

УДК 519.626

## ОБ ОДНОМ ПОДХОДЕ К ЧИСЛЕННОМУ РЕШЕНИЮ ОБРАТНОЙ КОЭФФИЦИЕНТНОЙ ЗАДАЧИ

© 2021 г. А. Ф. Албу<sup>1,\*</sup>, академик РАН Ю. Г. Евтушенко<sup>1,\*\*</sup>, В. И. Зубов<sup>1,\*\*\*</sup>

Поступило 02.04.2021 г.  
После доработки 02.04.2021 г.  
Принято к публикации 08.06.2021 г.

Предложен алгоритм решения задачи определения коэффициента теплопроводности вещества по результатам наблюдения за динамикой температурного поля. Эффективность предлагаемого подхода базируется на применении современной методологии быстрого автоматического дифференцирования. Искомый коэффициент теплопроводности определяется из решения сформулированной в работе задачи оптимального управления.

*Ключевые слова:* обратные коэффициентные задачи, нелинейные задачи, уравнение теплопроводности, оптимальное управление, численные методы оптимизации, быстрое автоматическое дифференцирование

DOI: 10.31857/S2686954321040020

### 1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

При экспериментальном исследовании тепловых процессов нередко возникают ситуации, когда невозможно определить требуемую физическую величину путем проведения прямых измерений. В таких случаях прибегают к решению обратных задач, и интересующие характеристики восстанавливаются по результатам косвенных измерений [1, 2].

Рассматриваемая в работе обратная задача посвящена определению зависящего от температуры коэффициента теплопроводности вещества по результатам экспериментального наблюдения за динамикой температурного поля в объекте и (или) теплового потока на поверхности объекта. Предложен новый эффективный алгоритм решения этой обратной задачи, одним из важных элементов которого является методология быстрого автоматического дифференцирования (БАД-методология).

Рассматривается область  $Q \subset R^n$  с кусочно-гладкой границей  $S$ , заполненная исследуемым веществом. Динамика температурного поля в ве-

ществе описывается решением следующей начально-краевой задачи:

$$C(x) \frac{\partial T}{\partial t} = \operatorname{div}(K(T) \nabla_x T), \quad x \in Q, \quad (1)$$

$$T(x, 0) = w_0(x), \quad x \in Q, \quad (2)$$

$$T(x, t) = w_S(x, t), \quad x \in S, \quad 0 \leq t \leq \Theta. \quad (3)$$

Здесь  $x = (x_1, \dots, x_n)$  – декартовы координаты;  $t$  – время;  $T(x, t)$  – температура вещества в точке с координатами  $x$  в момент времени  $t$ ;  $C(x)$  – объемная теплоемкость вещества;  $K(T)$  – коэффициент теплопроводности;  $w_0(x)$  – заданная температура вещества в начальный момент времени  $t = 0$ ;  $w_S(x, t)$  – заданная температура на границе области. Объемная теплоемкость  $C(x)$  считается известной функцией координат.

Если коэффициент теплопроводности  $K(T)$  известен, то, решив прямую задачу (1)–(3), найдем распределение температуры  $T(x, t)$  в  $Q \times (0, \Theta]$ . Если же функция  $K(T)$  неизвестна, то ее определение представляет большой интерес. Обратная коэффициентная задача сводится к следующей вариационной задаче: требуется найти такую зависимость коэффициента теплопроводности вещества  $K(T)$  от температуры  $T$ , при которой температурное поле  $T(x, t)$  и потоки тепла  $\left(-K(T(x, t)) \frac{\partial T(x, t)}{\partial \bar{n}}\right)$  на границе объекта, полученные в результате решения прямой задачи (1)–(3), мало отличаются от температурного поля  $Y(x, t)$  и потока тепла  $P(x, t)$ ,

<sup>1</sup> Федеральный исследовательский центр  
“Информатика и управление”  
Российской академии наук, Москва, Россия

\*E-mail: alla.albu@yandex.ru

\*\*E-mail: yuri-evtushenko@yandex.ru

\*\*\*E-mail: vladimir.zubov@mail.ru

полученных экспериментально. Мерой отклонения этих функций может служить величина

$$\begin{aligned} \Phi(K) = & \int_0^\Theta \int_Q [T(x,t) - Y(x,t)]^2 \cdot \mu(x,t) dxdt + \\ & + \int_0^\Theta \int_S \beta(x,t) \cdot \left[ -K(T(x,t)) \frac{\partial T(x,t)}{\partial n} - P(x,t) \right]^2 dSdt + \\ & + \varepsilon \int_a^b (K(T))^2 dT, \end{aligned} \quad (4)$$

