatura

Neste capítulo é feita uma revisão dos principais conceitos utilizados neste trabalho, além de apresentar fundamentos para uma compreensão mais profunda dos mesmos.

2.1 Redes Neurais Informadas pela Física

Apresentadas em (RAISSI; PERDIKARIS; KARNIADAKIS, 2019), PINNs podem ser entendidas como uma forma avançada de regularização, ou como um problema de otimização que transforma as condições de fronteira e iniciais em penalizações para a função custo. PINNs são capazes de resolver problemas no seguinte formato:

$$\mathcal{D}(u(\mathbf{x}, t); \boldsymbol{\lambda}) = f(u, \mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \Omega, t \in I, \quad (2.1)$$

$$\mathcal{B}(u(\mathbf{x}, t)) = g(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \Gamma, t \in I, \quad (2.2)$$

$$\mathcal{I}(u(\mathbf{x}, t_0)) = q(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (2.3)$$

Em que $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ é o domínio espacial limitado pela fronteira Γ ; d é a dimensão do domínio espacial; $T = [t_0, t_f]$ é o intervalo de tempo, sendo $t_0 < t_f$; $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_d)$ é um vetor de coordenadas espaciais; t denota o tempo; $u = u(\mathbf{x}, t)$ denota a solução desconhecida do problema; $\boldsymbol{\lambda}$ é um vetor de parâmetros das equações; \mathcal{D} é um operador diferencias associado às equações; f é um termo fonte ou sorvedouro; \mathcal{B} and \mathcal{I} são operadores representando, respectivamente, as condições de fronteira e iniciais; por fim, g e q são funções conhecidas que definem essas condições.

A equação 2.4 define o termo da função de perda que engloba todos as equações que compõem o modelo. Trata-se de um treinamento não-supervisionado que busca minimizar o residual definido.

$$\mathcal{L}_{\text{física}}(\boldsymbol{\theta}) = \omega_{\text{domínio}} \mathcal{L}_{\mathcal{D}}(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\theta}) + \omega_{\text{fronteira}} \mathcal{L}_{\mathcal{B}}(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\theta}) + \omega_{\text{inicial}} \mathcal{L}_{\mathcal{I}}(\mathbf{x}, t_0, \boldsymbol{\theta}) \quad (2.4)$$

Sendo $\omega_{\text{domínio}}$, $\omega_{\text{fronteira}}$ e ω_{inicial} pesos atribuídos a cada um dos residuais. Caso haja dados disponíveis, é feito um treinamento supervisionado utilizando tais dados. A função de perda final da rede neural é então definida pela equação 2.5.

$$\mathcal{L}_{\text{total}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}) = \mathcal{L}_{\text{física}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}) + \omega_{\text{dados}} \mathcal{L}_{\text{dados}}(\boldsymbol{\theta}) \quad (2.5)$$

Aqui vale mencionar que esta não é a única forma de distribuir os pesos da loss, a implementação da biblioteca *DeepXDE* (LU et al., 2021) permite atribuir pesos diferentes a cada condição inicial e de fronteira. Então o problema passa a ser encontrar os conjuntos θ^* de parâmetros e vieses da rede, e o conjunto λ^* de parâmetros das equações, que minimiza a função 2.5.

$$(\theta^*, \lambda^*) = \arg \min_{\theta, \lambda} \mathcal{L}_{\text{total}}(\theta, \lambda), \quad (2.6)$$

Existem muitos métodos de otimização para encontrar os argumentos da equação 2.6. Pode-se citar o método de primeira ordem *Adam* (KINGMA; BA, 2014) e o método quase-newtoniano *BFGS*, ou como comumente usado, a sua versão para ambientes de pouca memória, o *L-BFGS* (LIU; NOCEDAL, 1989).

A figura 1 mostra uma representação gráfica das PINNs.

