

Termikus peremfeltételek becslése bio-inspirált optimalizálási eljárások alkalmazásával

(PhD értekezés tézisei)

Készítette:

Fried Zoltán László

Óbudai Egyetem

Alkalmazott Informatikai és Alkalmazott Matematikai Doktori Iskola

Budapest, 2024

Tudományos vezetőik:

Prof. Dr. Felde Imre

Prof. Dr. Szénási Sándor

1. A KUTATÁSI FELADAT ÉS ANNAK TUDOMÁNYOS ELŐZMÉNYEI

Az értekezés az acélok bemeztési edzése közben kialakuló hőátadási jelenség kvantitatív jellemzéséhez javasolt numerikus eljárások vizsgálatával foglalkozik.

Az acélok bemeztési edzése a hőkezelési eljárások közül az egyik leggyakrabban alkalmazott eljárás. A hipoeutektoidos szerkezeti acélok általánosan alkalmazott immerziós edzési hőkezelése a munkadarab ausztenítéséből és az azt követő gyors hűtéséből áll. Ezen edzési művelet célja az elvárt tulajdonságú (szilárdságú és szívósságú) szövet létrehozása a munkadarab térfogatának előre tervezett hányadában. Az edzési művelet legkritikusabb része a munkadarab lehűtése az ausztenítés hőmérsékletéről, amely döntően meghatározza a munkadarab szövetszerkezeti és mechanikai tulajdonságait. Az edzési folyamathoz használt hűtőközeg hűtési képessége a munkadarab és a hűtőközeg fizikai és kémiai tulajdonságaitól, valamint az egymáshoz viszonyított áramlási tulajdonságaitól függ. A hűtőközeg hűtési képességét a hőelvonásának a karakterisztikája írja le. A hőkezelés tervezhetőségének, a termék végső tulajdonságainak biztosítása a hőelvonási karakterisztika ismeretének a záloga.

Az instacioner hőátadási jelenségek kvantitatív jellemzésére a hőfluxus mellett a „hőátadási együttható” (Heat Transfer Coefficient (HTC))

paraméter vagy függvény használatos. A HTC (h [$\frac{W}{m^2 \cdot K}$]) a hűtött test felületén időben és térben változó, a munkadarab által a környezetének átadott hőáram leírására alkalmas oly módon, hogy az magába sűríti számos, részleteiben aligha modellezhető fizikai folyamat együttes hőtani hatását. A hőátadási együttható függvény becslése a reverse-engineering problémák körébe tartozó ún. inverz hőátadási probléma (Inverse Heat Conduction Process (IHCP)). Ennek megoldása számítógép igénybevétele esetén lehetséges, ami nagy valószínűséggel egy optimalizációs probléma megoldását jelenti, vagy végső soron arra visszavezethető.

Egy hevítésnek, vagy hűtésnek kitett munkadarabban végbemenő hőmérséklet-eloszlás idő és hely szerinti változása a hővezetés Fourier-egyenletének megoldásával határozható meg (hőátadás esetében), harmadfajú peremfeltétel mellett. Mivel a munkadarabban és a munkadarab határfelületén végbemenő hőközlési folyamat nemlineáris (függ a munkadarab fizikai tulajdonságaitól (hővezetési tényező, fajhő, stb.) és a hőátadási együtthatótól, a hőátadási együttható pedig az időtől és helytől), ezért a Fourier-egyenlet megoldása zárt alakban nem adható meg. Emiatt numerikus eljárást kell alkalmazni.

Az értekezésben szereplő inverz analízis célja, hogy iteratív becslést adjon az $1D$ tengelyszimmetrikus végtelen hosszú test adott sugarában kialakult hőmérsékleti görbe alapján az ismeretlen felületi $h(t)$ függvényre, választott eljárás(ok) alkalmazásával.

2. CÉLKITŰZÉS

A termikus peremfeltétel becslésére a hőmérsékletmező ismeretében van lehetőség, és ekkor az okozatból (kialakult hőmérsékletmező) kell az okra (termikus peremfeltétel) következtetni (inverz analízis). Emiatt a feladatnak nem létezik egyedi, unikális megoldása.