где  $\mu(x,t) \geq 0$ ,  $\beta(x,t) \geq 0$  и  $\varepsilon \geq 0$  – заданные весовые параметры;  $Y(x,t)$  – заданное температурное поле;  $P(x,t)$  – заданный тепловой поток на границе  $S$  области  $Q$ ,  $\frac{\partial T}{\partial n}$  – производная температуры по направлению внешней нормали к границе  $S$  области  $Q$ .

## 2. АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ОПТИМАЛЬНОГО УПРАВЛЕНИЯ

Подобные задачи оптимального управления обычно решаются численно с помощью некоторого метода спуска, который требует знания градиента функционала. При этом крайне важно определять точное значение этого градиента. Было получено аналитическое выражение градиента целевого функционала для сформулированной здесь задачи в  $n$ -мерной постановке. Однако использовать это аналитическое выражение при численном решении задачи практически невозможно в силу его сложности. В предлагаемом алгоритме для вычисления градиента функционала использовалась эффективная БАД-методология. Эффективность этой методологии обеспечивается использованием решения сопряженной задачи. Основным достоинством БАД-методологии является автоматическое построение такой аппроксимации сопряженной задачи, которая согласованна с выбранной аппроксимацией прямой задачи.

Важным элементом алгоритма решения обратной коэффициентной задачи является решение прямой задачи (1)–(3). От эффективности ее решения зависит эффективность решения обратной задачи в целом. Для аппроксимации уравнения теплопроводности в одномерном случае применялась двухслойная неявная схема с весами.

При использовании БАД-методологии аппроксимация сопряженной задачи однозначно определяется выбором аппроксимации прямой задачи, и при переходе от одномерного случая к многомерному влияние этого выбора становится более весомым. Так, если начально-краевая задача в двумерном случае аппроксимируется неявной схемой с весами, аппроксимация сопряжен-

ной задачи будет представлять собой линейную систему алгебраических уравнений, для разрешения которой (в силу двумерности по пространству) также требуется строить итерационный процесс. Поэтому для решения прямой задачи в многомерном случае рекомендуется использовать схемы переменных направлений [3, 4]. При дискретизации двумерной начально-краевой задачи была выбрана безусловно устойчивая ( $n = 2$ ) схема Писмена–Рекфорда [5].

Алгоритм решения прямой задачи в трехмерном случае заметно усложняется и требует больших затрат машинного времени. В [6] на примере ряда нелинейных задач для трехмерного уравнения теплопроводности проводится сравнительный анализ нескольких схем переменных направлений. При сравнении методов принимались во внимание точность получаемого решения и время достижения требуемой точности.

Сопряженные уравнения и формула для вычисления градиента целевого функционала, использовавшиеся при решении обратной задачи в трехмерном случае, получены для случая работы с локально-одномерной схемой. Для других схем эти формулы можно получить аналогичным образом.

Для численного решения задачи вводилась временная и пространственная сетки. В каждом сеточном узле расчетной области  $\bar{Q} \times [0, \Theta]$  все функции определялись своими точечными значениями. Отрезок  $[a, b]$ , на котором идентифицировалась функция  $K(T)$ , определялся как множество значений заданных функций  $w_0(x)$  и  $w_S(x,t)$ . Этот отрезок разбивался точками  $\tilde{T}_0 = a$ ,  $\tilde{T}_1$ ,  $\tilde{T}_2, \dots, \tilde{T}_M = b$  на  $M$  частей. Каждой из точек  $\tilde{T}_m$  ( $m = 0, \dots, M$ ) ставилось в соответствие число  $k_m = K(\tilde{T}_m)$ . Искомая функция  $K(T)$  аппроксимировалась непрерывной кусочно-линейной функцией с узлами в точках  $\{(\tilde{T}_m, k_m)\}_{m=0}^M$ , так что

$$K(T) = k_{m-1} + \frac{k_m - k_{m-1}}{\tilde{T}_m - \tilde{T}_{m-1}} (T - \tilde{T}_{m-1})$$

при  $\tilde{T}_{m-1} \leq T \leq \tilde{T}_m$  ( $m = 1, \dots, M$ ).

