

03.2;01.1

## Метод восстановления моделей тепломассопереноса по пространственно-временным распределениям параметров

© Н.Ю. Быков<sup>1,2</sup>, А.А. Хватов<sup>2</sup>, А.В. Калюжная<sup>2</sup>, А.В. Бухановский<sup>2</sup><sup>1</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия<sup>2</sup> Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: nbykov2006@yandex.ru

Поступило в Редакцию 20 июля 2021 г.

В окончательной редакции 7 сентября 2021 г.

Принято к публикации 11 сентября 2021 г.

Предложен алгоритм метода генеративного дизайна модели для решения задачи восстановления уравнения теплового процесса по имеющимся данным. Метод применен для генерации уравнения в частных производных, описывающего процесс прогрева и испарения металла, поверхность которого нагревается лазерным излучением. Продемонстрирована высокая эффективность метода для целей восстановления корректной структуры уравнения, индикации сопровождающих нагрев дополнительных процессов (в рассматриваемом случае — процесса испарения поверхности мишени), а также для определения значений температурозависимых коэффициентов при производных.

**Ключевые слова:** метод генеративного дизайна, управляемая данными модель, лазерный нагрев, уравнение теплопроводности.

DOI: 10.21883/PJTF.2021.24.51790.18967

С точки зрения развития технологий искусственного интеллекта (ИИ) особый интерес представляет разработка методов восстановления по имеющимся данным моделей процессов различной природы в виде дифференциальных уравнений в частных производных (ДУЧП) [1]. Данный подход (далее метод генеративного дизайна модели (ГДМ)) представляется крайне перспективным для решения широкого круга задач тепломассопереноса. Разработка алгоритма ГДМ применительно к задачам теплопереноса позволит по имеющимся данным уточнить структуру ДУЧП, описывающего тепловой процесс, выявить наличие „скрытых“ сопутствующих процессов, таких как фазовые превращения и химические реакции, а в ряде случаев описать сложные явления с неизвестными свойствами рассматриваемых объектов более простыми моделями. С точки зрения уточнения структуры уравнений в качестве примера можно привести необходимость учета второй производной от температуры по времени в „классическом“ уравнении теплопроводности для корректного описания высокоинтенсивных нестационарных процессов, тепловых процессов в объектах с сильной внутренней неоднородностью или в малоразмерных объектах [2]. В случае движущейся среды уравнение теплопроводности расширяется за счет добавления конвективного слагаемого. Таким образом, при наличии данных о тепловом процессе (например, распределения температур в среде в различные моменты времени) алгоритм искусственного интеллекта должен вначале правильно идентифицировать структуру уравнения (число и вид основных слагаемых), а затем определить необходимые коэффициенты при каждом структурном элементе.

Целями настоящей работы являются 1) разработка оригинального алгоритма восстановления по данным модели в виде ДУЧП применительно к решению тепловых задач; 2) демонстрация возможностей применения предлагаемого подхода.

Разработанный алгоритм метода ГДМ предусматривает реализацию нескольких этапов восстановления неизвестной структуры уравнения по имеющимся данным. Сначала записывается полный возможный шаблон искомого уравнения. В настоящей работе рассматривается общий шаблон уравнения теплопроводности, описывающего импульсный нагрев материала поверхностным источником тепла [3]:

$$-\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{c\rho} \frac{\partial}{\partial x} \lambda \frac{\partial T}{\partial x} + \omega \frac{\partial T}{\partial x} = 0. \quad (1)$$

Здесь  $t$  — время,  $x$  — координата. Система координат связана с движущейся (со скоростью  $\omega$  при наличии испарения) поверхностью мишени. Коэффициент теплопроводности  $\lambda$  считается неизвестным. Для данного коэффициента предполагается полиномиальная зависимость от температуры с неизвестными коэффициентами  $\beta$ :  $\lambda = \beta_0 + \beta_1 T + \beta_2 T^2 + \beta_3 T^3$ . Также неизвестен вклад конвективного слагаемого, определяемого коэффициентом  $\omega$ . Плотность  $\rho$  и теплоемкость материала  $c$  полагаются постоянными и заданными. Мощность поверхностного теплового источника  $q_s$ , определяющая граничное условие при  $x = 0$ , полагается известной.