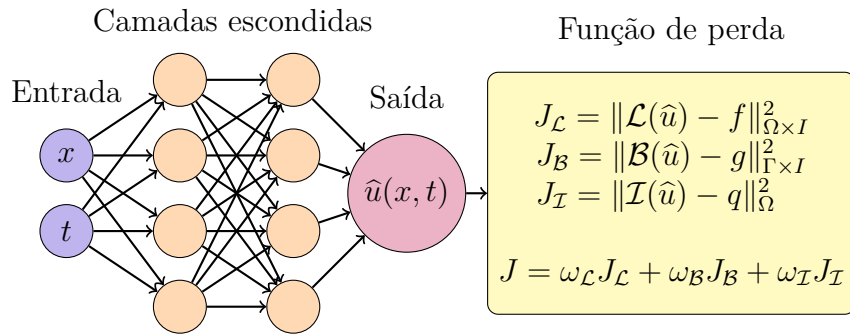


Figura 1 – Representação gráfica das PINNs. Fonte: elaborada pelos autores.

A formulação acima vale tanto para problemas diretos, quanto para problemas inversos

2.2 Modelos Compartimentais

Baseados neste trabalho seminal, foram propostos outros modelos com mais mais compartimentos como o *SEIRD* (GILES, 1977) que inclui um compartimento para indivíduos que foram expostos a doença, mas ainda não manifestaram sintomas. Outro exemplo é o *SIRV* (SCHLICKEISER; KRÖGER, 2021) que inclui um compartimento para vacinados.

Em (KENDALL, 2023), é introduzido um modelo estocástico baseado no trabalho já citado.

R_0 número básico

$$R_0 = \frac{\beta}{\gamma} \quad (2.7)$$

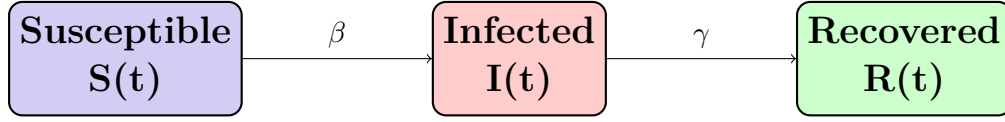


Figura 2 – Grafo para o *SIR*. Fonte: elaborada pelos autores.

Apresentado no trabalho seminal de (KERMACK; MCKENDRICK, 1927), o modelo *SIR* é definido pelo conjunto de equações 2.8, 2.9 e 2.10.

$$\frac{dS(t)}{dt} = -\beta S(t)I(t), \quad t > t_0, \quad (2.8)$$

$$\frac{dI(t)}{dt} = \beta S(t)I(t) - \gamma I(t), \quad t > t_0, \quad (2.9)$$

$$\frac{dR(t)}{dt} = \gamma I(t), \quad t > t_0, \quad (2.10)$$

$$S(t) + I(t) + R(t) = N, \quad t > t_0, \quad (2.11)$$

O modelo pode ser entendido com um grafo... A figura 2 ilustra o modelo *SIR*.

2.3 Problemas Inversos

Problemas inversos são mal-postos...

Identificabilidade de um modelo...

2.4 Aplicação de PINNs com Modelos Compartimentais

()

Modelos de ordem fracionária (LI et al., 2025)

Sir reação-difusão (BERTAGLIA et al., 2022)

Um exemplo utilizando redes neurais recorrentes pode ser encontrado em (RODRIGUEZ et al., 2023)

No artigo original, são utilizados *Multi-layer Perceptrons* (MLPs) como arquitetura das redes, mas há propostas com utilizando outras arquiteturas. Uma proposta utilizando redes neurais convolucionais pode ser encontrada em (SHI; ZENG; LIANG, 2024). Uma proposta utilizando PINNs combinado com métodos Bayesianos pode ser encontrada em (YANG; MENG; KARNIADAKIS, 2021), esta abordagem é particularmente interessante para problemas inversos, ao transformar a estimativa dos parâmetros numa distribuição, no lugar de um valor fixo.

3 Proposta do Trabalho

Nesta seção é apresentada a proposta para a estimativa dos parâmetros do modelo compartimental e os testes para averiguar a efetividade do método.