Целевой функционал (4) аппроксимировался функцией  $F(k_0, k_1, \dots, k_N)$  конечного числа переменных с помощью метода прямоугольников. Минимизация этой функции проводилась численно с помощью градиентных методов. Использование БАД-методологии позволило добиться того, что градиент целевой функции в предложенном алгоритме вычислялся с машинной точностью, что увеличивало скорость минимизации функционала.

Проведенные численные эксперименты показали, что качество восстановления коэффициента теплопроводности сильно зависит от распределения “экспериментальных” данных. Бывают случаи,

когда на некоторых участках отрезка  $[a, b]$  слишком мало данных, необходимых для идентификации коэффициента теплопроводности. Для анализа распределения экспериментальных данных по интервалам отрезка температур  $[a, b]$  вводится функция  $W_*(T)$  – относительная мера той под-области области  $Q \times (0, \Theta)$ , температура в точках которой меньше  $T$ . При решении конкретных задач необходимо предварительно проанализировать плотность распределения функции  $W_*(T)$ .

Было выявлено, что коэффициент теплопроводности не идентифицируется регулярным способом для тех значений  $T$ , при которых плотность распределения экспериментальных данных мала. Для его определения в таких точках требуется проведение дополнительных исследований или введение дополнительных предположений.

Отметим также, что в многомерном случае градиент целевого функционала распределен по температуре сильно неравномерно. Это приводит к ухудшению сходимости итерационного процесса в целом. Для ускорения итерационного процесса предложен подход, основанный на последовательном увеличении числа  $M$  разбиений отрезка  $[a, b]$  [5]. Начинать процесс желательно с  $M = 1$ . Полученное решение следует использовать в качестве начального приближения для варианта с  $M = 2$  и т.д.

Задача оптимального управления (1)–(4) может быть рассмотрена в двух крайних постановках. Если в целевом функционале  $\beta(x, t) = 0$ , то в качестве экспериментальных данных в задаче выступает заданное температурное поле (функционал “поле”). Если в (4)  $\mu(x, t) = 0$ , то в качестве экспериментальных данных выступает заданный тепловой поток на поверхности рассматриваемого объекта (функционал “поток”).

При исследовании обратной задачи с  $\beta(x, t) = 0$  (функционал “поле”) большое внимание уделялось практически важному случаю, когда температурное поле задано только в части рассматриваемого объекта. Анализ результатов решения большого числа обратных коэффициентных задач показал, что при использовании функционала “поле” обратная задача может иметь неединственное решение. Будет решение обратной задачи единственным или нет – существенно зависит от заданного экспериментального поля  $Y(x, t)$ . Ответ на вопрос, в каких случаях возможно появление неединственности решения сформулированной обратной коэффициентной задачи, может дать следующее утверждение.

**Л е м м а.** Пусть функция  $Y(x, t) \in C_{x,t}^{2,1}(G) \cap C^1(\bar{G})$  является решением прямой задачи (1)–(3) при двух допустимых коэффициентах теплопроводности  $K_1(T) \in C^1([a, b])$  и  $K_2(T) \in C^1([a, b])$ ,  $T \in [a, b]$ . Тогда

а) найдется функция  $R(T) \in C([a, b])$  такая, что

$$\Delta_x Y(x, t) = R(Y(x, t)) \cdot |\nabla_x Y(x, t)|^2,$$

б) при такой функции  $Y(x, t)$  решений  $K(T)$  обратной задачи бесконечно много.

Доказательство этого утверждения в  $n$ -мерном случае аналогично тому, которое приводится в [5] для двумерного случая.

В этом случае рекомендуется решать задачу идентификации коэффициента теплопроводности несколько раз, выбирая в качестве начального приближения каждый раз новую функцию. Если при этом получается одно и то же решение задачи оптимального управления, то его можно считать решением задачи идентификации. Если же решение задачи будет зависеть от выбора начального приближения, то необходимо задать дополнительное условие, например, задавать точку, в которой искомый коэффициент теплопроводности известен.

Необходимо отметить, что при исследовании большого числа задач с функционалом “поток” никогда не приходилось сталкиваться с неединственностью решения.

Известно, что в окрестности решения градиентные методы сходятся довольно медленно. Поэтому в работе исследовалась возможность применения оптимизационных методов второго порядка сходимости для решения рассматриваемой обратной коэффициентной задачи.