Matematikai szempontból a probléma egy optimalizálási feladatként fogalmazható meg, amelyben egy feltételezett kiindulási $h(\vec{r}, t)$ eloszlás, valamint a munkadarab egyes pontjaiban adott hőmérséklet-értékek időfüggésének mért és számított eltérését kell minimalizálni.

Kutatási célkitűzéseim az IHCP feladat megoldására alkalmas algoritmusok kidolgozására és vizsgálatára irányultak, amelyek az alábbi feltételeket elégítik ki:

- A fejlesztett algoritmus független a hőtani modelltől, végtelen hosszú tengelyszimmetrikus munkadarab kémiai tulajdonságaitól és átmérőjétől, valamint a hűtőközegtől.
- Eredménye az időtől vagy felületi hőmérséklettől függő hőátadási együttható, mint a munkadarab és a hűtőközeg közötti hőátadást jellemző függvény.

A dolgozatban 5 főfejezetben foglalkozom a probléma megoldásának lehetőségeivel, úgymint a grafikus gyorsítókártya -, neurális hálózat -, bio-inspirált algoritmusok -, és gradiens alapú módszer alkalmazá-

sának vizsgálatával, valamint ezen eljárások felhasználásával újfajta algoritmusokat mutatok be a célkitűzések megvalósítása érdekében.

Az a motiváció vezérelt a dolgozatban bemutatott új eljárások fejlesztése közben, hogy lehetőség szerint hatékonyság vagy pontosság tekintetében (a hozzáférhető információk alapján) felülmúlják a dolgozatban vizsgált hasonló elven működő, már létező megoldásokat.

3. VIZSGÁLT MÓDSZEREK

A HTC függvény becslése (optimalizálási feladat) a következő lépésekből áll:

1. A lehűlés során a vizsgált munkadarab adott pontjaiban felvesszük a lehűlési görbéket.
2. A HTC függvények kezdeti értékeit a keresési tartományban véletlenszerűen választjuk meg.
3. A lehűlési görbéket kiszámítjuk.
4. A mért és számított lehűlési görbéket összehasonlítjuk egymással, amiből a célfüggvény számítható.
5. Ha a célfüggvény a megadott tolerancia határon kívül esik, akkor módosítjuk a hőátadási függvény értékeit a választott optimalizációs algoritmus alapján és folytatjuk a számítást a 2. lépéssel.
6. Ha a közelítés megfelelő, akkor a számítás végeredménye a megválasztott HTC függvény lesz.

3.1. A hőátadási együttható függvény becslésének egyszerűsített megoldása

A henger alakú munkadarab felületén feltételezett speciális $h(\vec{r}, t)$ eloszlás alkalmazása helyett feltételezem, hogy a HTC együttható a felületen közvetlenül a hőmérséklet függvénye, azaz egyszerűbb $h(T(\vec{r}, t))$ függvénnyel van dolgunk, továbbá kvalitatív megfontolások alapján a $h(T)$ függvény jellege leírható néhány „alakparaméterrel”, valamint egyszerűen módosítható alakparamétere „hangolásával”. Ez a megszorítás nagyon jelentős egyszerűsítés, amelynek eredményeként az optimumkeresési feladat algoritmusáé kisebb teljesítményű számítógépen is alkalmazható. A klasszikus Newton-Raphson algoritmus gyors eredményre tud vezetni, ha a feltételezett $\min S = 0, S : \mathbb{R}^D \mapsto \mathbb{R}$ optimalizálandó függvény állítás valóban igaz. A $\nabla S(x(1))$ értékén keresztül tegyünk egy $\Delta x = \tilde{\alpha} \nabla S(x(1))$ „nagy ugrást” úgy, hogy teljesüljön a $-S(x(1)) = \Delta x^T \nabla S(x(1))$ feltétel, majd ismételjük meg ezt a lépést az új, $x(2) = x(1) + \Delta x$ pontból kiindulva, és így tovább. A kapott megoldás egyféle „átmenet” a Lagrange-féle Gradiens Módszer és a Newton-Raphson algoritmus között, amely a pontosság és a futási idő közti kompromisszum alapján volt beállítható.