3.1 Estimativa de parâmetros

Os modelos compartimentais possuem parâmetros de transmissão e mortalidade fixos, considerando que estes modelos foram pensados apenas para dar uma projeção de como uma epidemia evoluirá. Entretanto, medidas de afastamento social são capazes de alterar o parâmetro de transmissão ao longo do tempo. Utilizando (LONG; KHALIQ; FURATI, 2021) como inspiração, é proposto obter o parâmetro β como uma função em função do tempo. A rede neural deverá se ajustar a um $\beta(t)$. A taxa de mortalidade de uma doença permanece constante caso não haja um plano de vacinação, logo não há a necessidade de estimá-lo.

$$\frac{dS(t)}{dt} = -\beta(t)S(t)I(t), \quad t > t_0, \quad (3.1)$$

$$\frac{dI(t)}{dt} = \beta(t)S(t)I(t) - \gamma I(t), \quad t > t_0, \quad (3.2)$$

$$\frac{dR(t)}{dt} = \gamma I(t), \quad t > t_0, \quad (3.3)$$

Como $S(t) + I(t) + R(t) = N$ para todo $t > t_0$, podemos simplificar as equações acima (MILLEVOI; PASETTO; FERRONATO, 2024)

3.2 Testes com Dados Sintéticos

Para averiguar se o método proposto funcionará bem com dados reais, será feito primeiramente um teste com dados sintéticos obtidos a partir da solução do modelo compartimental utilizando o método de Runge-Kutta de 4º ordem implementado na biblioteca *SciPy* (VIRTANEN et al., 2020). As condições iniciais do problema estão definidas nas equações abaixo.

$$S_0 = 0.99 \quad (3.4)$$

$$I_0 = 0.01, \quad (3.5)$$

$$R_0 = 0 \quad (3.6)$$

Para simular uma variação anual na taxa de infecção de uma doença, o parâmetro $\beta(t)$ é aproximado por uma função seno.

$$\beta(t) = \sin(t/12) + \beta_{min} \quad (3.7)$$

Utilizando

3.3 Testes com Dados Sintéticos Ruidosos

Segundo (RAISSI; PERDIKARIS; KARNIADAKIS, 2019), PINNs são resilientes a dados ruidosos. Para testar se PINNs são capazes de ajustar a adicionar ruído gaussiano aos dados sintéticos. A equação 3.8 descreve este processo.

$$Z_t \sim \mathcal{N}(0, \sigma) \quad (3.8)$$

$$\mathcal{N}_t = \mathcal{C}_t + Z_t \quad (3.9)$$

3.4 Testes com Base de Dados Reais

Os dados foram coletados do plataforma *OpenDataSUS* (SAÚDE, 2024)

3.4.1 Bases de dados do DataSUS

3.4.2 Tratamento dos Dados

Janela móvel de 7 dias como em (HAN et al., 2024), (LONG; KHALIQ; FURATI, 2021) e (SHAMSARA; KÖNIG; PFEIFER, 2025) para suavizar o ruído

Pesos ajustáveis entre a loss física e a loss dos dados como em (LONG; KHALIQ; FURATI, 2021) e (SHAMSARA; KÖNIG; PFEIFER, 2025)

Segundo (BONFANTI et al., 2024), PINNs não generalizam bem fora do domínio de treinamento. PINNs podem estimar os parâmetros para fora do domínio de treinamento como em (MILLEVOI; PASETTO; FERRONATO, 2024).

Assim como em (GHOSH et al., 2023), fazer testes com lacunas nos dados para testar a resiliência do método.

3.4.3 Arquitetura da Rede

Baseando-se em (SHAIER; RAISSI; SESHAIYER, 2022), o número de camadas escolhido foi...

Como em (MILLEVOI; PASETTO; FERRONATO, 2024), aplicar uma *hard-constraint* na rede neural ao utilizar nos nós de saída uma função de ativação que retorna apenas valores positivos.

3.4.4 Correlação com a Temperatura

A gripe é uma doença com maior taxa de transmissão nos meses frios. Para testar se a transmissão em função do tempo aproximada pelo modelo é plausível, é feito um teste de correlação de *Pearson* entre $\beta(t)$ e a temperatura ao longo do ano.

Sendo β e T duas amostras de tamanho n com dados pareados (β_i, T_i) :

$$\rho = \frac{\sum_{i=1}^n (\beta_i - \bar{\beta})(T_i - \bar{T})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (\beta_i - \bar{\beta})^2 \sum_{i=1}^n (T_i - \bar{T})^2}} \quad (3.10)$$

Espera-se um valor de ρ acima de 0.5 para indicar um correlação no mínimo moderada entre a taxa de transmissão β e a temperatura.

