**TABLA DE CONTENIDOS**

2 INTRODUCCIÓN 2

3 OBJETIVOS DEL PRESENTE AVANCE 2

4 DESCRIPCIÓN DEL PROBLEMA FÍSICO 2

4.1 Estructura de archivos del proyecto 3

5 GENERACIÓN DE DATASET 4

5.1 Generación de condiciones de borde y punto caliente 4

5.2 Resolución del problema y construcción del dataset 4

5.3 Almacenamiento 4

5.4 Automatización 4

6 ENFOQUE DE MACHINE LEARNING 5

7 RESULTADOS PRELIMINARES 5

8 PRÓXIMOS PASOS 5

9 CONSULTAS 5

INTRODUCCIÓN

El presente trabajo se enfoca en el desarrollo de un modelo de Machine Learning (ML) para predecir la distribución de temperaturas en una chapa cuadrada sometida a diversas condiciones de borde (temperatura - flujo) y un punto caliente específico, utilizando simulaciones numéricas generadas por diferencias finitas como “dataset” de entrenamiento.

Este informe presenta una primera aproximación al problema, describiendo el método de generación de datos, el planteo inicial del problema físico, las variables de entrada consideradas y la configuración preliminar del modelo de ML propuesto. Asimismo, se exponen los primeros resultados obtenidos y se detallan los pasos a seguir, junto con las consultas necesarias, para consolidar el modelo de ML en este caso de estudio.

OBJETIVOS DEL PRESENTE AVANCE

Este primer avance tiene como propósito confirmar la viabilidad del enfoque propuesto y establecer las bases para el desarrollo del modelo de ML. Para ello, se plantean los siguientes objetivos específicos:

* Generar y validar un dataset de entrenamiento, asegurando que las condiciones de borde, el punto caliente y las simulaciones por diferencias finitas reflejen adecuadamente el comportamiento térmico de la chapa.
* Implementar un modelo preliminar de ML y ajustar su arquitectura y parámetros de entrenamiento, con el objetivo de obtener predicciones de temperatura con un error controlado.
* Evaluar el desempeño del modelo, analizando la función de pérdida, tiempos de entrenamiento y resultados en casos de prueba.
* Detectar posibles limitaciones del procedimiento actual y proponer mejoras, ya sea en la diversidad del dataset, en la estructura de la red o en las métricas de evaluación.
* Definir próximos pasos y aspectos a consultar, priorizando estrategias para la escalabilidad, optimización y validación del modelo en vistas a su futura aplicación.

DESCRIPCIÓN DEL PROBLEMA FÍSICO

El problema físico consiste en determinar la distribución de temperaturas en una chapa cuadrada de dimensiones conocidas, sometida a condiciones de borde fijas y la presencia de un punto caliente en una posición específica.

Se consideran las siguientes condiciones de borde:

* Temperatura fija (Dirichlet)
* Flujo de calor fijo (Neumann)
* Combinaciones de estas condiciones según cada caso de simulación.

Además, se incluye un punto caliente (que actúa como una fuente de calor puntual) con coordenadas y valor de temperatura asignado, con el objetivo de evaluar su influencia sobre el campo de temperaturas.

El comportamiento térmico de la chapa se modela utilizando la ecuación de conducción de calor en estado estacionario en dos dimensiones:

La resolución se realiza mediante el método de diferencias finitas, discretizando la chapa en una malla de nodos con pasos y determinados según las dimensiones y la resolución buscada.

La resolución del sistema resulta en un conjunto de ecuaciones lineales de la forma donde representa la temperatura en cada nodo de la malla

Los parámetros físicos considerados incluyen:

* Conductividad térmica (k) de la chapa asumida constante.
* Espaciamiento de malla ( y )
* Valores y tipos de condiciones de contorno.
* Posición y temperatura del punto caliente.

