

REDES NEURAIS INFORMADAS PELA FÍSICA APLICADAS AO MODELO EPIDEMIOLÓGICO SIR: DO PROBLEMA DIRETO À IDENTIFICABILIDADE PRÁTICA DE PARÂMETROS

Reginaldo José da Silva¹, Angela Leite Moreno², Mara Lúcia Martins Lopes¹

¹ Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, Ilha Solteira, Brasil
(reginaldo.silva@unesp.br)

² Universidade Federal de Alfenas, Alfenas, Brasil

Resumo: Este trabalho aplica redes neurais informadas pela física ao modelo SIR nos problemas direto e inverso. Reparametrização logarítmica de I e marcha temporal evitam a solução trivial sem epidemia, com erro relativo abaixo de 11%. No problema inverso, amostragem informada reduz o erro de β de 18,08% para 3,69% e o de γ de 9,76% para 0,92%, frente à amostragem ingênua, revelando o papel da identificabilidade prática na estimação de parâmetros.

Palavras-chave: Modelo SIR; Problema Inverso; Identificabilidade; Aprendizado de Máquina

INTRODUÇÃO

Modelos compartimentais figuram entre as ferramentas mais usadas para descrever a propagação de doenças infecciosas desde a formulação clássica de Kermack e McKendrick (1927), que dividiram uma população fechada em três classes mutuamente exclusivas, suscetíveis, infectados e recuperados, governadas por um sistema de equações diferenciais ordinárias com dois parâmetros: a taxa de transmissão β e a taxa de recuperação γ . E apesar de sua simplicidade matemática, calibrar esse tipo de modelo a partir de dados reais de incidência continua sendo tarefa não trivial. Sistemas de vigilância epidemiológica raramente capturam a incidência verdadeira de uma doença: parte dos casos nunca procura atendimento médico, e parte dos casos atendidos nunca é notificada aos sistemas oficiais, fenômeno quantificado por Gibbons et al. (2014) em uma revisão de métodos de correção de subnotificação. Chowell (2017) acrescenta que, mesmo quando os dados estão disponíveis, a calibração de parâmetros em modelos epidemiológicos costuma sofrer de identificabilidade prática limitada, sobretudo no início de um surto, quando poucas observações estão disponíveis e o ruído de medição é proporcionalmente maior. Esses dois problemas, quantidade escassa de dados e qualidade limitada deles, motivam boa parte do desenho experimental deste trabalho.

Redes neurais informadas pela física (*Physics-Informed Neural Networks*, PINNs), introduzidas por Raissi et al. (2019) e posteriormente sistematizadas por Karniadakis et al. (2021), no contexto mais amplo do aprendizado de máquina guiado por conhecimento

físico prévio, oferecem uma alternativa aos métodos tradicionais de ajuste ao incorporar a própria equação diferencial como termo de regularização durante o treinamento da rede. Em vez de depender exclusivamente de dados observados, a rede é treinada para satisfazer, em pontos de colocação amostrados no domínio, tanto as condições iniciais do problema quanto a equação diferencial em si, calculada por diferenciação automática. Essa estrutura contrasta com os métodos frequentistas tradicionais de calibração epidemiológica descritos por Chowell (2017), que ajustam os parâmetros de um integrador numérico externo (como Runge-Kutta) minimizando o erro em relação aos dados observados; nas PINNs, a integração numérica é substituída pela própria rede neural, que aprende simultaneamente a satisfazer a equação e a se ajustar aos dados.

Essa característica se mostrou atraente para modelos epidemiológicos durante a pandemia de COVID-19, quando a escassez e o ruído dos dados tornaram a calibração de parâmetros de transmissão um problema urgente e, ao mesmo tempo, mal condicionado. Dandekar, Rackauckas e Barbastathis (2020) ilustram esse cenário acoplando uma rede neural ao modelo SIR clássico para estimar, a partir de dados públicos de vários países, o efeito de políticas de quarentena sobre o número de reprodução efetivo, tarefa dificultada pelos mesmos problemas de subnotificação documentados por Gibbons et al. (2014). Millevoi, Pasetto e Ferronato (2024) desenvolveram uma implementação de PINNs voltada especificamente a modelos compartimentais, na qual a rede estima simultaneamente as variáveis de estado e parâmetros variáveis no tempo. Kharazmi et al. (2021) estenderam essa linha de investigação examinando,

também por meio de PINNs, uma família de modelos epidemiológicos com atenção explícita a quais parâmetros podem de fato ser recuperados a partir dos dados disponíveis, argumento que se conecta à distinção entre identificabilidade estrutural e identificabilidade prática discutida por Tuncer e Le (2018): a primeira pergunta se os parâmetros poderiam em princípio ser determinados de forma única com dados infinitos e sem ruído; a segunda pergunta se isso é possível com o volume e a qualidade de dados realmente disponíveis, questão central para o problema inverso investigado a seguir.

Este trabalho investiga a aplicação de PINNs ao modelo SIR em dois problemas complementares. No problema direto, a rede aproxima a solução do sistema de equações diferenciais para parâmetros de transmissão e recuperação conhecidos, e o resultado é comparado a uma solução numérica de referência. No problema inverso, esses parâmetros são desconhecidos e precisam ser estimados a partir de observações sintéticas ruidosas de suscetíveis e infectados, tarefa que expõe uma dificuldade pouco discutida em trabalhos introdutórios sobre o tema: a estimação de β e γ não depende apenas da qualidade da rede ou do algoritmo de otimização, mas também de onde no tempo os dados foram coletados. Assim, os objetivos deste trabalho são três: propor uma arquitetura de PINN capaz de resolver de forma estável o problema direto do modelo SIR, mesmo diante da transição abrupta entre crescimento exponencial e pico do surto; estimar β e γ no problema inverso a partir de dados sintéticos ruidosos; e quantificar, por meio de uma análise de sensibilidade, como a estratégia de amostragem temporal dos dados afeta a identificabilidade prática desses parâmetros.

