УДК 681.3.012:621.1

Швачич Г. Г.

ЭКСТРЕМАЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ РЕШЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТНЫХ ЗАДАЧ ВЫСОКОГО ПОРЯДКА ТОЧНОСТИ

Для исследования теплофизических свойств материалов обратными методами выведен соответствующий класс математических моделей. Процедура обработки математических моделей сведена к экстремальной постановке, что позволило разработать эффективные алгоритмы решений коэффициентных задач произвольного порядка точности. Приводятся результаты решения тестовых задач на основе предложенного подхода.

Ключевые слова: *коэффициентные задачи, экстремальная постановка, математические модели, теплопроводность, перенос тепла.*

1. Введение

При анализе переноса тепла за счет теплопроводности точность результатов решения той или иной задачи может сильно пострадать из-за недостаточности сведений о теплофизических характеристиках системы. По этой причине важно отчетливо представлять себе физический смысл и ход изменения этих характеристик от температуры, методы, при помощи которых они экспериментально определяются, и те ограничения, которым эти изменения подвержены [1—3]. К основным теплофизическим характеристикам материалов, определяющим условия их тепловой обработки, относятся энтальпия, теплоемкость и коэффициенты тепло- и температуропроводности. Эти параметры входят в уравнение теплопроводности и определяют температурное поле внутри вещества. Теплофизические характеристики вещества зависят от большого количества факторов, поэтому эксперимент является единственным источником получения этих характеристик [3]. Однако, с появлением и развитием нового направления, получившего название обратных задач теплопроводности (ОЗТ), становится возможным не только исследование формы и содержания математических моделей, отражающих феноменологическое описание процессов, но и значительное повышение информативности теплового эксперимента.

2. Анализ литературных данных и постановка проблемы

Актуальность проблемы разработки численных методов для решения многомерных систем параболических квазилинейных уравнений, описывающих процессы тепло- и массообмена, можно считать не вызывающей сомнений. Одним из наиболее интересных примеров таких систем могут служить уравнения гидродинамики и металлургической теплофизики [4, 5]. О массовом решении нестационарных задач высокого порядка точности на нынешнем уровне технической возможности и на базе традиционных методов, разработанных к настоящему времени, по-видимому, можно говорить, только учитывая следующие обстоятельства.

Во-первых, появление новых и недорогих средств коммуникации вычислительной техники стимулировало развитие новых информационных технологий: структурного программирования, сетевых операционных систем, объектно-ориентированного программирования, систем параллельной обработки информации и т. д. Организация параллельной обработки информационных потоков, связь проблем распараллеливания с архитектурой ПЭВМ, системы параллельного программирования, методы и алгоритмы параллельных вычислений — вот ключевые темы развития вычислительной техники на данном этапе [1, 6, 7].

Во-вторых, к настоящему времени наметились определенные тенденции по развитию вычислительных методов со сложной логической структурой, имеющих по сравнению с традиционными конечно-разностными методами более высокий порядок точности [8—10]. Серьезным прогрессом в области решения многомерных пространственных задач можно считать ряд предложений, не совсем эквивалентных друг другу, но преследующих одну стереотипную цель — свести задачу трехмерного распределения области изменения переменных к последовательности схем, включающих неизвестные величины лишь в одном направлении — попеременно в продольном, поперечном и вертикальном. Достаточно подробная библиография этих работ представлена в [8, 9]. Заметим, что использование при этом неявных схем приводит к системам линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), имеющих трехдиагональную структуру [9]. Таким образом, принятие в качестве методологической основы разностных схем расщепления, во-первых — обеспечивает экономичную и устойчивую реализацию численных моделей методом скалярных прогонок. И, во-вторых, известно, что наибольший эффект от параллельного процессора достигается в тех случаях, когда он применяется для выполнения матричных вычислений линейной алгебры.