Для применения методов статистического обучения [4] дискретизированный методом конечных раз-

стей вариант выражения (1) может быть записан в виде

$$\mathbf{Y} = \alpha_0 \mathbf{E} + \sum_{p=2}^{P_t} \alpha_p \mathbf{V}_p, \quad (2)$$

где  $\mathbf{Y} = -\alpha_1 \mathbf{V}_1$ ,  $\alpha_0 = 0$ ,  $\alpha_1 = -1$ ,  $\alpha_p = \beta_{p-2}/(c\rho)$  для  $2 \leq p \leq 5$ ,  $\alpha_6 = \omega$ ,  $\mathbf{E}$  — вектор, у которого все компоненты равны единице. Компоненты векторов  $\mathbf{V}_p$  содержат разностные шаблоны элементов уравнения (1), соответствующие внутренним узлам сетки и рассматриваемым моментам времени. Число компонентов равно  $n = (N - 2)L$  ( $N$  — число сеточных узлов равномерной сетки,  $L$  — число моментов времени, для которых известны значения температуры в узлах). Число слагаемых  $P_t$  зависит от числа слагаемых исходного ДУЧП и степени полинома, описывающего зависимость  $\lambda(T)$ . Для рассматриваемого случая полинома третьей степени  $P_t = 6$ . Коэффициенты  $\alpha_p$  ( $p > 1$ ) неизвестны и подлежат определению.

Дальнейшая реализация алгоритма ГДМ предполагает два этапа.

1. По исходным синтетическим данным (распределениям температуры в сеточных узлах для различных моментов времени) вычисляются компоненты векторов  $\mathbf{V}_p$ .

2. К (2) применяется процедура отбора оптимального подмножества переменных [4], позволяющая отсеять малозначимые слагаемые и определить необходимые коэффициенты. В нашем случае число переменных (предикторов) для внутренних узлов  $P = P_t - 1 = 5$ . Процедура предусматривает перебор  $2^P$  возможных компоновок (2) с одним, двумя, тремя и т.д. до  $P$  слагаемых (элементов). Для каждого фиксированного числа слагаемых  $p$  перебираются возможные варианты элементов и выбирается оптимальная модель на основе расчета наименьшей суммы квадрата остатков (RSS).

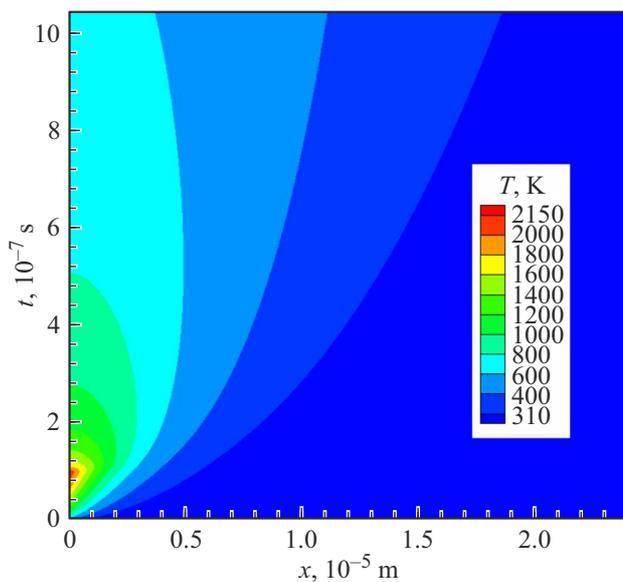


Рис. 1. Пространственно-временное распределение температуры для варианта 2.

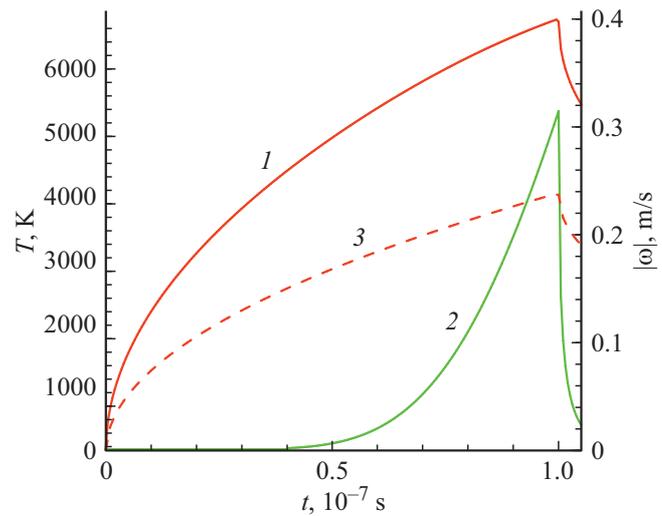


Рис. 2. Изменение температуры поверхности (1, 3) и скорости фронта испарения (2) для вариантов 3 (3) и 4 (1, 2).

Далее выбирается единственная оптимальная модель с использованием критерия BIC [4], вычисляемого как

$$\text{BIC} = n \ln(\text{RSS}/n) + k \ln n, \quad k = P + 2.$$

В настоящей работе статистический анализ выполнен с использованием пакета R [5].