## Estructura de archivos del proyecto

(REESCRIBIR)

(Se tienen todas las funciones utilizadas en el modelo)

(Se tienen las funciones que resuelven el sistema – Versión original resuelta en clase y la versión modificada)

(Se tienen las funciones para la generación aleatoria de las variables de entrada del modelo)

(Se tienen las funciones auxiliares para graficar y comparar los resultados)

(Testeo inicial de las funciones que resuelven el sistema)

(Testeo de las funciones generadoras de las variables)

(Notebook donde se genera el “dataset” de entrenamiento)

(Notebook de la primera aproximación del modelo ML)

(Dataset de 1 dato)

(Dataset de 10 datos)

(Dataset de 100 datos)

(Dataset de 1000 datos)

(Lista de coeficientes k y punto de fusión para distintos materiales -89-)

(IDEM anterior)

(Informe de la primera aproximación)

(1° Modelo de ML)

(2° Modelo de ML)

GENERACIÓN DE DATASET

Para el entrenamiento del modelo de ML se generó un conjunto de datos mediante simulaciones numéricas resueltas con diferencias finitas, utilizando la función previamente desarrollada.

El procedimiento de generación del dataset se estructuró de la siguiente manera:

## Generación de condiciones de borde y punto caliente

Se implementó una función que genera de forma aleatoria:

* **Condiciones de contorno en cada borde (A, B, C, D)**, seleccionando aleatoriamente si la condición es de **temperatura** o **flujo**, y asignando un valor dentro de un rango físico coherente:
  + **Temperatura:** desde hasta del material seleccionado.
  + **Flujo:** entre .
* **Punto caliente:** asignando una posición aleatoria dentro de la malla y una temperatura aleatoria dentro del rango del material.
* **Material y conductividad térmica:** se selecciona aleatoriamente un material desde una base de datos (materiales.csv) y se toma la conductividad térmica y la temperatura de fusión para ajustar los rangos de simulación.

## Resolución del problema y construcción del dataset

Para cada muestra:

1. Se generan condiciones de borde, el punto caliente y el material (variables móviles).
2. Se resuelve el problema estacionario de conducción de calor en la chapa con usando estas condiciones.
3. Se construye el vector de entrada (X) con las variables móviles
4. Se construye el vector de salida (Y) con la distribución de temperaturas
5. Se registra la información de cada simulación en un archivo de registro (dataset\_variables.csv).

## Almacenamiento

Los datos generados se almacenan en:

* : entradas del modelo
* : salidas del modelo
* : tabla de registro de todas las combinaciones de materiales, condiciones de contorno y punto caliente utilizadas.

## Automatización

El proceso de generación se automatizó mediante la función:

que permite definir:

* El número de muestras a generar.
* El tamaño de malla de la chapa ().
* Los pasos espaciales ().
* La carpeta de guardado.

(SE INCORPORARON MODIFICACIOES PARA LA DISIBUCION DE DATOS DE ENTRENAMIENTO Y VALIDACION – REESCRIBIR)

ENFOQUE DE MACHINE LEARNING

Esta sección se encuentra

## Preparación del dataset

Para el entrenamiento se utilizó el dataset previamente generado y almacenado en formato :

* : Variables de entrada, incluyendo conductividad térmica, condiciones de contorno y características del punto caliente.
* : Distribución de temperaturas de la chapa, vectorizada.

Se implementó una clase PlacaDataset para cargar el dataset en PyTorch de manera ordenada.

## Definición del modelo

Se utilizó una red neuronal feedforward (MLP, Multi-Layer Perceptron) para el problema de regresión, con la siguiente estructura:

* Entrada de dimensión igual al número de variables del dataset ( en el esquema actual).
* Tres capas ocultas con:
  + 128 neuronas + ReLU[[1]](#footnote-2)
  + 256 neuronas + ReLU
  + 512 neuronas + ReLU
* Capa de salida con dimensión igual al número de nodos de la chapa ().

## Configuración de entrenamiento

Se utilizó:

* Función de pérdida: Error cuadrático medio (MSELoss)
* Optimizador: Adam con tasa de aprendizaje de
* Batch size: 16.
* Número de épocas: 1000

(Esta es la parte que tengo menos desarrollada, estoy tratando de entender las diferentes variables que se pueden modificar para definir el modelo)

RESULTADOS PRELIMINARES

|  |  |
| --- | --- |
| Gráfico  El contenido generado por IA puede ser incorrecto.  (a) | Gráfico, Gráfico de líneas  El contenido generado por IA puede ser incorrecto.  (b) |

***Figura 1:*** Curva de la función de perdida definida para el modelo. (a) Para un dataset de 1000 muestras; (b) Para un dataset de 5000 muestras