For two variables X and Y converted to ranks $R(x_i)$ and $R(y_i)$:

$$r_s = 1 - \frac{6 \sum_{i=1}^n d_i^2}{n(n^2 - 1)} \quad (3.11)$$

where:

- $d_i = R(x_i) - R(y_i)$ is the difference between the two ranks of each observation
- n is the number of observations

Spearman's correlation is equivalent to calculating Pearson's correlation on the rank values:

$$r_s = \frac{\sum_{i=1}^n (R(x_i) - \bar{R}_x)(R(y_i) - \bar{R}_y)}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (R(x_i) - \bar{R}_x)^2 \sum_{i=1}^n (R(y_i) - \bar{R}_y)^2}} \quad (3.12)$$

where \bar{R}_x and \bar{R}_y are the mean ranks.

When ties exist in the data, use this adjusted formula:

$$r_s = \frac{\sum_{i=1}^n (R(x_i) - \bar{R}_x)(R(y_i) - \bar{R}_y)}{\sqrt{\left[\sum_{i=1}^n (R(x_i) - \bar{R}_x)^2 - T_x\right] \left[\sum_{i=1}^n (R(y_i) - \bar{R}_y)^2 - T_y\right]}} \quad (3.13)$$

where the tie correction factors T_x and T_y are calculated as:

$$T = \sum \frac{t^3 - t}{12} \quad (3.14)$$

for each set of tied ranks, with t being the number of tied values in each group.

3.5 Implementação

A implementação foi feita utilizando a biblioteca *DeepXDE* (LU et al., 2021), utilizando o *TensorFlow* (ABADI et al., 2016) como *backend*. Todo o código, dados utilizados nos experimentos, encontram-se disponíveis no repositório público no GitHub¹.

¹ <<https://github.com/ginbar/inverse-cm>>

4 Avaliação do Trabalho

4.1 Testes com Dados Sintéticos

A figura 4 mostra o valor de beta ao longo do tempo.

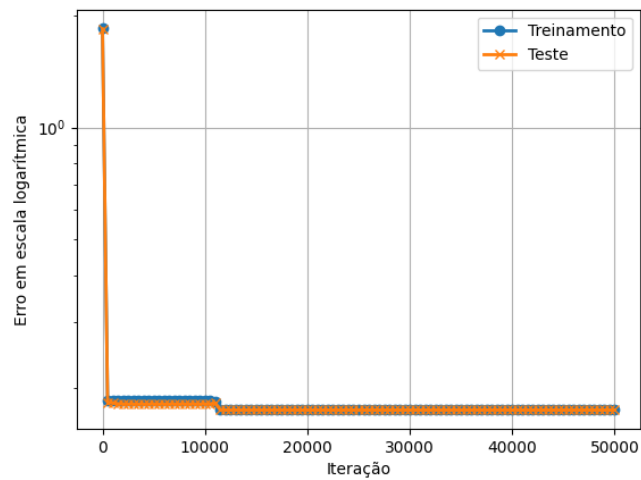


Figura 3 – Na primeira. Fonte: elaborada pelos autores.

A figura 4 mostra o valor de beta ao longo do tempo.

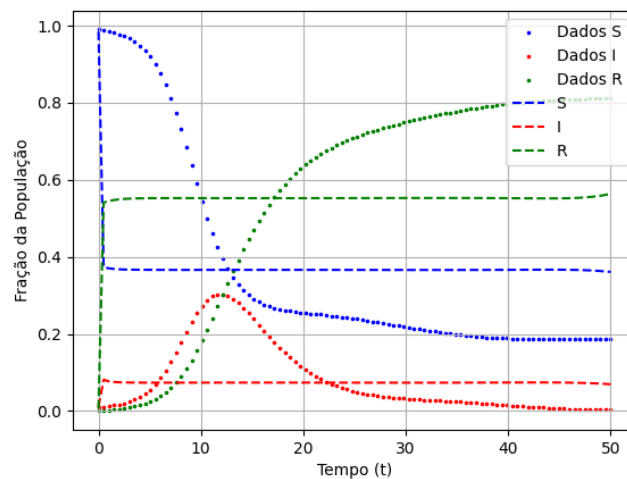


Figura 4 – Na primeira. Fonte: elaborada pelos autores.

A figura 5 mostra o valor de beta ao longo do tempo.