Синтетические данные (пространственные распределения температур материала для разных моментов времени) получены путем численного решения (1) с использованием конечно-разностной схемы Кранка–Николсона [2] (табл. 1). Граничные и начальные условия имеют вид [3]:

$$T(x, 0) = T_0,$$

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0} = q_s - L\rho\omega, \quad T(\infty, t) = T_0, \quad (3)$$

где  $L$  — скрытая теплота испарения,  $q_s = (1 - R_f)I_0$ ,  $R_f = 0.77$  [6] — коэффициент отражения,  $I_0$  — интенсивность излучения на поверхности мишени,  $T_0 = 300$  К. Скорость движения поверхности  $\omega$  соответствует закону Герца [3,6]. Продолжительность лазерного импульса ( $I_0 \neq 0$ ) — 100 ns, интенсивность излучения предполагается постоянной во времени, материал мишени — ниобий. В вариантах 1 и 2 материал нагревается ниже температуры плавления. Для этого случая учитывается зависимость коэффициента теплопроводности от температуры согласно [7]. В вариантах 3 и 4 температура поверхности материала приближается к температуре кипения или превышает ее. С учетом отсутствия надежных данных для этого диапазона теплопроводность материала считается постоянной и равной теплопроводности жидкого металла [7]. Следует отметить, что с целью упрощения постановки фазовый переход твердое тело–жидкость в работе не рассматривается. Примеры синтетических данных представлены на рис. 1, 2.

**Таблица 1.** Варианты синтетических данных о процессе прогрева мишени

Вариант	Временной срез, $\mu\text{s}$	$I_0(t)$ , $\text{W/m}^2$	$\rho$ , $\text{kg/m}^3$	$C$ , $\text{J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$	$\lambda$ , $\text{W}/(\text{m} \cdot \text{K})$	$N_d$
1	0.01	$3 \cdot 10^{11}$	8570	263	Var	998
2	1	$3 \cdot 10^{11}$	8570	263	Var	11704
3	0.0975	$7 \cdot 10^{11}$	7580	449.9	65	3224
4	0.0975	$12 \cdot 10^{11}$	7580	449.9	65	3355
5	1	$3 \cdot 10^{11}$	8570	263	Var	580

Примечание.  $N_d$  — число степеней свободы, Var — переменная.

**Таблица 2.** Результаты применения процедуры отбора оптимального подмножества для варианта 1

	$\alpha_2$	$\alpha_3$	$\alpha_4$	$\alpha_5$	$\alpha_6$	BIC
Теория	*	*	*	*		
(1)	*					-3628.851
(2)	*				*	-10980.495
(3)	*	*			*	-12940.783
(4)	*	*	*	*		-29934.639
(5)	*	*	*	*	*	-29928.260

**Таблица 3.** Результаты применения ГДМ

	$\alpha_0$	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$\alpha_3$	$\alpha_4$	$\alpha_5$	$\alpha_6$
Теория	0	-1	$2.2845 \cdot 10^{-5}$	$2.9668 \cdot 10^{-9}$	$2.9513 \cdot 10^{-12}$	$-1.0009 \cdot 10^{-15}$	0
Вариант 1	$2.2415 \cdot 10^{-5}$	-1	$2.2845 \cdot 10^{-5}$	$2.9669 \cdot 10^{-9}$	$2.9513 \cdot 10^{-12}$	$-1.0009 \cdot 10^{-15}$	0
Вариант 2	$1.2132 \cdot 10^{-7}$	-1	$2.2845 \cdot 10^{-5}$	$2.9668 \cdot 10^{-9}$	$2.9513 \cdot 10^{-12}$	$-1.0009 \cdot 10^{-15}$	0
Вариант 5	$-2.5967 \cdot 10^{-7}$	-1	$2.2845 \cdot 10^{-5}$	$2.9668 \cdot 10^{-9}$	$2.9513 \cdot 10^{-12}$	$-1.0009 \cdot 10^{-15}$	0
Теория	0	-1	$1.9060 \cdot 10^{-5}$	0	0	0	-
Вариант 3	$7.3003 \cdot 10^{-6}$	-1	$1.9060 \cdot 10^{-5}$	0	0	0	0
Вариант 4	$1.4656 \cdot 10^{-5}$	-1	$1.9060 \cdot 10^{-5}$	0	0	0	0.283

В настоящей работе для генерации модели используются данные, соответствующие одному временному срезу (табл. 1), содержащему три близлежащих временных слоя (шаг времени между слоями  $\Delta t = 10^{-11}$  s для вариантов 1–4,  $\Delta t = 10^{-10}$  s для варианта 5). Число степеней свободы (узлов пространственной сетки с известным значением температуры), используемых для генерации модели, составляет 580–16 000 в зависимости от варианта (табл. 1).