MATERIAL E MÉTODOS

Modelo epidemiológico e normalização temporal

O estudo trabalha com a versão adimensional do modelo SIR, com as variáveis de estado expressas como fração da população total ($N = 1$, de modo que $S + I + R = 1$ em todo instante). Os parâmetros verdadeiros adotados para gerar a solução de referência e os dados sintéticos são $\beta = 0,4$ e $\gamma = 0,1$, com condição inicial $S(0) = 0,999$, $I(0) = 0,001$ e $R(0) = 0$, observada por um horizonte de $T = 160$ dias. A dinâmica entre as três classes é governada pelo sistema

$$\frac{dS}{dt} = -\beta SI \quad (1)$$

$$\frac{dI}{dt} = \beta SI - \gamma I \quad (2)$$

$$\frac{dR}{dt} = \gamma I \quad (3)$$

nessas três equações, $S(t)$, $I(t)$ e $R(t)$ são as frações de suscetíveis, infectados e recuperados no instante t , respectivamente, e t denota o tempo medido em dias desde o início do surto. Os dois parâmetros do modelo, β e γ , são constantes: β é a taxa de transmissão (com que velocidade um suscetível se torna infectado ao entrar em contato com infectados) e γ é a taxa de recuperação (com que velocidade um infectado deixa de ser infeccioso). S , I , R , β e γ são, portanto, as grandezas verdadeiras do modelo epidemiológico, definidas pelas próprias equações diferenciais, e não algo que a rede neural produz; a rede entra em cena a seguir, para aproximá-las.

Redes neurais treinam melhor quando suas entradas estão em uma escala próxima da unidade, e o tempo em dias varia de 0 a 160, uma escala grande demais para ser passada diretamente à rede. Por isso o tempo físico t é reescalado para a variável adimensional $\hat{t} = t/T$, onde $T = 160$ dias é o horizonte total considerado; dessa forma, t varia sempre entre 0 e 1, independentemente de quantos dias o problema realmente abranja, e é $\hat{t}$, não t , que a rede recebe como entrada. Como as equações do modelo SIR estão escritas em função de t , e não de $\hat{t}$, as derivadas calculadas pela rede neural em relação a t precisam ser convertidas de volta para derivadas em relação a $\hat{t}$; como $t = T\hat{t}$, a regra da cadeia fornece essa conversão:

$$\frac{dX}{dt} = \frac{dX}{d\hat{t}} \frac{d\hat{t}}{dt} = \frac{1}{T} \frac{dX}{d\hat{t}}, \quad X \in \{S, I, R\} \quad (4)$$

nessa equação, X representa, genericamente, qualquer uma das três variáveis de estado (S , I ou R), e a igualdade vale para as três. Ela será usada adiante para reescrever o sistema de equações do modelo inteiramente em termos de derivadas relativas a $\hat{t}$, que é o que a rede neural efetivamente calcula.

Antes de descrever a arquitetura da rede, vale fixar uma convenção de notação usada em todo o restante do texto. Letras maiúsculas (S, I, R) denotam sempre as variáveis verdadeiras do modelo, definidas pelas Equações 1 a 3. Letras minúsculas (s, i, r) denotam as aproximações dessas mesmas variáveis produzidas pela rede neural: como a rede nunca tem acesso às variáveis verdadeiras durante o treinamento, apenas às equações que elas deveriam satisfazer, s , i e r são o que a rede efetivamente calcula, e a qualidade do treinamento é medida por o quão perto s , i e r ficam de S , I e R . O acento circunflexo em $\hat{t}$ indica tempo normalizado, como definido acima, para distingui-lo do tempo físico t , em dias.

Arquitetura da rede e resíduo da equação diferencial

A rede neural utilizada é um Perceptron Multicamadas (*Multilayer Perceptron*, MLP) com ativação tangente hiperbólica, que recebe o escalar t e produz duas



saídas brutas, a partir das quais $s(\hat{t})$ e $i(\hat{t})$ são calculados. A terceira variável de estado, $r(\hat{t})$, aproximação de $R(t)$, não é produzida diretamente pela rede: como $S + I + R = 1$, basta impor

$$r = 1 - s - i \quad (5)$$

para que a conservação populacional seja satisfeita de forma exata em qualquer ponto do domínio, independentemente da qualidade do treinamento. Essa mesma letra r reaparece mais adiante com um significado totalmente diferente, para denotar o resíduo de uma equação diferencial; para evitar ambiguidade, o resíduo será sempre identificado pelo símbolo caligráfico $\mathcal{R}$, nunca por r minúsculo.

A primeira saída bruta da rede é usada diretamente como $s(\hat{t})$. A segunda exige uma parametrização específica. Quando $I = 0$, a equação de I (Equação 2) se anula identicamente para qualquer valor de S , β ou γ , de modo que $I \equiv 0$ é um ponto fixo exato da dinâmica, e não apenas uma aproximação grosseira dela. Como a condição inicial $I(0) = 0,001$ já é pequena, uma rede que aproximasse I diretamente como saída bruta teria, nesse ponto fixo, um mínimo local de fácil acesso ao gradiente durante as primeiras iterações do treinamento, risco de convergência para soluções fisicamente triviais já documentado para outras classes de equações com transientes rápidos por Krishnapriyan et al. (2021). Para eliminar esse risco, a segunda saída da rede, denotada por $g(\hat{t})$, não representa diretamente a fração de infectados. Em vez disso, ela é interpretada como uma variável auxiliar, sem restrições de sinal, utilizada para construir $i(\hat{t})$ por meio da parametrização

$$i(\hat{t}) = i_{\text{ref}} e^{g(\hat{t})} \quad (6)$$

nessa expressão, $g(\hat{t})$ é a segunda saída bruta da rede neural. Trata-se de uma função real, isto é, para cada instante adimensional $\hat{t}$ a rede produz um valor $g(\hat{t}) \in \mathbb{R}$, que pode ser positivo, negativo ou nulo. Esse valor não possui significado físico direto; ele apenas parametriza a fração de infectados. O termo i_{ref} é um valor conhecido antes do treinamento, correspondente à fração de infectados na condição inicial do intervalo considerado ($I(0) = 0,001$, na primeira janela temporal). A aproximação para a fração de infectados é então obtida aplicando a função exponencial à saída da rede e multiplicando o resultado por i_{ref} . Como $e^{g(\hat{t})} > 0$ para qualquer $g(\hat{t})$ finito, segue que $i(\hat{t}) > 0$ em todo o domínio. Dessa forma, a solução trivial $I \equiv 0$ deixa de pertencer ao conjunto de funções que a rede pode representar.

