Sexto Colóquio de Matemática da Região Sul - ColMatSul 2025
06 a 10 de Outubro de 2025
UFSM, Santa Maria, RS

RNA-MdC um método baseado em dados e modelo de transporte de partículas neutras: casos em geometria 1D

Pedro Henrique de Almeida Konzen[1], Nelson Garcia Roman[2]

[1]PPGMAp/IME/UFRGS, pedro.konzen@ufrgs.br
[2]PPGMAp/IME/UFRGS, ngroman1992@gmail.com

Resumo. A modelagem e solução de problemas de transporte de partículas neutras são fundamentais em áreas como transferência de calor e física nuclear. Apresentamos o desenvolvimento de um método para resolver a equação linear de Boltzmann em geometria 1D, com espalhamento isotrópico e coeficientes constantes. O método une uma rede neural artificial (RNA) ao método das características (MdC), permitindo a resolução de problemas baseados no modelo e em dados. A rede, que fornece uma estimativa para o fluxo escalar de partículas, é treinada iterativamente minimizando uma função de perda que permite o ajuste a dados. Para problemas inversos de estimativa de parâmetros, a arquitetura da RNA é modificada para também estimar intensidades radiantes em direções selecionadas. A função de perda é expandida para incluir o residual da equação de transporte (apenas em direções selecionadas) e as condições de contorno, conectando-se diretamente ao parâmetro a ser estimado. Aplicações em estudos de casos selecionados apresentam as potencialidades do método, bem como, indicam suas limitações. Destaca-se a versatilidade do método, sendo capaz de fornecer soluções para problemas em que poucos dados estão disponíveis.

Palavras-chave. Transporte de Partículas Neutras; Redes Neurais Artificiais; Método das Características; Problemas Inversos.

A modelagem e solução de problemas de transporte de partículas neutras são fundamentais em áreas como transferência de calor [5] e física nuclear [3]. Neste contexto, consideramos que o transporte é modelado pela equação linear de Boltzmann, com espalhamento isotrópico e coeficientes constantes

$$\forall \mu : \mu \cdot \frac{\partial}{\partial x} I(x,\mu) + \sigma_t I = \sigma_s \Psi(x) + q(x,\mu), \tag{1}$$

onde $I(x,\mu) \geq 0$ é o fluxo de partículas no ponto $x \in [a,b]$ e direção $-1 < \mu < 1$, $\mu \neq 0$, $\sigma_t \geq 0$ é o coeficiente total de absorção, $\sigma_s \geq 0$ é o coeficiente de espalhamento, $\Psi(x)$ é o fluxo escalar médio de partículas

$$\Psi(x) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{1} I(x,\mu) d\mu \tag{2}$$

e $q(x,\mu)$ é a fonte de partículas. A equação integro-diferencial é fechada com as condições de contorno $I(a,\mu) = I_a$, $\forall \mu > 0$, e $I(b,\mu) = I_b$, $\forall \mu < 0$.

Com o objetivo de desenvolvermos um método para resolver problemas inversos de transporte modelados por (1) e com a disponibilidade de poucos dados do fluxo escalar, apresentamos o RNA-MdC, uma abordagem que combina o clássico método das características (MdC) com redes neurais artificiais (RNA, [1]).

Consideramos um problema inverso de estimação de um parâmetro α de interesse (por exemplo, σ_t), em que n_d amostras $\left\{ \left(x_d^{(s)}, \Psi_d^{(s)} \right) \right\}_{s=1}^{n_d}$ são dadas. O método consiste em treinar uma perceptron multicamadas (PMCs, [1]) $\tilde{\boldsymbol{y}} = \mathcal{N}(x; \boldsymbol{p} = (\boldsymbol{p}_w, \alpha))$, com entrada

$x \in [a, b]$, parâmetros $\boldsymbol{p} = (\boldsymbol{p}_w, \alpha)$, onde $\boldsymbol{p}_w$ são os pesos e biases da rede, e saída $\tilde{\boldsymbol{y}}$ é um vetor de estimativas $\tilde{\Psi}(x)$ e de intensidades $\tilde{I}(x,\mu_j)$ em direções selecionadas. O fato de a rede requer a estimativa de intensidades em poucas direções, é uma das principais diferenças do RNA-MdC em relação ao método das redes neurais informadas pela física, em que aplicações a problemas de transporte semelhantes requerem a estimativa das intensidades em todas as direções [4]. Com isso, o RNA-MdC tem o potencial de gerar soluções precisas com o emprego de pequenas redes neurais.