3.2. Grafikus gyorsítókártya

A Graphical Processor Unit (GPU)-t az $1D$ tengelyszimmetrikus test lehülési görbék, és a görbékből számítható célfüggvény értékek, valamint a neurális hálózat számításaihoz használtam. A számításokhoz egy Nvidia GPU kártyát választottam. A lehülés görbék számítását az explicit Finite Difference Method (FDM) eljárással határoztam meg. A GPU-ra implementált eljárást a Computer Processor Unit (CPU)-ra implementált implicit Euler eljárással validáltam. Az implementálás során számos adott (például shared memória mérete) és választható (például grid hossz) paraméterek között egy kompromisszumos megoldás után egy jelentősen gyorsabb számítási módszer született mint a CPU-ra készült ismert számítási eljárások.

3.3. Inverz hőtani probléma közelítő megoldása neurális hálózattal

Gépi tanulási modellt használtam fel az $1D$ tengelyszimmetrikus test felületén kialakult hőmérsékleti görbe alapján a felületi hőátadási együttható függvény becslésére. A neurális hálózatok képessége (és erőssége), hogy tetszőleges bemenet és kimenet között képesek megtalálni a leképezést elvégző függvényt. A neurális hálózatok tanítása során mindig kritikus fontosságú a megfelelő mennyiségű és minőségű tanítási minta megléte. Az általam kifejlesztett GPU alapú szimuláció segítségével elfogadható idő alatt van lehetőség nagy mennyiségű szí-

muláció lefuttatására, így a tanításhoz szükséges hőátadási függvény – lehülési görbe előállítására. A feladat meglehetősen komplex, hiszen a neurális hálózatnak nagy mennyiségű adatok között kell nemlineáris összefüggést találnia.

3.4. Bio-inspirált (PSO és FWA) algoritmusok kiterjesztése

A bio-inspirált optimalizálási eljárások olyan módszerek, amelyeket általában élőlények, evolúciós viselkedések vagy fizikai elvek ihlettek, hogy hatékonyan oldjanak meg optimalizálási problémákat. Egyes irodalmi források alapján a Particle Swarm Optimization (PSO) algoritmus megfelelő eljárás a hőátbocsátási tényező függvényének közelítésére. A bio-inspirált predikciós algoritmusok javítására új megoldásokat dolgoztam ki, valamint azokat a PSO és Firworks Algorithm (FWA) algoritmusokkal ellenőriztem, amelyekkel a tranziens hőátadási tényező függvénye becsülhető a $1D$ tengelyszimmetrikus munkadarab felületén.

3.5. Új típusú FWA algoritmus

Az FWA algoritmust felhasználva kidolgoztam egy, az IHCP problémák megoldására, speciálisan az $1D$ tengelyszimmetrikus, a test felületi hőátadási függvényének becslésére alkalmas új típusú FWA variáns algoritmust. Az új algoritmus teljesen új spark-okat vezet be, valamint a már ismert (Explosion és Gaussian) spark-ok mozgásegyenleteit is

újrdefiniálja, egyszóval teljesen új alapokra helyezi az FWA algoritmust, miközben megtartja azok fundamentumát. Az új számítási eljárás optimalizálási korlátként veszi figyelembe az időben változó hőátadási függvény predesztinált karakterisztikáját is.

4. AZ ÉRTEKEZÉS ÚJ TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEI

1. Kidolgoztam egy új típusú, GPU-ra optimalizált adatpárhuzamos számítási eljárást az 1D tengelyszimmetrikus (hengeres) végtelen hosszú test hőmérséklet-eloszlásának hatékony számítására, amely a számítási eljárás során figyelembe veszi a CPU és GPU architekturális lehetőségeit és korlátainak megfelelő optimalizációs eljárásokat alkalmaz a maximálisan elérhető számítási sebesség, valamint a párhuzamosan számolható lehűlési görbék számának növelése érdekében. Validációs tesztek eredményeivel igazoltam, hogy az új típusú számítási megoldás – azonos pontosság mellett – jelentősen gyorsabb a CPU-ra készült ismert számítási módszereknél.
2. Gépi tanulási modellt dolgoztam ki, amely az 1D végtelen hosszú tengelyszimmetrikus (hengeres) test felületén kialakult hőmérsékleti görbe alapján a felületi HTC függvény becslésére alkalmas. A modell számítási pontosságát hipotetikus hőátadási függvények rekonstruálásán keresztül igazoltam.