O resíduo de uma equação diferencial mede o quão longe a aproximação atual da rede está de satisfazer aquela equação em um dado instante: resíduo igual a zero significa que a equação está sendo satisfeita exatamente naquele ponto. O resíduo associado à

equação de S (Equação 1) segue diretamente dela combinada com a regra da cadeia (Equação 4):

$$\mathcal{R}_s(\hat{t}) = \frac{1}{T} \frac{ds}{d\hat{t}} + \beta si \quad (7)$$

aqui, $\mathcal{R}_s(\hat{t})$ é o resíduo da equação de S , calculado a partir das saídas atuais s e i da rede; $ds/d\hat{t}$ é a derivada de s em relação ao tempo normalizado, obtida por diferenciação automática, não de forma analítica.

Para a equação de I , a substituição direta da parametrização logarítmica levaria a um resíduo cuja magnitude ainda dependeria de i_{ref} , o que reproduziria parcialmente o problema que essa reparametrização deveria resolver. Derivando a Equação 6 em relação a t ,

$$\frac{di}{d\hat{t}} = i_{\text{ref}} e^{g(\hat{t})} \frac{dg}{d\hat{t}} = i(\hat{t}) \frac{dg}{d\hat{t}} \quad (8)$$

Combinando esse resultado com a equação de I (Equação 2) reescrita via regra da cadeia,

$$\frac{1}{T} i(\hat{t}) \frac{dg}{d\hat{t}} = (\beta s - \gamma) i(\hat{t}). \quad (9)$$

Como $i(\hat{t}) > 0$ estritamente, divide-se ambos os lados por $i(\hat{t})$, e o fator de escala desaparece por completo:

$$\mathcal{R}_g(\hat{t}) = \frac{1}{T} \frac{dg}{d\hat{t}} - (\beta s - \gamma). \quad (10)$$

nessa expressão, $\mathcal{R}_g(\hat{t})$ é o resíduo associado à equação de I , agora escrito em termos de g em vez de i diretamente, e $dg/d\hat{t}$ é a derivada de g em relação ao tempo normalizado, também obtida por diferenciação automática. O resíduo $\mathcal{R}_g$ não contém mais i , apenas s e a derivada de g . Isso resolve duas questões ao mesmo tempo: a solução trivial $I \equiv 0$ é excluída pela parametrização logarítmica, e o tamanho do erro de treinamento deixa de escalar com a magnitude de I , que ao longo do surto varia em mais de três ordens de grandeza entre o início e o pico. As derivadas $ds/d\hat{t}$ e $dg/d\hat{t}$ são calculadas sobre um conjunto de pontos de colocação, instantes t amostrados de uma distribuição uniforme em $[0,1]$ a cada iteração de treinamento, nos quais a rede é cobrada a satisfazer a equação diferencial, conforme proposto originalmente por Raissi et al. (2019).

Função de perda e treinamento do problema direto

A componente física da perda de treinamento é a média quadrática dos dois resíduos, calculada sobre os N_c pontos de colocação $\hat{t}_j$ amostrados naquela iteração:

$$\mathcal{L}_{\text{fis}} = \frac{1}{N_c} \sum_{j=1}^{N_c} \mathcal{R}_s(\hat{t}_j)^2 + \frac{1}{N_c} \sum_{j=1}^{N_c} \mathcal{R}_g(\hat{t}_j)^2. \quad (11)$$

Minimizar apenas essa componente física não basta, pois qualquer trajetória compatível com as equações do modelo a satisfaz, independentemente da condição inicial desejada. A condição inicial entra como uma segunda componente da perda, avaliada em $\hat{t} = 0$:

$$\mathcal{L}_{ci} = (s(0) - s_{ref})^2 + (i(0) - i_{ref})^2, \quad (12)$$

nos quais s_{ref} e i_{ref} são os valores prescritos no início do intervalo (para a primeira janela do problema direto, os próprios $S(0) = 0,999$ e $I(0) = 0,001$). A perda total do problema direto é a combinação ponderada

$$\mathcal{L}_{direto} = \mathcal{L}_{fis} + \lambda_{ci} \mathcal{L}_{ci}, \quad \lambda_{ci} = 200, \quad (13)$$

em que $\lambda_{ci} = 200$ é o peso atribuído à condição inicial, escolhido deliberadamente alto porque, nos estágios iniciais do treinamento, a componente física sozinha admite diversas soluções de baixa perda que não partem do estado prescrito.

Uma dúvida legítima nesse ponto é por que não treinar uma única rede sobre todo o intervalo de 160 dias, tratando o problema simplesmente como uma série temporal contínua, em vez de dividi-lo em janelas menores. A resposta tem dois argumentos. O primeiro é que a limitação não está na capacidade da rede de representar a solução inteira; um Perceptron multicamadas com largura suficiente é capaz, em princípio, de aproximar toda a trajetória de 160 dias. A limitação está em treinar essa rede por gradiente descendente. Quando o domínio temporal é longo e contém uma transição abrupta, como a passagem do crescimento exponencial para o pico do surto, a otimização tende a violar a causalidade temporal do sistema: passa a ajustar trechos distantes do domínio antes de aprender corretamente os trechos iniciais dos quais eles dependem, comportamento documentado tanto por Krishnapriyan et al. (2021), que catalogam esse e outros modos de falha de PINNs, quanto por Wang et al. (2024), que propuseram pesos de treinamento sensíveis à causalidade como alternativa à divisão explícita do domínio.