A tabela 1 mostra os valores para

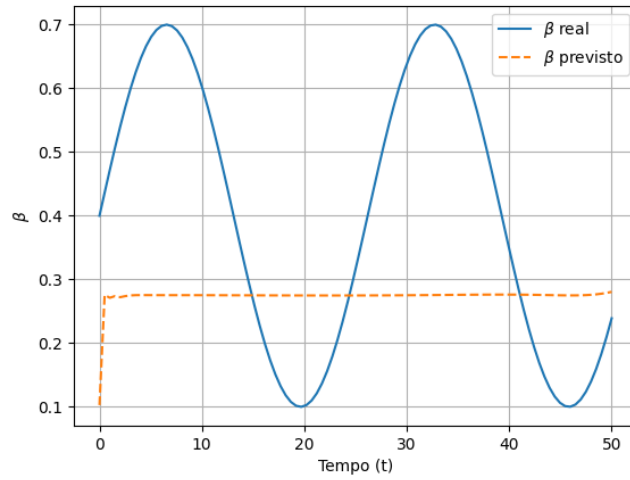


Figura 5 – Na primeira. Fonte: elaborada pelos autores.

Tabela 1 – Valores das métricas de erro (MSE , norma \mathcal{L}_2 e norma \mathcal{L}_∞) para as soluções aproximadas pela rede neural, em comparação com as soluções analíticas.

Compartimento	Métricas		
	MSE	\mathcal{L}_2	\mathcal{L}_∞
S	$8,628 \times 10^{-6}$	$2,444 \times 10^{-3}$	$1,182 \times 10^{-2}$
I	$1,005 \times 10^{-6}$	$1,252 \times 10^{-2}$	$4,81 \times 10^{-3}$
R	$1,997 \times 10^{-6}$	$4,913 \times 10^{-3}$	$8,635 \times 10^{-3}$

4.2 Testes com Dados Ruidosos

A figura 4 mostra o valor de beta ao longo do tempo.

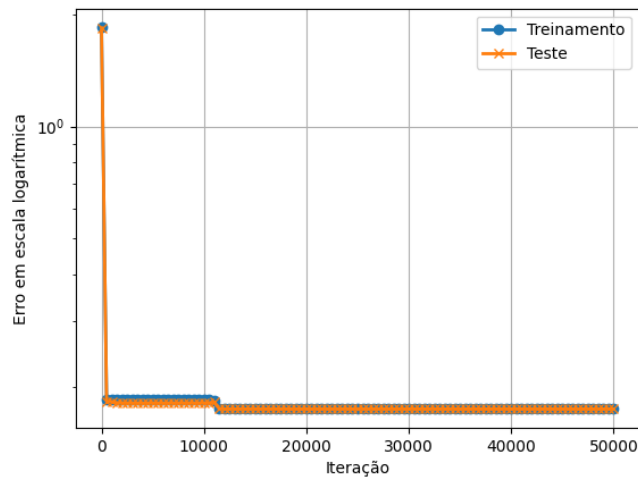


Figura 6 – Na primeira. Fonte: elaborada pelos autores.

A figura 7 mostra o valor de beta ao longo do tempo.

A figura 8 mostra o valor de beta ao longo do tempo.

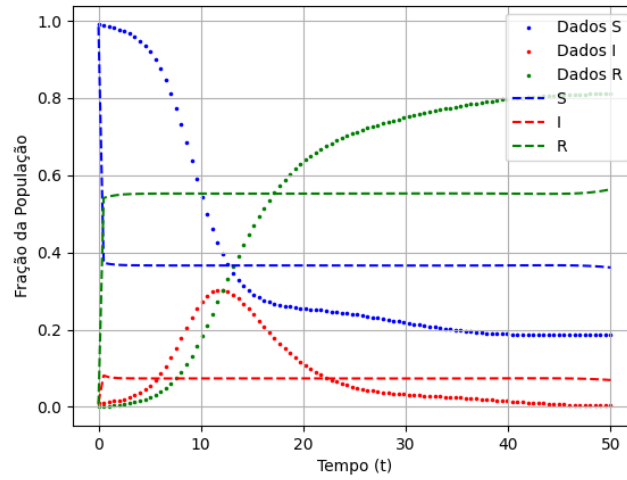


Figura 7 – Na primeira. Fonte: elaborada pelos autores.

