01

Определение кинетических параметров фазово-полевой модели нейросетевым методом

© С.А. Коробейников [1], Д.М. Коробейников [1,2], В.Г. Лебедев [1], В.И. Ладьянов [1]

[1] Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия
[2] Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия
E-mail: sa.korobeynikov@yandex.ru

Поступило в Редакцию 24 ноября 2025 г.
В окончательной редакции 28 января 2026 г.
Принято к публикации 1 февраля 2026 г.

Рассматривается обратная задача восстановления кинетических параметров фазово-полевой модели кристаллизации чистого железа в изотермической постановке. Предложен нейросетевой метод, который по зависимости скорости фронта от переохлаждения оценивает параметры мобильности и времени релаксации фазового поля. Обучение реализовано итерационным циклом, согласованным с физикой процесса. Показано воспроизведение целевых кривых скорости для референтных данных из молекулярной динамики. Предложенный метод снижает трудоемкость калибровки моделей, переносимых на смежные материалы и другие физические постановки задачи.

Ключевые слова: метод фазового поля, нейронная сеть, чистое вещество, оптимизация параметров.

DOI: 10.61011/PJTF.2026.10.62731.20582

Моделирование фазовых переходов в реальных материалах сопровождается неопределенностью кинетических параметров, определяющих динамику межфазной границы. В фазово-полевом подходе [1] такие параметры, как мобильность фазового поля и время релаксации, не выводятся напрямую из базовых принципов и требуют подбора по экспериментальным или референтным данным. При этом вычислительная стоимость фазово-полевых расчетов существенно ограничивает применение классических итерационных методов.

В этих условиях ключевой задачей становится определение физически согласованных значений кинетических параметров, пригодных для последующего анализа других характеристик системы. Перспективным инструментом для решения такой обратной задачи являются нейронные сети, способные выявлять нелинейные связи между параметрами модели и наблюдаемыми зависимостями. В настоящей работе используется полносвязная нейронная сеть для определения кинетических параметров фазово-полевой модели кристаллизации чистого железа на основе молекулярно-динамических данных в изотермической постановке в условиях ограниченных вычислительных ресурсов.

Метод фазового поля вводит параметр порядка $\varphi(\mathbf{r}, t)$, описывающий фазовое состояние точки: внутри фаз величина φ постоянна, а в межфазной области плавно изменяется, формируя диффузную границу. Обычно принимают $\varphi = 1$ для твердой фазы (S) и $\varphi = 0$ для жидкой (L) [1].

Функционал полной энтропии системы при постоянных давлении и плотностях фаз [2] имеет вид

$$S = -\int\limits_V \left[\frac{\partial g(\varphi, T)}{\partial T} + \frac{1}{2T_m}\left(\sigma^2\left(\nabla\varphi\right)^2 + \gamma\dot{\varphi}^2\right)\right] dV,$$

где равновесная плотность энергии Гиббса $g(\varphi, T)$ выражается в виде интерполяции по фазам с межфазным „double-well“ потенциалом

$$g(T, \varphi) = p(\varphi)g^S(T) + \big(1 - p(\varphi)\big)g^L(T) + Wg(\varphi),$$

где $g^S(T)$ и $g^L(T)$ — удельные энергии Гиббса твердой и жидкой фаз; $p(\varphi) = \varphi^2(3 - 2\varphi)$ — интерполяционный полином, описывающий объемную долю фазы; $g(\varphi) = \varphi^2(1 - \varphi)^2$ — потенциал с двумя минимумами при $\varphi = 0,\ 1$; W — высота потенциального барьера между фазами [3]. Коэффициенты σ и γ характеризуют соответственно поверхностную энергию и кинетические свойства межфазной границы. Для краткости далее аргументы функций опускаются.

Для получения системы релаксационных уравнений фазового перехода определим скорость изменения полной энтропии, используя закон сохранения объемной плотности энтальпии

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_T, \qquad h = g - T\frac{\partial g}{\partial T},$$

и потребуем положительной определенности производства энтропии в рассматриваемом объеме

$$\frac{dS}{dt} \geqslant 0.$$

Система уравнений выводится из принципов неравновесной термодинамики [4]. В работе используется упрощенная изотермическая постановка без теплопереноса и геометрических эффектов, при которой модель сводится к одному уравнению фазового поля

$$\tau_\varphi \ddot{\varphi} + \dot{\varphi} = M_\varphi \left[\sigma^2 \nabla^2 \varphi - \frac{T_m}{T} \left(W g' + \Delta g\, p' \right) \right], \qquad (1)$$