O segundo argumento é que dividir o domínio em janelas sequenciais não é uma particularidade de redes neurais, e sim a mesma ideia por trás do método de tiro múltiplo (*multiple shooting*), estratégia clássica para resolver problemas de valor inicial em intervalos longos dividindo-os em subintervalos menores, resolvidos em sequência e conectados por continuidade nas fronteiras, descrita em detalhe por Ascher, Mattheij e Russell (1995). O próprio integrador Runge-Kutta usado para gerar a solução de referência neste trabalho também avança no tempo passo a passo, não resolve os 160 dias em um único sistema global; a marcha temporal adotada aqui reproduz essa mesma lógica incremental, substituindo o passo algorítmico fixo do Runge-Kutta por uma pequena rede treinada em cada janela. Vale notar

também que essa divisão é uma estratégia de treinamento, não uma mudança na natureza do modelo: após treinadas, as 16 redes locais são concatenadas em uma única curva contínua para os 160 dias, funcionalmente equivalente a uma única aproximação da trajetória completa. É diferente, por isso, de uma rede neural recorrente (RNN, LSTM ou similar) treinada sobre a série temporal: uma rede recorrente aprenderia a prever o próximo estado a partir do histórico de estados anteriores, uma tarefa orientada a dados sequenciais, enquanto cada rede local aqui continua sendo uma PINN, treinada para satisfazer a equação diferencial em pontos de colocação, não para prever a partir de observações passadas. Adotar uma arquitetura recorrente mudaria a pergunta de pesquisa, de como uma PINN pode resolver o modelo SIR para como um modelo de série temporal pode aprender a dinâmica do SIR a partir de dados, questão diferente da investigada aqui.

Operacionalmente, o intervalo total de 160 dias é particionado em 16 janelas consecutivas de 10 dias, cada uma associada a uma rede própria e treinada com sua própria versão das Equações 4 a 13, bastando substituir T por 10 (a largura da janela) na regra da cadeia. A saída final de uma janela, em $\hat{t} = 1$, fornece os valores de s_{ref} e i_{ref} usados como condição inicial da janela seguinte. A solução global é obtida concatenando as janelas treinadas em sequência, o que garante continuidade do valor das variáveis de estado nas fronteiras, ainda que não garanta continuidade da derivada ali, limitação retomada na seção de discussão dos resultados.

Problema inverso: estimação de parâmetros epidemiológicos

No problema inverso, β e γ deixam de ser constantes conhecidas nas Equações 7 e 10 e passam a ser otimizados junto aos pesos da rede. Para garantir positividade sem impor restrições explícitas ao otimizador, ambos são parametrizados por meio da função *softplus*,

$$\beta = \ln(1 + e^{\theta_\beta}), \quad (14)$$

$$\gamma = \ln(1 + e^{\theta_\gamma}) \quad (15)$$

nessa equação, θ_β e θ_γ são dois números reais sem restrição de sinal, otimizados diretamente pelo algoritmo de treinamento junto com os pesos da rede; β e γ propriamente ditos são obtidos transformando θ_β e θ_γ pela função *softplus*, que garante que o resultado seja sempre positivo, qualquer que seja o valor (inclusive negativo) de θ_β ou θ_γ . Os parâmetros brutos θ_β e θ_γ são inicializados em zero, o que corresponde a $\beta = \gamma = \ln 2 \approx 0,693$, ponto de partida deliberadamente afastado dos valores verdadeiros para que a convergência observada não seja atribuída a uma inicialização favorável. Uma terceira componente é

adicionada à perda, penalizando o desvio entre a curva aproximada pela rede e as N_d observações ruidosas disponíveis:

$$\mathcal{L}_{\text{dados}} = \frac{1}{N_d} \sum_{k=1}^{N_d} (s(\hat{t}_k) - S_k^{\text{obs}})^2 + \frac{1}{N_d} \sum_{k=1}^{N_d} (i(\hat{t}_k) - I_k^{\text{obs}})^2, \quad (16)$$

nessa equação, $\hat{t}_k$ é o instante normalizado da k -ésima observação disponível, e S_k^{obs} e I_k^{obs} são os valores de suscetíveis e infectados efetivamente observados (com ruído) naquele instante, descritos adiante. A perda total do problema inverso passa a ser

$$\mathcal{L}_{\text{inverso}} = \mathcal{L}_{\text{fis}} + 10 \mathcal{L}_{\text{ci}} + 50 \mathcal{L}_{\text{dados}}. \quad (17)$$

Geração dos dados sintéticos

Os dados observados, com $N_d = 15$, são gerados a partir da solução numérica de referência (integração Runge-Kutta de quarta e quinta ordem, método RK45, tolerância 10^{-9}) avaliada nos instantes amostrados, acrescida de ruído gaussiano independente de desvio padrão $\sigma = 0,01$ e truncada ao intervalo $[0,1]$.

O número de observações, deliberadamente baixo, busca representar um regime de vigilância epidemiológica esparsa, comparável a boletins agregados periódicos ao longo de um surto (da ordem de uma observação a cada dez dias em um horizonte de 160 dias), cenário comum quando a capacidade de testagem e notificação é limitada, como discutido por Gibbons et al. (2014) e como costuma ocorrer no início de surtos reais. Esse regime também serve a um propósito metodológico: com um número muito maior de observações bem distribuídas ao longo do tempo, a diferença entre estratégias de amostragem tende a se atenuar, pois dados suficientes eventualmente cobririam também a fase de declínio por acaso; o regime esparsa é o que evidencia de forma mais clara o papel da identificabilidade prática investigado na próxima subseção. Duas estratégias de amostragem temporal são comparadas sob esse mesmo número de observações.

A amostragem ingênua sorteia os 15 instantes de uma distribuição uniforme em $0, T$, sem qualquer critério adicional, reproduzindo a maneira mais simples (e mais comum, na ausência de planejamento específico) de amostrar observações ao longo de um surto. A amostragem informada distribui os instantes em quatro faixas do domínio, com dois pontos entre 0 e 15 dias, quatro entre 15 e 35 dias, seis entre 35 e 80 dias e três entre 80 e 160 dias, concentrando deliberadamente mais observações na fase de declínio do surto. A justificativa para essa concentração é desenvolvida a seguir, na análise de sensibilidade.