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

***Figura 2:*** Curva de la función de perdida definida para el modelo para un eproch = 100. (a) Para lr=1e-3; (b) lr=1e-4

|  |  |
| --- | --- |
| (a) |  |

Figura : Curva de perdida - 50 muestras. (a) Datos no normalizados; (b) Datos de entrada (X) normalizados

|  |  |
| --- | --- |
| Gráfico  El contenido generado por IA puede ser incorrecto.  (a) | (b) |

***Figura 2:*** Curva de perdida con datos X e Y normalizados – Para 50 muestras -. (a) Con Ir = 1e-4; (b) Con Ir =1e-5

PRÓXIMOS PASOS

Ampliar el dataset con más variabilidad (En proceso…).

Ajuste de arquitectura y regularización para mejorar generalización (Buscar ejemplos …)

Incorporación de nuevas variables si corresponde (Dificil … ).

Evaluar el uso en GPU y escalado de la simulación (Preguntar …)

CONSULTAS

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Gráfico  El contenido generado por IA puede ser incorrecto. | | | | | |
| Imagen que contiene Gráfico  El contenido generado por IA puede ser incorrecto. | | | | | |
|  |  | | | | |
| Tabla  El contenido generado por IA puede ser incorrecto. | | Gráfico, Diagrama  El contenido generado por IA puede ser incorrecto. | | |
| Tabla  El contenido generado por IA puede ser incorrecto. | | | Gráfico  El contenido generado por IA puede ser incorrecto. |

(Se observo como ciertos valores de k de algunos materiales modificaban significativamente las distribuciones de temperatura – Se evaluó en un principio quitar estos materiales)

Gráfico, Histograma

El contenido generado por IA puede ser incorrecto.

***Figura 3:*** Histograma para valores de flujo entre (-10000 y 10000) – Se retiro el Selenium

|  |  |
| --- | --- |
| Imagen que contiene Gráfico  El contenido generado por IA puede ser incorrecto.  (a) | Gráfico  El contenido generado por IA puede ser incorrecto.  (b) |

Gráfico

El contenido generado por IA puede ser incorrecto.

***Figura 4:*** Histograma para valores de flujo entre (-10000 y 10000) – Se retiro el Bismuth

Al ver que todavía se mantenía una dispersión apreciable, se modificaron los rangos de flujo que podía tomar las distintas condiciones de contorno.

Gráfico, Histograma

El contenido generado por IA puede ser incorrecto.

***Figura 5:*** Histograma para valores de flujo entre (-5000 y 5000) – Se retiro el Bismuth

Se concluyo que no valía la pena modificar los rangos, pues los cambios no eran significativos. Se analizo la física del problema y se observo que había que incorporar un filtro a las muestras que se generaban para eliminar aquellas que no tenían sentido físico.

Se reestableció la lista de materiales original y se modificaron las funciones que generaban los datos.

Gráfico, Histograma

El contenido generado por IA puede ser incorrecto.

***Figura 6:*** Histograma para valores de flujo entre (-10000 y 10000) para 100 muestras. Se incorporo un filtro de datos para las muestras del dataset, se analiza la distribución de temperatura de cada muestra y se filtran aquellas que:

Gráfico, Histograma

El contenido generado por IA puede ser incorrecto.

***Figura 7:*** Histograma para valores de flujo entre (-10000 y 10000) para 5000 muestras. Se incorporo un filtro de datos para las muestras del dataset, se analiza la distribución de temperatura de cada muestra y se filtran aquellas que:

Gráfico, Histograma

El contenido generado por IA puede ser incorrecto.

***Figura 8:*** Histograma para valores de flujo entre (-10000 y 10000) para 5000 muestras. Se incorporo un filtro de datos para las muestras del dataset, se analiza la distribución de temperatura de cada muestra y se filtran aquellas que:

**ULTIMO AVANCE (14:42 – 03/07/2025)**

|  |
| --- |
| Gráfico, Histograma  El contenido generado por IA puede ser incorrecto. |
| Gráfico  El contenido generado por IA puede ser incorrecto. |
|  |

|  |
| --- |
|  |
|  |
|  |

1. Introduce no linealidad entre capas: [↑](#footnote-ref-2)