где τ_φ — время релаксации фазового поля, M_φ — мобильность фазового поля, $\Delta g = g^S - g^L$. Штрих в p' и g' обозначает производные по φ. В изотермической постановке все параметры уравнения (1), включая термодинамический источник Δg, принимаются постоянными. Мобильность фазового поля M_φ, как правило, зависит от температуры и обычно выбирается в виде зависимости Аррениуса

$$M_\varphi(T) = M_0 \exp\left(-\frac{E_0}{T} \right).$$

Исследуя условия равновесия и предельные случаи уравнения фазового поля [3], можно получить выражения для σ и W через параметры межфазной границы

$$\sigma^2 = 3\chi\delta, \qquad W = \frac{6\chi}{\delta}, \qquad (2)$$

где δ — ширина диффузной границы, χ — удельная поверхностная энергия.

Для исключения влияния кривизны межфазной границы рассмотрим движение плоского фронта в одномерной постановке. Преобразуем уравнение (1) к безразмерному виду, переопределяя координату и время в виде произведения размерного параметра и безразмерной величины: $x = \delta\xi$ и $t = t_0\tau$. С учетом выражений (2) получаем

$$\bar{\tau}_\varphi \ddot{\varphi} + \dot{\varphi} = \bar{M}_\varphi \left[\nabla^2 \varphi - \frac{T_m}{T} \left(2g' + p' \overline{\Delta g} \right) \right], \qquad (3)$$

где размерный параметр времени и безразмерные параметры определяются как

$$t_0 = \frac{\delta}{3M_\varphi^0 \chi}, \qquad \overline{\Delta g} = \frac{\delta}{3\chi} \Delta g,$$

$$\bar{\tau}_\varphi = \frac{\tau_\varphi}{t_0}, \qquad \bar{M}_\varphi = \frac{M_\varphi}{M_\varphi^0}.$$

Мобильность M_φ в изотермической постановке считается постоянной, но сохраняет температурную зависимость; масштаб времени t_0 фиксируется выбором $M_\varphi^0 = M_\varphi(T_m)$. Термодинамические потенциалы для чистого железа взяты из работы [5], температура плавления составляет $T_m = 1811$ K.

Ключевой параметр в полученном уравнении — комбинация $\delta/(3\chi)$, объединяющая характеристики межфазной границы. Значения χ для многих систем хорошо известны, а ширина диффузной границы δ — специфичный для фазово-полевых моделей параметр, отражающий толщину области перехода между дальним и ближним порядком; обычно $\delta \sim 10^{-9}$ m. Для снижения неопределенности введем $a = \delta/(3\chi)$; типично $a \approx 10^{-9}\,\mathrm{m^3/J}$ (например, при $\chi = 0.333\ \mathrm{J/m^2}$ и $\delta = 10^{-9}$ m).

Для решения уравнения (3) использована градиентно-устойчивая схема [6], реализованная методом прогонки. Расчеты проводились в области $\xi \in [20; 120]$ с шагами $\Delta\xi = 0.1$ и $\Delta\tau = 0.1$. Положение фронта определялось по значению $\varphi = 0.5$; при достижении $\xi = 100$ область циклически сдвигалась. Установившаяся скорость вычислялась усреднением по последним 200 шагам при общем числе итераций $N_\tau = 10\,000$.

Далее рассматривается задача определения кинетических параметров фазово-полевой модели по известной зависимости скорости фронта от переохлаждения в условиях ограниченных вычислительных ресурсов. Целью является определение набора параметров

$$\mathbf{P}_{exp} = \{M_0, E_0, \tau_\varphi\},$$

обеспечивающих физически согласованное воспроизведение референтной зависимости скорости фронта $\mathbf{V}_{exp}$ при фиксированном числе итераций алгоритма, равном 20. В качестве референтных данных используются „квазиэкспериментальные“ результаты молекулярно-динамического моделирования [7].

Для определения параметров использована нейронная сеть – трехслойный полносвязный перцептрон с архитектурой 16-48-3. На вход сети подаются скорости фронта, полученные в результате численного моделирования $\mathbf{V} = \{V(\Delta T_1), V(\Delta T_2), \dots\}$, а выходными данными являются параметры модели $\mathbf{P}$. На входном и скрытом слоях применялась функция активации tanh, обучение выполнялось алгоритмом Adam с использованием среднеквадратичной ошибки (MSE); критерием остановки обучения была суммарная ошибка $\leqslant 10^{-3}$. Все входные и выходные величины линейно нормированы в диапазоне $[-1; 1]$.