Usando da iteração de fonte, dada uma $\mathcal{N}^{(l)}$ (l-ésima iterada), o fluxo escalar esperado $\bar{\Psi}^{(l)}$ é calculado por (2) com base nas intensidades dadas pela solução MdC

$$\bar{I}^{(l)}(u) = \bar{I}^{(l)}(0)e^{-\sigma_t u} + \int_0^u \left[\sigma_s \mathcal{N}(u') + q(u')\right] e^{-\sigma_t(u-u')} du', \tag{3}$$

onde a mudança de variável $x = x_0 + u\mu$, é feita com base em um ponto x_0 em que a intensidade na direção μ é conhecida. Com isso, o treinamento da rede $\mathcal{N}^{(l)}$ pode ser feito por um método de otimização, minimizando a função de perda

$$\begin{aligned} \varepsilon^{(l)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p}) = {} & \frac{w_1}{n_s}\sum_{s=1}^{n_s}\left(\tilde{\Psi}^{(l)}(x_s) - \bar{\Psi}(x_s)\right)^2 + \frac{w_2}{n_d}\sum_{s=1}^{n_d}\left(\Psi_d^{(s)} - \tilde{\Psi}^{(l)}(x_d)\right)^2 \\ & + \frac{w_3}{n_s n_\mu}\sum_{j=1}^{n_\mu}\sum_{s=1}^{n_s}\left(\mu_j \frac{\partial}{\partial x}\tilde{I}_j^{(l)}(x_s) + \sigma_t \tilde{I}_j^{(l)}(x_s) - \sigma_s \tilde{\Psi}^{(l)}(x_s) - q(x_s,\mu_j)\right)^2 + \text{c.c.}, \end{aligned} \tag{4}$$

onde o primeiro termo impõe a contribuição do fluxo escalar calculado pelo método MdC, o segundo termo impõe a contribuição dos dados, e o terceiro termo impõe que as intensidades estimadas em direções selecionadas satisfaçam a equação de transporte (1), conectando-se diretamente ao parâmetro α. Ainda, outros termos garantem as condições de contorno e coeficientes de penalização $w_1, w_2, \ldots$ são empregados.

Aplicações do RNA-MdC a problemas inversos de estimar σ_t são apresentadas em [2], onde o método obteve bons resultados, mesmo com poucos dados disponíveis. Outras aplicações também serão consideradas, como a estimava do coeficiente de espalhamento e problemas de localização de fonte.

REFERÊNCIAS

[1] S. Haykin, **Neural Networks and Learning Machines**. Prentice Hall, 2009, ISBN: 978-0-13-147139-9.

[2] P. H. A. Konzen, N. G. Roman e A. Tchantchalam, "Integral Methods in Science and Engineering - Study and Solutions of Mathematical Models", em Springer, 2025, cap. The Data-Driven ANN-MoC Method to Neutral Particle Transport Problems in 1D, Aceito para publicação.

[3] R. M. Kuridan, **Neutron Transport**. Springer, 2023, ISBN: 978-3-031-26931-8. DOI: `https://doi.org/10.1007/978-3-031-26932-5`.

[4] S. Mishra e R. Molinaro, "Physics informed neural networks for simulating radiative transfer", **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 270, p. 107 705, 2021. DOI: `https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2021.107705`.

[5] M. F. Modest e S. Mazumder, **Radiative Heat Transfer**. Academic press, 2022, ISBN: 978-0-323-98406-5.