В данной работе идентификация процессов теплопроводности рассматривается на примере решения уравнений теплопроводности в декартовой системе координат для области $y \in [y_o, yL]$, $t \in [0, \infty)$. Очевидно, что при заданных входных данных решение этой задачи достаточно просто реализуется конечно-разностными методами. Используя неявные схемы по времени и центральные разности по пространственной переменной, получим систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) трехдиагональной структуры. Используя метод прогонки, построим экономичную разностную схему решения прямой задачи. Из анализа этой алгебраической ММ следует, что для сеточной области определения искомой функции y_p, $p=1,2,3,\ ...,\ 2m,\ m\in Z$ в каждом y_p-м сеточном узле в коэффициенты СЛАУ входят дискретные значения $\lambda_{p,1}$, $C\nu_{p,1}$. Как видно, число неизвестных $\lambda_{p,1}$, $C\nu_{p,1}$ в два раза больше числа сеточных уравнений. Такая незамкнутая СЛАУ при известных значениях температуры в узлах сетки по пространственной переменной может иметь бесконечное множество решений относительно неизвестных $\lambda_{p,1}$, $C\nu_{p,1}$. Следовательно, чисто формальный подход не позволяет сформулировать решение коэффициентных ОЗТ в рассматриваемой постановке.

3. Цель и задачи исследования

Цель исследований состоит в том, чтобы для исследования теплофизических свойств материалов обратными методами вывести соответствующий класс температурных и градиентных математических моделей (ММ). Основная задача исследований состоит в том, чтобы процедуру обработки ММ как управляемых по входным параметрам свести, на основе принципа невязки, к экстремальной постановке. Такой подход позволяет разработать эффективные алгоритмы решений коэффициентных задач на ММ произвольного порядка точности с адаптацией по временным режимам теплофизического эксперимента.

В дальнейшем будем считать, что одномерная постановка задач теплопроводности является основной расчетной математической моделью, для которой должны быть построены эффективные решения ОЗТ и алгоритмы обработки экспериментальных данных с целью определения теплофизических характеристик материала.

4. Формирование и анализ математических моделей определения теплофизических свойств материалов

Решение поставленной задачи можно получить в том случае, если искомые температурные зависимости $\lambda(T)$, $C_v(T)$ локализовать в квадрантах в виде кусочно-постоянных зависимостей от температуры, как по пространственной переменной, так и по времени, а в качестве ММ сконструировать температурную и градиентную зависимости. Покажем, что для каждого такого пространственно-временного квадранта замкнутые решения исходной дифференциальной задачи достаточно эффективно строятся на решениях задачи Коши:

$$T_{p+\varepsilon_{X,1}}(\varepsilon_t,\varepsilon_y)= =\sum_{n=0}^{\infty}\left\{\frac{\varepsilon_y^{2n}}{(2n)!}\frac{1}{a_p^n}\frac{d^nT_{p,1}(\varepsilon_t)}{d\varepsilon_t^n}-\left(\frac{1}{\lambda_p}\right)\frac{\varepsilon_y^{2n+1}}{(2n+1)!}\frac{1}{a_p{}^n}\frac{d^nT_{p,2}(\varepsilon_t)}{d\varepsilon_t^n}\right\}, \quad (1)$$

где $p=\overline{1,2m-1}$ — номера сеточных узлов по пространственной области $y\in[y_0,y_L]$; $T_{p,1}(\varepsilon_t)$, $T_{p,2}(\varepsilon_t)$ — данные Коши (температурные и потоковые), заданные в узлах сеточной области при $\varepsilon_y=0$; a_p — обезразмеренный сеточный коэффициент температуропроводности $\left(a_p=\dfrac{\lambda_{p,1}}{CV_{p,1}}\dfrac{Dt1}{Dy1^2}\right)$. Пространственная и временная переменная в (1) нормированы зависимостями:

$$\left.\begin{aligned}\varepsilon_y&=\frac{y-y_p}{y_{p+1}-y_p}\in[-1,1]\\ \varepsilon_t&=\frac{t-t_{j-1}}{t_j-t_{j-1}}\in[0,1]\end{aligned}\right\}. \quad (2)$$