Так как рассматриваемый в работе функционал имеет квадратичный вид, то наиболее подходящим оптимизационным методом второго порядка сходимости в этом случае представляется метод Левенберга–Марквардта. При использовании этого метода вводится дополнительная вектор-функция  $\bar{U} = \{U_d\}_{d=1}^D$  ( $D$  – количество квадратичных слагаемых в функционале), элементы которой – квадратный корень каждого слагаемого целевого функционала. Далее строится матрица Якоби  $\Omega = \{\Omega_{dm}\}$  вектор-функции  $\bar{U}$ . Каждая  $d$ -я строка матрицы  $\Omega$  – это градиент функции  $U_d$  относительно компонент вектора управления  $k_0, k_1, \dots, k_M$ .

Точность вычисления элементов матрицы типа Якоби оказывает заметное влияние на сходимость метода Левенберга–Марквардта. Существенным в предлагаемом подходе является то, что элементы матрицы типа Якоби вычисляются с машинной точностью благодаря использованию БАД-методологии.

Согласно алгоритму Левенберга–Марквардта вектор управления  $\mathbf{k} = \{k_m\}_{m=0}^M$  меняется на каждой последующей итерации  $(s + 1)$  по формуле:  $\mathbf{k}_{s+1} = \mathbf{k}_s + \mathbf{r}_s$ . Направление спуска  $\mathbf{r}_s$  определяет-

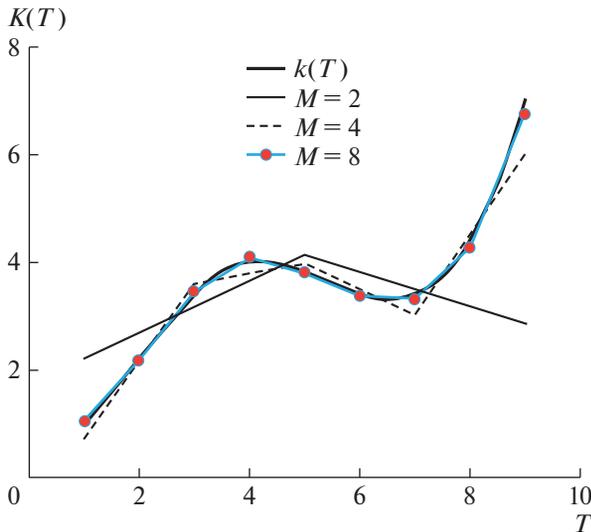


Рис. 1. Пример построения решения задачи идентификации.

ся как решение следующей системы линейных алгебраических уравнений:

$$[\Omega^T(\mathbf{k}_s)\Omega(\mathbf{k}_s) + \lambda_s \text{diag}(\Omega^T(\mathbf{k}_s)\Omega(\mathbf{k}_s))] \mathbf{r}_s = -\Omega^T(\mathbf{k}_s)\bar{\mathbf{U}}(\mathbf{k}_s).$$

На основании проведенных исследований предлагается рассчитывать константы  $\lambda_s$  для рассматриваемой обратной задачи по формуле

$$\lambda_s = \alpha \cdot \max_{0 \leq m \leq M} (\text{diag}(\Omega^T(\mathbf{k}_s)\Omega(\mathbf{k}_s))),$$

где  $\alpha > 0$  – некоторая константа, зависящая от задачи.

Для проверки работоспособности и эффективности предложенного алгоритма было решено большое количество тестовых задач. Во всех рассмотренных случаях коэффициент теплопроводности восстанавливался с высокой точностью.

В качестве примера приведем задачу определения коэффициента теплопроводности вещества при следующих входных данных: в качестве начальной функции  $w_0(x, y, z)$  и граничной функции  $w_T(x, y, z, t)$  выбраны следы функции  $\Lambda(x, y, z, t) = \sqrt{\frac{9 \cdot (x+1)^2 + 20y^2 + 25z^2}{9-8t}}$  на параболической границе области  $Q \times (0, \Theta) = (0,1) \times (0,1) \times (0,1) \times (0, 1)$ . Анализ входных данных позволил определить диапазон изменения температуры:  $a = 1, b = 9$ . В качестве “экспериментальных” данных использовался поток тепла, вычисленный по температурному полю, полученному в результате решения прямой задачи (1)–(3)