Análise de sensibilidade e identificabilidade prática

Identificabilidade prática é a pergunta de se β e γ podem ser recuperados de forma confiável a partir do volume e da qualidade de dados realmente disponíveis, em contraste com identificabilidade estrutural, que pergunta se isso seria possível com dados infinitos e sem ruído (Tuncer e Le, 2018). Uma forma direta de investigar identificabilidade prática é perguntar: se β fosse ligeiramente diferente, o quanto a curva de infectados observada mudaria, e essa mudança seria distinguível do efeito de uma mudança equivalente em γ ? Se as duas mudanças produzem efeitos quase idênticos sobre $I(t)$, nenhuma quantidade de dados coletados naquele trecho da curva vai conseguir separar β de γ com confiança, por melhor que seja o método de otimização empregado.

Essa ideia é formalizada por meio de sensibilidades locais: dado o par verdadeiro β, γ , perturba-se β por uma quantidade pequena ε , resolve-se novamente o modelo SIR com esse novo par, e mede-se o quanto $I(t)$ mudou em cada instante; o mesmo procedimento é repetido perturbando γ . As duas sensibilidades resultantes, por diferenças finitas progressivas aplicadas à solução numérica de referência, são

$$\frac{\partial I}{\partial \beta}(t) \approx \frac{I(t; \beta + \varepsilon, \gamma) - I(t; \beta, \gamma)}{\varepsilon}, \quad (18)$$

$$\frac{\partial I}{\partial \gamma}(t) \approx \frac{I(t; \beta, \gamma + \varepsilon) - I(t; \beta, \gamma)}{\varepsilon}, \quad (19)$$

nessas duas expressões, $\varepsilon = 10^{-4}$ é o deslocamento pequeno aplicado a β ou a γ , e $I(t; \beta, \gamma)$ denota a solução numérica de referência calculada com um dado par β, γ . Quando as duas curvas de sensibilidade, $\partial I / \partial \beta(t)$ e $\partial I / \partial \gamma(t)$, têm formato semelhante e sinais opostos em um trecho do tempo, isso significa que, naquele trecho, aumentar β tem quase o mesmo efeito sobre $I(t)$ que diminuir γ : as duas explicações (mais transmissão ou menos recuperação) ficam confundíveis a partir dos dados. Para resumir esse grau de confusão em um único número, calcula-se o coeficiente de correlação de Pearson entre as duas sensibilidades, avaliadas nos instantes efetivamente amostrados t_k :

$$\rho = \text{corr} \left(\frac{\partial I}{\partial \beta}(t_k), \frac{\partial I}{\partial \gamma}(t_k) \right). \quad (20)$$

Valores de ρ próximos de -1 indicam forte confusão entre β e γ (as duas sensibilidades quase se espelham, e os dados restringem apenas a combinação $\beta - \gamma$, não os dois parâmetros isoladamente); valores próximos de 0 ou positivos indicam que as duas sensibilidades apontam em direções suficientemente diferentes para que β e γ possam, em princípio, ser distinguidos a partir daqueles dados. Essa abordagem segue o espírito da análise de identificabilidade prática

descrita por Tuncer e Le (2018), adaptada aqui como diagnóstico comparativo entre as duas estratégias de amostragem descritas anteriormente, cujos resultados numéricos são apresentados e interpretados na Seção de Resultados e Discussão.

Treinamento e métricas de avaliação

Todas as redes são implementadas em PyTorch e otimizadas com Adam, com taxa de aprendizado inicial entre 0,001 e 0,003, reduzida pela metade em intervalos periódicos por meio de um agendador do tipo *step decay*. No problema direto, cada janela temporal recebe 2000 iterações de Adam seguidas de uma etapa de polimento com o otimizador L-BFGS, com busca de linha de Wolfe forte e até 80 iterações, prática também adotada por Raissi et al. (2019) para reduzir o resíduo a patamares próximos da precisão numérica. O problema inverso é treinado por 12000 iterações de Adam sem a etapa de L-BFGS. A qualidade do problema direto é avaliada pelo erro relativo na norma L2 entre a solução aproximada e a solução de referência, calculado em uma malha densa de 400 pontos igualmente espaçados; a qualidade do problema inverso é avaliada pelo erro relativo entre cada parâmetro estimado e seu valor verdadeiro. Essas duas métricas são as reportadas na seção seguinte.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Esta seção apresenta os resultados do problema direto e do problema inverso descritos na metodologia, seguidos da discussão de suas implicações práticas e limitações. Antes da formulação final, dois testes preliminares merecem registro, pois motivam diretamente as escolhas de design descritas na metodologia.

Um primeiro teste, no qual a variável I era aproximada diretamente como saída bruta da rede, sem a reparametrização logarítmica, confirma o risco ali antecipado: a otimização converge para uma solução em que I permanece próximo de zero ao longo de todo o domínio de 160 dias (Figura 1), com erro relativo de 99,7% e pico previsto de apenas 0,0013 contra um pico verdadeiro de 0,404, apesar do valor de perda ser pequeno ($8,5 \times 10^{-8}$). Isso ocorre porque o ponto fixo trivial $I \equiv 0$ é, de fato, de acesso mais fácil ao gradiente do que a trajetória correta quando a condição inicial de I já é pequena. Esse comportamento é consistente com os modos de falha de PINNs em problemas com transientes rápidos documentados por Krishnapriyan et al. (2021).

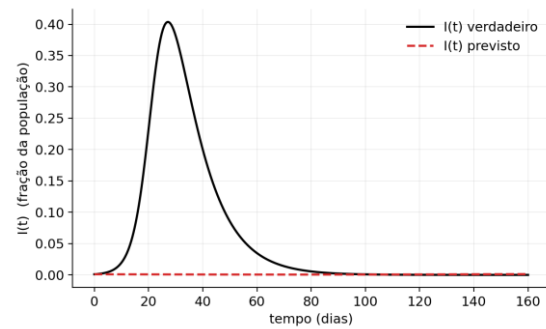


Figura 1. Teste preliminar sem reparametrização logarítmica.