Начальное приближение $\mathbf{P}_0$ определялось из предела резкой границы [2], где фазово-полевая модель сводится к аналитической зависимости. В настоящей работе выражение использовано с учетом соотношений (2) и с условием $\tau_\varphi = 0$, скорость фронта выражается как

$$v = -\frac{3}{2} \delta M_\varphi(T_0) \sqrt{\frac{T_m}{T_0}} \Delta g(T_0).$$

Сравнивая расчетные скорости v_i с данными молекулярно-динамического моделирования $\tilde{v}_i$, определяли начальные значения параметров M_0 и E_0 из минимизации функционала невязки

$$r = \sum_i \left(1 - \frac{v_i}{\tilde{v}_i} \right)^2. \qquad (4)$$

Обучение проводится итерационно: на шаге j сеть обучается на накопленном наборе пар $\{(\mathbf{V}_k, \mathbf{P}_k)\}_{k=0}^{j}$.

Затем на вход сети подается вектор скоростей $\mathbf{V}_{exp}$, и сеть прогнозирует новое приближение параметров

$$\mathbf{P}_{j+1} = Neural\ Network(\mathbf{V}_{exp}).$$

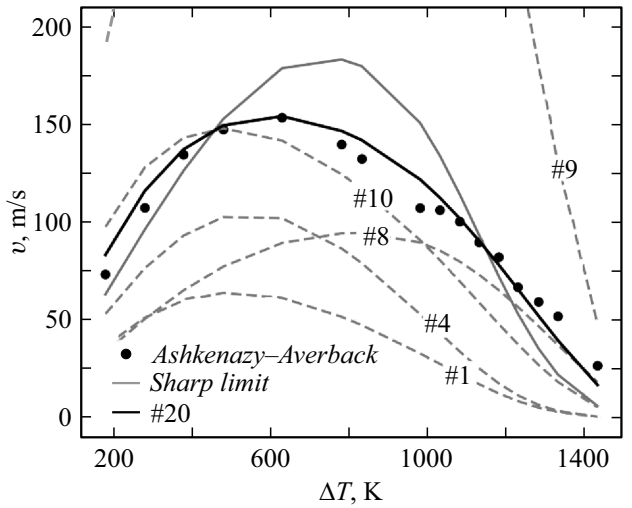
По $\mathbf{P}_{j+1}$ проводится численное решение уравнения фазового поля и вычисляются скорости

$$\mathbf{V}_{j+1} = Phase\ Field(\mathbf{P}_{j+1}),$$

после чего пара $(\mathbf{V}_{j+1}, \mathbf{P}_{j+1})$ добавляется в обучающую выборку, и сеть обучается заново. Такой подход позволяет использовать фазово-полевую модель в качестве „арбитра“, оценивающего корректность текущего приближения параметров без прямой обратной связи с нейронной сетью. Для повышения устойчивости на первых итерациях перед прогнозом $\mathbf{P}_{j+1}$ в веса сети вносится псевдослучайное возмущение малой амплитуды, направленное на расширение области поиска параметров и предотвращение преждевременной стабилизации на нефизичных локальных решениях; далее оно отключается. Результирующий набор параметров выбирается как решение с наименьшей невязкой, достигнутой на этапе уточнения параметров. В настоящей работе было проведено десять стабилизирующих (с возмущением в весах) и десять уточняющих итераций.

На рисунке наблюдается широкий разброс кривых $v(\Delta T)$ для первых итераций, происходит формирование обучающей выборки. К десятой итерации достигается согласование формы и максимума кривой с данными [7]. На последующих шагах алгоритм уточняет получаемые параметры.

В табл. 1 приведены значения параметров, соответствующих итерациям, показанным на рисунке, а также



Зависимость скорости фронта кристаллизации v от переохлаждения ΔT. Точки — данные молекулярной динамики [7]; серая сплошная линия — расчет в пределе резкой границы; штриховые кривые — результаты моделирования на различных итерациях обучения нейронной сети, черная сплошная — кривая, соответствующая завершающему этапу процесса уточнения параметров и характеризующаяся наименьшей невязкой.