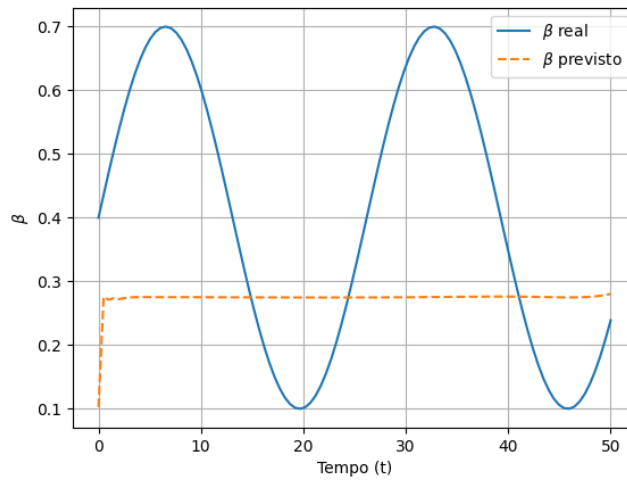


Figura 8 – Na primeira. Fonte: elaborada pelos autores.

A tabela 2 mostra os valores para

Tabela 2 – Valores das métricas de erro (MSE , norma \mathcal{L}_2 e norma \mathcal{L}_∞) para as soluções aproximadas pela rede neural, em comparação com as soluções analíticas.

Compartimento	Métricas		
	MSE	\mathcal{L}_2	\mathcal{L}_∞
S	$8,628 \times 10^{-6}$	$2,444 \times 10^{-3}$	$1,182 \times 10^{-2}$
I	$1,005 \times 10^{-6}$	$1,252 \times 10^{-2}$	$4,81 \times 10^{-3}$
R	$1,997 \times 10^{-6}$	$4,913 \times 10^{-3}$	$8,635 \times 10^{-3}$

4.3 Testes com Base de Dados Reais

5 Considerações Finais

Aplicar PINNs Bayesianas ([YANG; MENG; KARNIADAKIS, 2021](#)) para estimar o desvio padrão do $\beta(t)$.

Referências

ABADI, M. et al. Tensorflow: A system for large-scale machine learning. *12th USENIX symposium on operating systems design and implementation (OSDI 16)*, p. 265–283, 2016. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 23.

BERTAGLIA, G. et al. Asymptotic-preserving neural networks for multiscale hyperbolic models of epidemic spread. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, v. 32, n. 10, p. 1949 – 1985, 2022. Cited by: 17; All Open Access, Green Open Access. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85140742473&doi=10.1142%2fS0218202522500452&partnerID=40&md5=170623db80cb3dca5ce350b87afb42f1>>. Citado na página 19.

BONFANTI, A. et al. On the generalization of PINNs outside the training domain and the hyperparameters influencing it. *Neural Computing and Applications*, v. 36, n. 36, p. 22677–22696, dez. 2024. ISSN 1433-3058. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s00521-024-10178-2>>. Citado na página 21.

CHANTADA, A. T. et al. Cosmology-informed neural networks to solve the background dynamics of the universe. *Phys. Rev. D*, American Physical Society, v. 107, p. 063523, Mar 2023. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.107.063523>>. Citado na página 15.

CYBENKO, G. Approximation by superpositions of a sigmoidal function. *Mathematics of Control, Signals, and Systems*, v. 2, p. 303–314, 1989. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF02551274>>. Citado na página 13.

GHOSH, S. et al. Understanding the implications of under-reporting, vaccine efficiency and social behavior on the post-pandemic spread using physics informed neural networks: A case study of china. *PLOS ONE*, v. 18, 11 2023. Citado na página 21.

GIAMPAOLO, F. et al. Physics-informed neural networks approach for 1D and 2D Gray-Scott systems. *Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences*, Springer, v. 9, n. 1, p. 1–17, maio 2022. Disponível em: <<https://hal.science/hal-04456081>>. Citado na página 15.

GILES, P. The mathematical theory of infectious diseases and its applications. *Journal of the Operational Research Society*, v. 28, n. 2, p. 479–480, jul. 1977. ISSN 1476-9360. Disponível em: <<https://doi.org/10.1057/jors.1977.92>>. Citado na página 18.