Um segundo teste, já com a reparametrização logarítmica mas ainda como rede única sobre todo o intervalo de 160 dias, deixa de colapsar para a solução trivial (o pico previsto sobe para 0,025, quase vinte vezes maior que no primeiro teste), mas ainda assim não consegue localizar corretamente o surto: o pico aparece deslocado para o final do domínio em vez de próximo do dia 27, e sua amplitude permanece subestimada em mais de dez vezes (Figura 2), resultando em erro relativo de 100,2%, comparável ao do primeiro teste por um motivo qualitativamente diferente. Esse resultado é compatível com a tendência à violação de causalidade temporal descrita por Wang et al. (2024): mesmo sem o atrativo trivial, a otimização de uma rede única sobre um domínio longo com transiente rápido continua sendo difícil. A marcha temporal descrita na metodologia é adotada para superar essa limitação.

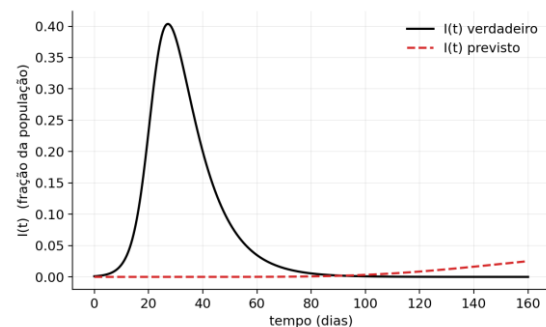


Figura 2. Teste preliminar com reparametrização logarítmica, mas sem marcha temporal.

A Figura 3 compara a solução final, obtida com a reparametrização logarítmica e a marcha temporal combinadas, com a solução numérica de referência calculada por integração Runge-Kutta. As três variáveis de estado acompanham de perto a trajetória de referência ao longo dos 160 dias do horizonte considerado, inclusive na transição abrupta entre o crescimento exponencial e o pico do surto.

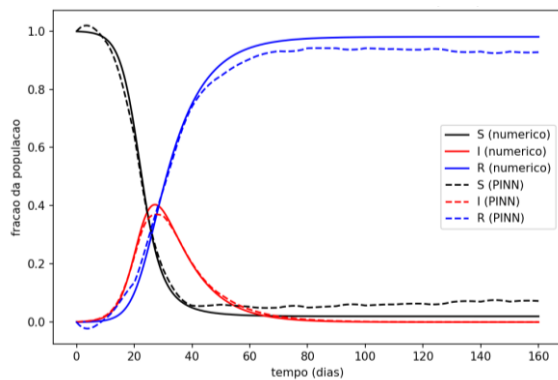


Figura 3. Solução da PINN comparada à referência numérica (RK45).

Tabela 1. Erro relativo L2 do problema direto, por variável de estado.

Variável	Erro relativo L2 (%)
$S(t)$	10,63
$I(t)$	5,87
$R(t)$	4,58

O erro permanece abaixo de 11% para as três variáveis, com a maior discrepância concentrada em S . Essa discrepância se origina majoritariamente na cauda do intervalo, após o pico do surto, onde a concatenação das janelas da marcha temporal garante continuidade do valor das variáveis de estado nas fronteiras, mas não da derivada, introduzindo um desvio acumulado pequeno a cada nova janela. A ligação desses resultados com o catálogo de modos de falha descrito por Krishnapriyan et al. (2021) sugere que problemas semelhantes devem ser esperados sempre que a variável de estado de interesse admitir um ponto fixo trivial próximo da condição inicial, o que vai muito além do modelo SIR.

A discussão do problema inverso começa pela questão de identificabilidade levantada na metodologia: o quanto β e γ podem ser distinguidos a partir da curva de infectados observada. A Figura 4 mostra a curva de infectados verdadeira junto aos instantes amostrados pelas duas estratégias, e as Figuras 5 e 6 trazem a análise de sensibilidade correspondente.

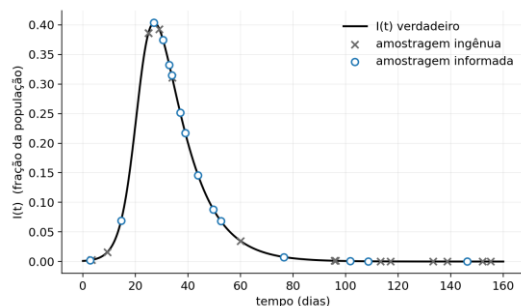


Figura 4. Curva de infectados e instantes amostrados.

Na Figura 4, os instantes amostrados pela estratégia ingênua se concentram, por acaso, sobretudo na fase de crescimento e na cauda achatada do surto, enquanto a estratégia informada garante cobertura deliberada da fase de declínio, entre 35 e 80 dias. A razão para essa escolha de desenho fica clara nas Figuras 5 e 6.

A Figura 5 mostra as sensibilidades locais $\partial I/\partial \beta$ e $\partial I/\partial \gamma$ definidas na metodologia. Durante a fase de crescimento exponencial, as duas curvas têm formato quase idêntico e sinais opostos, o que confirma numericamente a colinearidade prevista pela derivação analítica: nos primeiros dias do surto, quando poucos indivíduos ainda foram infectados, S decai lentamente e permanece próximo do valor inicial, de modo que $S \approx S(0)$, e a equação de I se reduz aproximadamente a $dI/dt \approx (\beta - \gamma)I$, de modo que apenas a diferença $\beta - \gamma$ governa a dinâmica observável nesse intervalo, e os efeitos individuais de β e γ tornam-se quase indistinguíveis a partir da curva de infectados. Essa colinearidade se desfaz de forma gradual a partir do pico, e se torna mais pronunciada na fase de declínio, entre 35 e 80 dias, região para a qual a amostragem informada foi deliberadamente direcionada.