Таблица 1. Значения параметров модели и невязки для некоторых итераций обучения нейронной сети

Итерация	M_0, $m^3/(J \cdot s)$	E_0, K	τ_φ, 10^{-12} s	Невязка r
Резкая граница	589.4	2620.0	0.0	1.6940
1	694.8	3688.1	9.3	8.7991
4	1040.0	3796.2	2.2	6.2628
8	177.2	1650.8	6.1	1.8602
9	1327.6	2088.5	0.8	89.0104
10	1249.1	2928.0	9.5	2.1976
18	630.9	2148.4	7.3	0.2727
19	631.1	2146.0	7.3	0.2696
20	631.2	2143.4	7.4	0.2680

данным для трех последних шагов алгоритма; дополнительно указаны значения невязки (4), используемой в качестве критерия сравнения. На начальном этапе наблюдается значительный разброс параметров, связанный с формированием обучающей выборки. В рассматриваемом примере на этапе уточнения невязка убывает монотонно; такое поведение не является гарантированным свойством метода, скачок невязки на итерации #9 отражает немонотонный характер этапа стабилизации.

В табл. 2 приведены параметры фазово-полевой модели при разных значениях коэффициента a, задающего связь между шириной диффузной границы и поверхностной энергией. Из данных видно, что изменение a приводит к варьированию M_0, E_0 и τ_φ, что отражает чувствительность модели к характеристикам межфазной границы. Минимальное значение невязки выявлено для a, равного $0.8 \cdot 10^{-9}\ m^3/J$.

В работе предложен подход к определению кинетических параметров фазово-полевой модели кристаллизации чистого железа с использованием нейронной сети в сочетании с численным моделированием в условиях ограниченных вычислительных ресурсов. Итерационное взаимодействие нейросети с фазово-полевой моделью позволяет подобрать значения параметров M_0, E_0 и τ_φ, обеспечивающие воспроизведение зависимости скорости фронта от переохлаждения, полученной в молекулярно-динамическом моделировании.

Анализ чувствительности результатов к параметру $a = \delta/(3\chi)$ показывает, что предложенный алгоритм

Таблица 2. Значения параметров модели и невязки при различных заданных значениях параметра $a = \delta/(3\chi)$

a, $10^{-9}\ m^3/J$	M_0, $m^3/(J \cdot s)$	E_0, K	τ_φ, 10^{-12} s	Невязка r
0.8	583.1	2000.5	10.4	0.0958
1.0	631.2	2143.4	7.4	0.2696
1.2	526.4	1901.2	7.9	0.0997
1.5	564.0	1943.7	7.3	0.1657
2.0	475.0	1822.2	7.1	0.1160

сохраняет работоспособность при различных характеристиках межфазной границы, приводя к согласованным наборам кинетических параметров. Перенос алгоритма на другие материалы и фазово-полевые модели не требует изменения его принципиальной схемы и сводится к замене используемых термодинамических и референтных данных с последующим переобучением для конкретной системы. Предложенный подход может быть использован для первичной калибровки фазово-полевых моделей при исследовании фазовых переходов в различных постановках.

Финансирование работы

Исследование частично (С.А. Коробейников, Д.М. Коробейников, В.Г. Лебедев) выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-22-20002 (https://rscf.ru/project/25-22-20002).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] W.J. Boettinger, J.A. Warren, C. Beckermann, A. Karma, Annu. Rev. Mater. Res., **32** (1), 163 (2002). DOI: 10.1146/annurev.matsci.32.101901.155803

[2] В.Г. Лебедев, А.А. Лебедева, П.К. Галенко, Письма в ЖЭТФ, **101** (2), 143 (2015). DOI: 10.7868/S0370274X15020137 [V.G. Lebedev, A.A. Lebedeva, P.K. Galenko, JETP Lett., **101** (2), 136 (2015). DOI: 10.1134/S0021364015020101].

[3] S.-L. Wang, R. Sekerka, A. Wheeler, B. Murray, S. Coriell, R. Braun, G. McFadden, Physica D, **69** (1-2), 189 (1993). DOI: 10.1016/0167-2789(93)90189-8

[4] S.R. de Groot, P. Mazur, *Non-equilibrium thermodynamics* (Dover Publ., N.Y., 1984).

[5] A.T. Dinsdale, Calphad, **15** (4), 317 (1991). DOI: 10.1016/0364-5916(91)90030-N

[6] В.Г. Лебедев, А.А. Обухов, В.П. Бовин, В.И. Ладьянов, Химическая физика и мезоскопия, **3** (23), 312 (2021). DOI: 10.15350/17270529.2021.3.28

[7] Y. Ashkenazy, R.S. Averback, Europhys. Lett., **79** (2), 26005 (2007). DOI: 10.1209/0295-5075/79/26005