GRIPENBERG, G. Approximation by neural networks with a bounded number of nodes at each level. *Journal of Approximation Theory*, v. 122, n. 2, p. 260–266, 2003. ISSN 0021-9045. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021904503000789>>. Citado na página 13.

HAN, S. et al. Approaching epidemiological dynamics of covid-19 with physics-informed neural networks. *Journal of the Franklin Institute*, v. 361, n. 6, 2024. Cited by: 12; All Open Access, Green Open Access. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85186494686&doi=10.1016%2fj>>.

jfranklin.2024.106671&partnerID=40&md5=c6f62df7ebafa637a85e89ac5ee26f45>. Citado na página 21.

HORNIK, K.; STINCHCOMBE, M.; WHITE, H. Multilayer feedforward networks are universal approximators. *Neural Networks*, v. 2, n. 5, p. 359–366, 1989. ISSN 0893-6080. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0893608089900208>>. Citado na página 13.

JIN, H.; MATTHEAKIS, M.; PROTOPAPAS, P. Physics-informed neural networks for quantum eigenvalue problems. In: IEEE. *2022 International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN)*. [S.l.], 2022. p. 1–8. Citado na página 15.

JIN, X. et al. Nsfnets (navier-stokes flow nets): Physics-informed neural networks for the incompressible navier-stokes equations. *Journal of Computational Physics*, v. 426, p. 109951, 2021. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999120307257>>. Citado na página 14.

KENDALL, D. G. Deterministic and stochastic epidemics in closed populations. In: _____. *Volume 4 Proceedings of the Third Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability, Volume IV*. Berkeley: University of California Press, 2023. p. 149–166. ISBN 9780520350717. Disponível em: <<https://doi.org/10.1525/9780520350717-011>>. Citado na página 18.

KERMACK, W. O.; MCKENDRICK, A. G. A contribution to the mathematical theory of epidemics. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, v. 115, n. 772, p. 700–721, 1927. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 19.

KINGMA, D. P.; BA, J. Adam: A method for stochastic optimization. *International Conference on Learning Representations*, 2014. Citado na página 18.

LAGARIS, I. E.; LIKAS, A.; FOTIADIS, D. I. Artificial neural networks for solving ordinary and partial differential equations. *IEEE Transactions on Neural Networks*, v. 9, n. 5, p. 987–1000, Sep. 1998. ISSN 1045-9227. Citado na página 14.

LI, R. et al. Dynamic analysis and data-driven inference of a fractional-order seihdr epidemic model with variable parameters. *Mathematics and Computers in Simulation*, v. 230, p. 1 – 19, 2025. Cited by: 0. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85208764841&doi=10.1016%2fj.matcom.2024.10.042&partnerID=40&md5=5df06da84bff8326ce9e8e000816f191>>. Citado na página 19.

LINNAINMAA, S. Taylor expansion of the accumulated rounding error. *BIT Numerical Mathematics*, v. 16, n. 2, p. 146–160, jun. 1976. ISSN 1572-9125. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF01931367>>. Citado na página 14.

LIU, D. C.; NOCEDAL, J. On the limited memory BFGS method for large scale optimization. *Mathematical Programming*, v. 45, p. 503–528, 1989. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF01589116>>. Citado na página 18.

LONG, J.; KHALIQ, A.; FURATI, K. Identification and prediction of time-varying parameters of covid-19 model: a data-driven deep learning approach. *International Journal of Computer Mathematics*, v. 98, n. 8, p. 1617 – 1632,