при  $C(x) = 1$  и с коэффициентом теплопроводности:

$$k(T) = \begin{cases} 0.1 \cdot (T-3) \cdot (T-6) \cdot (T-7) + 3.4, & T \geq 3, \\ 1.2 \cdot (T-3) + 3.4, & T < 3. \end{cases}$$

Анализ распределения “экспериментальных” данных показал, что на правом конце отрезка  $[1.0, 9.0]$  практически нет “экспериментальных” данных. Проведенные расчеты показали, что при равномерном разбиении отрезка температур на  $M = 64$  интервала последняя компонента вектора градиента равнялась нулю с машинной точностью, т.е. коэффициент теплопроводности можно идентифицировать лишь на отрезке  $[1.0, 8.875]$ .

Процесс построения решения задачи идентификации проиллюстрирован на рис. 1. Там представлены функция  $k(T)$  и оптимальные управления, полученные при  $M = 2, 4, 8$ . Видно, что опорные точки кусочно-линейного оптимального управления, полученного при  $M = 8$ , почти лежат на “теоретической” линии  $K(T) = k(T)$ .

График оптимального управления, полученного при  $M = 64$ , совпадает с графиком функции  $k(T)$ . Максимальное отклонение рассчитанного коэффициента теплопроводности  $K_{opt}(T)$  от его аналитического значения  $K(T) = k(T)$  на отрезке  $[1.0, 8.875]$  составляет  $1.3914 \times 10^{-7}$ .

Для всех рассмотренных примеров было проведено численное исследование устойчивости получаемых решений. “Экспериментальные” данные возмущались с помощью генератора случайных чисел. Необходимо отметить, что использование небольшого количества разбиений отрезка температур ( $M \leq 15$ ) действует как сглаживающий фактор при решении задачи. При умеренном возмущении “экспериментальных” данных осцилляции в решении задачи появляются, когда отрезок температур разбивается на большое количество интервалов ( $M \geq 20$ ).

Анализ проведенных исследований показал, что возмущения в решениях задач, полученные с помощью предложенного алгоритма, имеют тот же порядок, что и вызвавшие их возмущения в экспериментальных данных. При малых возмущениях в экспериментальных данных (до 10%) осцилляции в решениях задач практически незаметны даже при большом количестве  $M$  разбиений отрезка температур.

При умеренных возмущениях в экспериментальных данных (10–25%) необходимо решать оптимизационную задачу с функционалом, в котором присутствует регуляризатор, т.е. в целевом функционале параметр  $\epsilon > 0$ .

#### ИСТОЧНИК ФИНАНСИРОВАНИЯ

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект 21-71-30005).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Алифанов О.М. Обратные задачи теплообмена. М.: Машиностроение, 1988. 279 с.
2. Кабанихин С.И. Обратные и некорректные задачи. Новосибирск: Сиб. науч. изд-во, 2009. 457 с.
3. Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Вычислительная теплопередача. М.: Едиториал УРСС, 2003. 784 с.
4. Ch. Gao, Y. Wang. A general formulation of Peaceman and Rachford ADI method for the N-dimensional heat diffusion equation // Int. Comm. Heat Mass Transfer. 1996. V. 23. № 6. P. 845–854.
5. Албу А.Ф., Zubov В.И. О восстановлении коэффициента теплопроводности вещества по температурному полю // ЖВМиМФ. 2018. Т. 58. № 10. С. 1642–1657.
6. Албу А.Ф., Евтушенко Ю.Г., Zubov В.И. О выборе разностных схем при решении обратных коэффициентных задач // ЖВМиМФ. 2020. Т. 60. № 10. С. 1643–1655.

## ON ONE APPROACH TO THE NUMERICAL SOLUTION OF THE INVERSE COEFFICIENT PROBLEM

**A. F. Albu<sup>a</sup>, Academician of the RAS Yu. G. Evtushenko<sup>a</sup>, and V. I. Zubov<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> *Federal Research Center “Computer Science and Control” of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation*

An approach to solving the problem of determining the thermal conductivity coefficient of a substance based on the results of observing the dynamics of the temperature field is proposed. The effectiveness of the proposed approach is based on the application of the modern Fast Automatic Differentiation methodology. The required thermal conductivity coefficient is determined from the solution of the formulated optimal control problem.

*Keywords:* Inverse coefficient problems, nonlinear problems, heat conduction equation, optimal control, numerical optimization methods, Fast Automatic Differentiation