-
3. Új típusú megoldásokat fejlesztettem ki az 1D tengelyszimmetrikus test felületén kialakuló tranziens HTC függvény becslésére felhasznált Részecske-raj Optimalizációs és Fireworks algoritmusokhoz. Az általam fejlesztett másodlagos célfüggvény és mapping operátor bevezetésével az inverz hőtani probléma megoldása a számítási pontosság növelésével és a futási idő csökkenésével járt a vizsgálatban bevont Részecske-raj Optimalizációs és Fireworks algoritmusok esetében a szakirodalomban közölt ugyanazon algoritmusokhoz képest 50 és 200 pontból álló HTC függvények esetében, amelyeket szimulációs vizsgálatokkal igazoltam.
 4. Kidolgoztam egy, a tranziens HTC függvény becslésére, speciálisan az 1D tengelyszimmetrikus, a test felületi hőátadási függvényének becslésére alkalmas új típusú Fireworks algoritmust. Az új számítási eljárás optimalizálási korlátként veszi figyelembe az időben változó hőátadási függvény predesztinált karakterisztikáját. A Fireworks algoritmus alapegységeit jelentő sparkok helyzeteinek meghatározásához új típusú mozgásegyenleteket javasoltam. Az új módszer számítási hatékonyságát 50 és 200 pontból álló HTC függvények becslésének esetében, numerikus tesztek eredményei alapján igazoltam.
 5. Egyszerű és kis számítási igényű módszert javasoltam arra, hogy komplexitásredukciók alkalmazásával a mért „hűlési görbék”

ismeretében megbecsülhető legyen a HTC időtől való függése az 1D tengelyszimmetrikus test középvonalában egy a klasszikus Gradiens Módszer és a szintén klasszikus „Newton-Raphson algoritmus” közti numerikus megoldáson alapuló eljárás segítségével közönséges kis-kapacitású számítógépen is.

További kutatási irányok

1. Annak a kérdésnek a megválaszolása, hogy az FWA és PSO bio-inspirált heurisztikus eljárásokkal számolt eredmények a $h(t)$ függvény csúcspontjától jobbra levő értékekben miért jelentkezik jelentős eltérés a referenciagörbéhez képest, miközben a bal oldali adatok a jobb oldali értékekhez képest jelentősen pontosabbak.
2. Különböző heurisztikus eljárások esetében megvizsgálni egy neurális háló becsléseként kapott $h(t)$ függvény felhasználásának lehetőségét a heurisztikus eljárások kezdeti értékeként.
3. A dolgozatban ismertetett eljárások átültetése 2D tengelyszimmetrikus (hengeres), véges hosszú munkadarab esetére.
4. A heurisztikus algoritmusok számítási idejének legnagyobb hányadát a lehülési görbék számítása teszi ki, ezért a GPU-ban implementált eljárás további optimalizációjával – az a keresési algoritmustól függetlenül is csökkenthető lenne.
5. Az alkalmazott egyszerűsítések, komplexitásredukciók kiküszöbölése.

Az eredmények hasznosítási lehetőségei

Az értekezés új tudományos eredményei nem csak az acélok be-merítéses edzési technológiájának tervezésében, valamint az edzési műveletek megbízható módon történő kivitelezésében hasznosíthatóak:

- Élelmiszerek tartós tárolása esetében azok hűtése egy bevett eljárás, ahol az élelmiszer hűtésének és felengedésének folyamata alapvetően befolyásolja az élelmiszer felengedése utáni állagát, frissességét.
- Vasúti sínek várható (pontos) élettartalmának becslése (esetleges törés szempontjából) a biztonságos „és olcsóbb” vonatkozás feltétele. Jelenleg a lefektetett vasúti sínek cseréjének pontos idejét előzetes mérésekkel lehet csak meghatározni. A szükséges nagy számú mérések jelentős költsége, és időszükséglete okán azoknak csak töredékét végzik el, ami miatt a csere idejét csak tág határok között lehet meghatározni, vagyis a lefektetett vasúti síneket biztonsági okokból jóval az élettartamuk lejárta előtt (esetleges törés valószínűsége miatt) szükséges cserélni.