2021. Cited by: 33; All Open Access, Green Open Access. Disponível em: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85106627387&doi=10.1080%2f00207160.2021.1929942&partnerID=40&md5=803b3e59fc4241f274b002aae280c6ef>. Citado 3 vezes nas páginas 15, 20 e 21.
- LU, L. et al. Deepxde: A deep learning library for solving differential equations. *SIAM Review*, Society for Industrial & Applied Mathematics (SIAM), v. 63, n. 1, p. 208–228, jan. 2021. ISSN 1095-7200. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1137/19M1274067>. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 23.
- MCCULLOCH, W. S.; PITTS, W. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. *The Bulletin of Mathematical Biophysics*, v. 5, n. 4, p. 115–133, dez. 1943. ISSN 1522-9602. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/BF02478259>. Citado na página 13.
- MEADE, A. J.; FERNANDEZ, A. A. The numerical solution of linear ordinary differential equations by feedforward neural networks. *Math. Comput. Model.*, Elsevier Science Publishers B. V., v. 19, n. 12, p. 1–25, 1994. Citado na página 13.
- MILLEVOI, C.; PASETTO, D.; FERRONATO, M. A physics-informed neural network approach for compartmental epidemiological models. *PLoS Computational Biology*, v. 20, n. 9, 2024. Cited by: 2; All Open Access, Gold Open Access, Green Open Access. Disponível em: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85203432916&doi=10.1371%2fjournal.pcbi.1012387&partnerID=40&md5=5fc619838ca1b408adc707c6a90ac0a8>. Citado 3 vezes nas páginas 20, 21 e 22.
- PASZKE, A. et al. Pytorch: An imperative style, high-performance deep learning library. In: *Advances in Neural Information Processing Systems*. [S.l.: s.n.], 2019. p. 8024–8035. Citado na página 14.
- PSICHOGIOS, D. C.; UNGAR, L. H. A hybrid neural network-first principles approach to process modeling. *AIChE Journal*, v. 38, n. 10, p. 1499–1511, 1992. Citado na página 13.
- RAISSI, M.; PERDIKARIS, P.; KARNIADAKIS, G. E. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 378, p. 686–707, 2019. Citado 4 vezes nas páginas 13, 14, 17 e 21.
- RODRIGUEZ, A. et al. Einns: Epidemiologically-informed neural networks. In: *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*. [S.l.: s.n.], 2023. v. 37. Citado na página 19.
- SAÚDE, M. da. *Notificações de Síndrome Gripal - 2024*. 2024. <https://opendatasus.saude.gov.br/dataset/notificacoes-de-sindrome-gripal-leve-2024>. Accessed: 2025-09-07. Disponível em: <https://opendatasus.saude.gov.br/dataset/notificacoes-de-sindrome-gripal-leve-2024>. Citado na página 21.
- SCHLICKESER, R.; KRÖGER, M. Analytical modeling of the temporal evolution of epidemics outbreaks accounting for vaccinations. *Physics*, v. 3, n. 2, p. 386–426, 2021. ISSN 2624-8174. Disponível em: <https://www.mdpi.com/2624-8174/3/2/28>. Citado na página 18.
- SHAIER, S.; RAISSI, M.; SESHAIYER, P. Data-driven approaches for predicting

spread of infectious diseases through dinns: Disease informed neural networks. *Letters in Biomathematics*, v. 9, n. 1, p. 71 – 105, 2022. Cited by: 18. Disponível em: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85136169389&partnerID=40&md5=2f5c407588258f3d630368da396af06a>. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 21.

SHAMSARA, E.; KÖNIG, F.; PFEIFER, N. An informed deep learning model of the omicron wave and the impact of vaccination. *Computers in Biology and Medicine*, v. 191, 2025. Cited by: 0. Disponível em: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-105002151013&doi=10.1016%2fj.compbiomed.2025.109968&partnerID=40&md5=b1244c15295694df7ec626c4394d6c0d>. Citado na página 21.

SHI, P.; ZENG, Z.; LIANG, T. Physics-informed convnet: Learning physical field from a shallow neural network. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, v. 132, p. 107911, 2024. ISSN 1007-5704. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1007570424000972>. Citado na página 19.

VIRTANEN, P. et al. SciPy 1.0: Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python. *Nature Methods*, v. 17, p. 261–272, 2020. Citado na página 20.

WENGERT, R. E. A simple automatic derivative evaluation program. *Commun. ACM*, Association for Computing Machinery, New York, NY, USA, v. 7, n. 8, p. 463–464, ago. 1964. ISSN 0001-0782. Disponível em: <https://doi.org/10.1145/355586.364791>. Citado na página 14.

YANG, L.; MENG, X.; KARNIADAKIS, G. E. B-pinns: Bayesian physics-informed neural networks for forward and inverse pde problems with noisy data. *Journal of Computational Physics*, v. 425, p. 109913, 2021. ISSN 0021-9991. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999120306872>. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 27.

Apêndices