Сначала метод ГДМ применен к восстановлению уравнения по данным, предполагающим прогрев мишени до температур менее 2300 K (варианты 1 и 2) и температурную зависимость коэффициента теплопроводности. В табл. 2 в качестве примера применения процедуры выбора оптимального подмножества элементов представлены результаты для варианта 1, соответствующего стадии облучения. В первом столбце цифра в скобках означает число элементов  $p$ , входящих под знак суммы в правой части выражения (2). Для данного варианта процедура правильно воспроизводит структуру уравнения, включающего четыре слагаемых (без учета члена, соответствующего  $\alpha_1$ ). Такому набору элементов урав-

нения отвечает минимальное значение критерия BIC. Вариант 2 соответствует тем же условиям, но большему времени процесса  $t = 10^{-6}$  s. Температура материала уменьшается из-за процесса диффузии тепла в глубь мишени. К моменту времени  $1 \mu\text{s}$  диапазон изменения температуры материала составляет 300–800 K, при этом число степеней свободы увеличивается до 12 000. Конвективное слагаемое для данного варианта также не воспроизводится.

Результаты применения метода ГДМ для вариантов 1 и 2 сведены в табл. 3. В первой строке таблицы (графа „Теория“) приведены нормированные коэффициенты  $\alpha_2 - \alpha_5$ , соответствующие используемой при численном решении уравнения (1) аппроксимации коэффициента теплопроводности. В следующих строках содержатся восстановленные коэффициенты для рассмотренных вариантов. Как следует из представленных результатов, значения коэффициентов в полиномиальной зависимости теплопроводности воспроизводятся достаточно точно. Погрешность восстановления полного коэффициента теплопроводности не превышает 0.002%. Увеличение шага по времени до  $10^{-10}$  s и шага сетки в 50 раз

до  $10^{-7}$  m не повлияло на результаты восстановления модели (вариант 5, табл. 3).

Для демонстрации возможностей ГДМ для индикации протекания дополнительных физических процессов было выполнено восстановление модели для вариантов 3 и 4. В варианте 3 интенсивность лазерного излучения оказывалась недостаточной для испарения поверхности мишени. Температура поверхности достигает 4000 К (рис. 2). Для варианта 4 температура поверхности к моменту завершения импульса превышает 6000 К и скорость фронта испарения становится значимой (рис. 2).

Результаты применения ГДМ для вариантов 3 и 4 приведены в табл. 3. Видно, что ГДМ правильно восстанавливает структуру уравнения. Для варианта 4 воспроизводится коэффициент при конвективном слагаемом. Также правильно воспроизводится значение безразмерного коэффициента теплопроводности.

Проведенное исследование является первым этапом в изучении возможностей применения предлагаемого алгоритма ГДМ как для непосредственного построения математической модели сложного явления по имеющимся данным, так и для индикации сопутствующих процессов, таких, например, как фазовые превращения, а также для уточнения теплофизических параметров материалов. Следующим важным шагом в исследовании эффективности применения алгоритма генеративного дизайна для восстановления моделей тепловых процессов будет его апробация на зашумленных экспериментальных данных.

### Финансирование работы

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-11-00296 (<https://rscf.ru/project/21-11-00296/>).

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] M. Maslyayev, A. Hvatov, A.V. Kalyuzhnaya, J. Comp. Sci., **53**, 101345 (2021). DOI: 10.1016/j.jocs.2021.101345
- [2] А.А. Самарский, П.Н. Вабищевич, *Вычислительная теплопередача* (Едиториал УРСС, М., 2003).
- [3] С.И. Анисимов, Я.А. Имас, Г.С. Романов, Ю.В. Ходыко, *Действие излучения большой мощности на металлы* (Наука, М., 1979).
- [4] Г. Джеймс, Д. Уиттон, Т. Хасты, Р. Тибширани, *Введение в статистическое обучение с примерами на языке R* (ДМК Пресс, М., 2017).
- [5] *R: A language and environment for statistical computing* (R Foundation for Statistical Computing, Vienna, 2020) [Электронный ресурс]. URL: <https://www.R-project.org/>
- [6] N.Y. Bykov, N.M. Bulgakova, A.V. Bulgakov, G.A. Loukianov, Appl. Phys. A., **79**, 1097 (2004).
- [7] В.Е. Зиновьев, *Теплофизические свойства металлов при высоких температурах* (Металлургия, М., 1989).