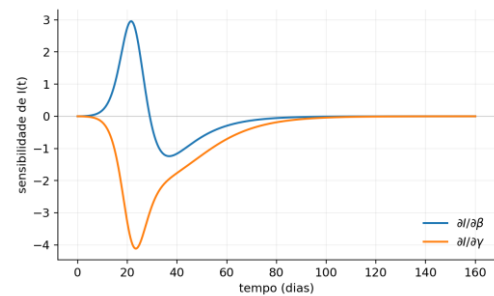


Figura 5. Sensibilidade de $I(t)$ a β e a γ .

A Figura 6 traduz essa observação em um único número por instante, a correlação local entre as duas sensibilidades: o vale profundo próximo de -1 durante o crescimento confirma a colinearidade, e a recuperação da correlação em direção a valores menos negativos após o pico mostra exatamente na janela temporal em que dados adicionais mais contribuem para separar β de γ .

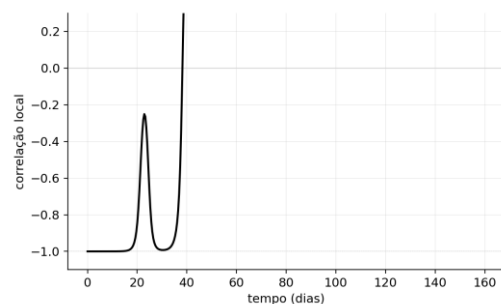


Figura 6. Correlação local entre as sensibilidades de β e γ .

A Tabela 2 compara os parâmetros estimados pelas duas estratégias de amostragem com os valores verdadeiros $\beta = 0,4$ e $\gamma = 0,1$, junto ao coeficiente de correlação ρ (Equação 20) para cada conjunto de dados.

Tabela 2. Parâmetros estimados pelo problema inverso, por estratégia de amostragem.

Amostragem	Ingênua	Informada
β estimado	0,4723	0,3852
Erro β (%)	18,08	3,69
γ estimado	0,1098	0,1009
Erro γ (%)	9,76	0,92
ρ	-0,628	0,209

A amostragem informada reduz o erro de estimação de β em cerca de cinco vezes, e o erro de γ em mais de dez vezes, sem qualquer alteração na arquitetura da rede, na função de perda ou no procedimento de otimização. A única diferença entre os dois experimentos é o instante em que as 15 observações ruidosas foram coletadas. Esse resultado reforça experimentalmente a distinção entre identificabilidade estrutural e identificabilidade prática discutida por Tuncer e Le (2018): os parâmetros do modelo SIR são estruturalmente identificáveis a partir de observações de S e I , mas a identificabilidade prática, sujeita a apenas 15 observações ruidosas, depende de onde essas observações caem ao longo da trajetória.

As Figuras 7 e 8 mostram o ajuste da rede aos dados observados em cada caso, junto às curvas verdadeiras de S e I .

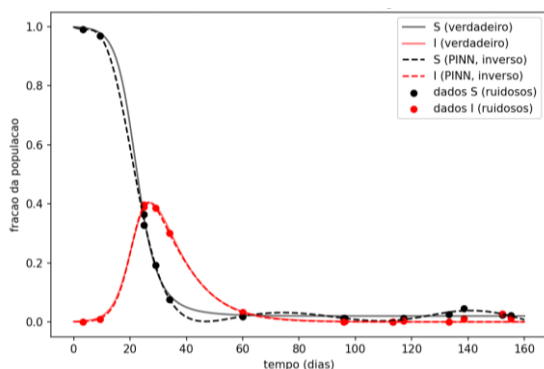


Figura 7. Ajuste do problema inverso (amostragem ingênua).

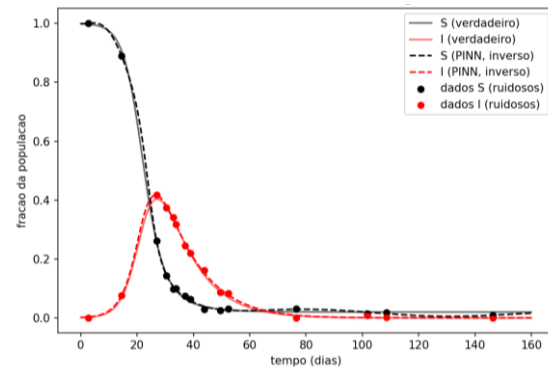


Figura 8. Ajuste do problema inverso (amostragem informada).

Vale ressaltar que o ajuste visual da curva de infectados na Figura 7 parece satisfatório mesmo com o erro elevado em β . Esse descompasso entre a qualidade aparente do ajuste e a qualidade real da estimativa de parâmetro é, em si, um achado com implicações práticas: inspecionar visualmente o quanto uma curva ajustada se aproxima dos dados observados não é suficiente para avaliar a confiabilidade dos parâmetros recuperados. Kharazmi et al. (2021) chegam a conclusão semelhante ao examinar uma família mais ampla de modelos epidemiológicos por meio de PINNs, e destacam que identificabilidade e capacidade preditiva do modelo treinado precisam ser avaliadas em conjunto, não isoladamente.

As Figuras 9 e 10 acompanham a convergência de β e de γ , respectivamente, ao longo das iterações de treinamento para os dois experimentos, partindo do mesmo ponto inicial $\beta = \gamma = \ln 2 \approx 0,693$.

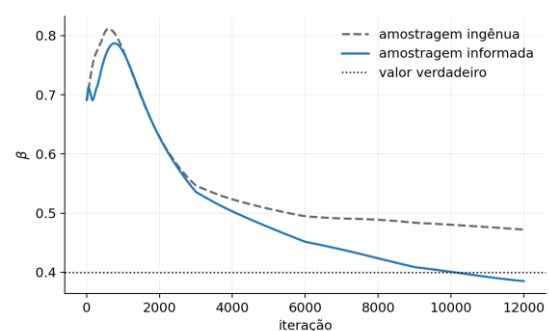


Figura 9. Convergência de β durante o treinamento.