5. AZ ÉRTEKEZÉS TÉMAKÖRÉBEN KÉSZÜLT PUBLIKÁCIÓK

1. Zoltán Fried és tsai.: „On the Nature-Inspired Algorithms Applied to Characterize Heat Transfer Coefficients”. *Thermal Processing in Motion*. Spartanburg: ASM, 2018, 47–51. old.

-
2. I. Felde, Z. Fried és S. Szénási: „Solution of 2-D Inverse Heat Conduction Problem with Graphic Accelerator”. *Materials Performance and Characterization* 6.5 (2017), 882–893. old. ISSN: 2379–1365. DOI: 10.1520/mpc20170008.
 3. Zoltán Fried, Sándor Szénási és Imre Felde: „Reconstruction of a heat transfer coefficients by using FWA approach”. Budapest, Hungary. Budapest, Hungary: IEEE, 2018. nov., 99–000104. old. ISBN: 978-1-7281-1118-6. DOI: 10.1109/CINTI.2018.8928227.
 4. Zoltán Fried, Sándor Szénási és Imre Felde: „Prediction of objective function value for heat transfer coefficient function reconstruction by FWA”. *2019 IEEE 13th International Symposium on Applied Computational Intelligence and Informatics (SACI)*. Timisoara, Romania: IEEE, 2019. máj., 305–308. old. ISBN: 978-1-7281-0685-4. DOI: 10.1109/SACI46893.2019.9111623.
 5. Z Fried, I Felde és S Szénási: „Enhancing the Firework Algorithm ecosystem for the reconstruction of the HTC function”. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* 903 (2020. aug.), 12020. old. ISSN: 1757-8981. DOI: 10.1088/1757-899x/903/1/012020.
 6. Zoltán Fried, Imre Felde és József K. Tar: „On the Simulation of Cooling Curves Using Simple Functional Formats”. *Acta*

-
- Polytechnica Hungarica* 17.9 (2020), 109–124. old. ISSN: 1785-8860. DOI: 10.12700/aph.17.9.2020.9.6.
7. Zoltán Fried és tsai.: „Komplex hőátadási együtttható rekonstrukciója bio-inspirált módszer alkalmazásával”. *XXVII. Hőkezelő és anyagtudomány a gépgyártásban országos konferencia és szakkiállítás külföldi részvevőkkel*. 2016, 53–58. old.
 8. Zoltán Fried és tsai.: „Parallelized Particle Swarm Optimization to Estimate the Heat Transfer Coefficients of Palm Oil, Canola Oil, Conventional, and Accelerated Petroleum Oil Quenchants”. *Materials Performance and Characterization* 8 (2018), 96–113. old. ISSN: 2379-1365. DOI: 10.1520/MPC20180049.
 9. Zoltán Fried, Imre Felde és Sándor Szénási: „Komplex hőátadási együtttható rekonstrukciója az FWA algoritmus alkalmazásával”. *XXVIII. Hőkezelő és anyagtudomány a gépgyártásban országos konferencia és szakkiállítás külföldi résztvevőkkel*. 2019, 274–279. old.
 10. Sandor Szenasi, Zoltan Fried és Imre Felde: „Training of Artificial Neural Network to Solve the Inverse Heat Conduction Problem”. *2020 IEEE 18th World Symposium on Applied Machine Intelligence and Informatics (SAMI)*. IEEE, 2020. jan., 293–298. old. DOI: 10.1109/SAMI48414.2020.9108733.

-
11. Sandor Szenasi, Zoltan Fried és Imre Felde: „GPU Accelerated Heat Transfer Simulation Supporting Heuristics To Solve The Inverse Heat Conduction Problem”. *2020 IEEE 18th World Symposium on Applied Machine Intelligence and Informatics (SAMI)*. IEEE, 2020. jan., 287–292. old. DOI: 10.1109/sami48414.2020.9108768.
 12. Zoltán Fried, Sándor Szénási és Imre Felde: „Reconstruction of the heat transfer coefficients by using hybrid (FWA + gradient) approach”. *IEEE 18th World Symposium on Applied Machine Intelligence and Informatics (SAMI 2020)*. 2020, 299–304. old. DOI: 10.1109/SAMI48414.2020.9108767.