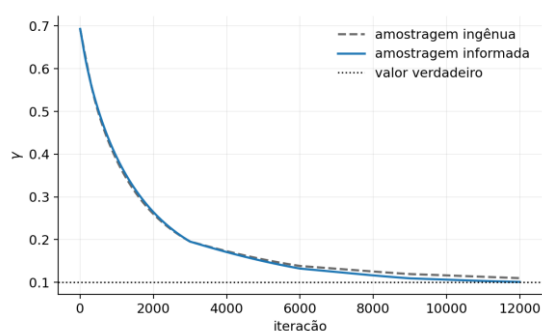


Figura 10. Convergência de γ durante o treinamento.

Na Figura 9, sob amostragem ingênua, β estabiliza em um patamar visivelmente acima do valor verdadeiro após um transitório inicial, enquanto sob amostragem informada a convergência se aproxima mais do valor correto. Na Figura 10, γ converge para perto do valor verdadeiro em ambos os casos, porém de forma mais lenta sob amostragem ingênua do que sob amostragem informada.

Do ponto de vista prático, o resultado sugere uma recomendação simples para o desenho de protocolos de vigilância epidemiológica: quando o objetivo inclui estimar parâmetros de transmissão e recuperação separadamente, e não apenas prever a curva de casos, a coleta de dados deveria priorizar também a fase de declínio do surto, e não apenas o período de crescimento inicial, que costuma concentrar a maior atenção por razões compreensíveis de urgência em saúde pública.

Algumas limitações merecem registro. A marcha temporal garante continuidade de valor, mas não de derivada, nas fronteiras entre janelas, o que explica parte do erro residual do problema direto relatado na Tabela 1; técnicas que respeitam a causalidade temporal de forma mais integrada, como a proposta por Wang et al. (2024), poderiam suavizar essa descontinuidade sem recorrer à partição explícita do domínio. Os dados empregados no problema inverso são inteiramente sintéticos, gerados a partir do próprio modelo SIR com ruído de gaussiano aditivo, cenário mais favorável do que o de dados epidemiológicos reais, sujeitos a subnotificação, atraso de reporte e mudanças de critério de diagnóstico ao longo do tempo. O próprio modelo SIR, por fim, assume mistura homogênea da população e parâmetros constantes no tempo, hipóteses raramente sustentáveis em surtos reais de longa duração, para os quais formulações com parâmetros variantes no tempo, como a explorada por Millevoi et al. (2024), oferecem caminho natural de extensão.

CONCLUSÃO

Este trabalho aplicou redes neurais informadas pela física ao modelo epidemiológico SIR, cobrindo tanto

o problema direto quanto o problema inverso de estimação de parâmetros. No problema direto, a combinação entre marcha temporal e uma reparametrização logarítmica da variável de infectados evitou a convergência para a solução trivial sem epidemia, manteve o erro relativo abaixo de 11% para todas as variáveis de estado e reproduziu de forma fiel a transição rápida entre crescimento exponencial e pico do surto.

No problema inverso, a comparação entre duas estratégias de amostragem temporal de dados sintéticos revelou que a precisão da estimação de β e γ depende tanto do método de treinamento quanto de onde no tempo as observações estão disponíveis. Uma amostragem informada por análise de sensibilidade, concentrada na fase de declínio do surto, reduziu o erro de β de 18,08% para 3,69% e o erro de γ de 9,76% para 0,92%, sem qualquer mudança na rede ou na função de perda. Esse resultado indica que a qualidade de um problema inverso resolvido por PINN não pode ser avaliada apenas pelo ajuste visual da curva aos dados, e que a identificabilidade prática dos parâmetros merece verificação explícita antes que as estimativas sejam tomadas como confiáveis.

Como extensão natural, ficam a aplicação do mesmo delineamento de pesquisa a dados epidemiológicos reais, a incorporação de parâmetros variantes no tempo e a substituição da marcha temporal por técnicas de treinamento que respeitem a causalidade de forma contínua ao longo de todo o domínio, sem a descontinuidade de derivada introduzida pela partição em janelas.

AGRADECIMENTOS

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

REFERÊNCIAS

- Ascher, U. M.; Mattheij, R. M. M.; Russell, R. D. Numerical Solution of Boundary Value Problems for Ordinary Differential Equations. Classics in Applied Mathematics, v. 13. Philadelphia: SIAM, 1995.
- Chowell, G. Fitting dynamic models to epidemic outbreaks with quantified uncertainty: a primer for parameter uncertainty, identifiability, and forecasts. Infectious Disease Modelling, v. 2, n. 3, p. 379-398, 2017.
- Dandekar, R.; Rackauckas, C.; Barbastathis, G. A machine learning-aided global diagnostic and comparative tool to assess effect of quarantine control in COVID-19 spread. Patterns, v. 1, n. 9, p. 100145, 2020.



- Gibbons, C. L. et al. Measuring underreporting and under-ascertainment in infectious disease datasets: a comparison of methods. *BMC Public Health*, v. 14, p. 147, 2014.
- Karniadakis, G. E. et al. Physics-informed machine learning. *Nature Reviews Physics*, v. 3, n. 6, p. 422-440, 2021.
- Kermack, W. O.; Mckendrick, A. G. A contribution to the mathematical theory of epidemics. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*, v. 115, n. 772, p. 700-721, 1927.
- Kharazmi, E. et al. Identifiability and predictability of integer- and fractional-order epidemiological models using physics-informed neural networks. *Nature Computational Science*, v. 1, n. 11, p. 744-753, 2021.
- Krishnapriyan, Aditi et al. Characterizing possible failure modes in physics-informed neural networks. *In: Advances in Neural Information Processing Systems 34*, 2021.
- Millevoi, C.; Pasetto, D.; Ferronato, M. A Physics-Informed Neural Network approach for compartmental epidemiological models. *PLOS Computational Biology*, v. 20, n. 9, p. e1012387, 2024.
- 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*, v. 378, p. 686-707, 2019.
- Tuncer, N.; Le, T. T. Structural and practical identifiability analysis of outbreak models. *Mathematical Biosciences*, v. 299, p. 1-18, 2018.
- Wang, S.; Sankaran, S.; Perdikaris, P. Respecting causality for training physics-informed neural networks. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 421, p. 116813, 2024.