Для $p-x$ сеточных узлов, распределенных равномерно, решение задачи Коши позволяет построить замкнутые математические модели относительно неизвестных данных Коши в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений (СОДУ). Положив в (1) $\varepsilon_y=\pm1$ получим СОДУ N-го порядка:

$$\left.\begin{aligned}&\sum_{n=0}^{N}\frac{1/a_p^n}{(2n)!}T_{p,1}^{(n)}(\varepsilon_t)=\frac{1}{2}(T_{p+1,1}(\varepsilon_t)+T_{p-1,1}(\varepsilon_t))\\ &-\frac{1}{\lambda_p}\sum_{n=0}^{N}\frac{1/a_p^n}{(2n+1)!}T_{p,2}^{(n)}(\varepsilon_t)=\frac{1}{2}(T_{p+1,1}(\varepsilon_t)-T_{p-1,1}(\varepsilon_t))\end{aligned}\right\},\ N\in Z, \quad (3)$$

которые непрерывны во временной области. Например, при $N=1$ получим СОДУ первого порядка в форме Коши, где правые части предполагаются известными функциями времени. В этом случае решение целесообразно построить в кусочно-аналитическом виде:

$$\left.\begin{aligned}T_{p,1}(\varepsilon_t)&=T_{p,1}^*(\varepsilon_t)+(T_{p,1}(0)-T_{p,1}^*(0))\ell^{-2a_p\varepsilon_t}\\ T_{p,2}(\varepsilon_t)&=T_{p,2}^*(\varepsilon_t)+(T_{p,2}(0)-T_{p,2}^*(0))\ell^{-6a_p\xi_t}\end{aligned}\right\}, \quad (4)$$

где $\{T_{p,1}^*(\varepsilon_t),\ T_{p,2}^*(\varepsilon_t)\}$ — частные решения неоднородных уравнений, $\{T_{p,1}(\theta),\ T_{p,2}(\theta)\}$ — известные начальные данные. В более общем случае, для произвольного значения целочисленного параметра схем N, от дифференциальных уравнений (3) целесообразно перейти к нормальным СОДУ первого порядка, имеющих форму Коши. Таким образом, интегрирование уравнения в частных производных сведено нами к интегрированию СОДУ первого порядка в форме Коши, которые могут быть использованы при решении коэффициентных задач как управляемые ММ относительно коэффициентов тепло- и температуропроводности. Следует подчеркнуть также, что включение в ММ значения целочисленного параметра N как входной величины позволяет конструировать ММ с произвольным порядком точности и адаптацией по порядкам аппроксимации.

5. Сведение проблемы определения теплофизических свойств материалов к экстремальной постановке

Одним из перспективных направлений обработки задач теплообмена обратными методами является приведение их к экстремальным постановкам с использованием численных методов теории оптимизации. В точной экстремальной постановке определение параметров $\lambda_{p,1}$ и $C\nu_{p,1}$ на ММ (3) или (4) будет соответствовать минимизации невязок в виде функционалов:

$$\left.\begin{aligned}J_{p,1}(R)&=(T_{p,1}(\varepsilon_t,R)-f(\varepsilon_t,R))^2\\ J_{p,2}(R)&=(T_{p,2}(\varepsilon_t,R)-Q(\varepsilon_t,R))^2\end{aligned}\right\}, \quad (5)$$

где R — искомые параметры управления.

Величины $J_{p,1}$, $J_{p,2}$ в пространстве L_2 в такой постановке можно рассматривать как функции переменных R. Их числовое значение определяет расстояние в функциональном пространстве L_2 между заданными $f(\varepsilon_t, R)$, $Q(\varepsilon_t, R)$ величинами, известными из эксперимента и моделируемыми $T_{p,1}(\varepsilon_t, R)$, $T_{p,2}(\varepsilon_t, R)$ по управляемым ММ (3, 4).

В каждом конкретном случае можно с какой-то достоверностью на основе априорной информации описать некоторое допустимое множество входных параметров R. Тогда, если рассматривать ММ как управляемые, то параметры управления следует подобрать так, чтобы функционалы (5) были минимальны. Если допустимые интервалы изменения параметров управления покрыть сеточными узлами R_ν, то при заданных их значениях функционалы (5) могут быть вычислены. Таким образом, последовательность $\{J(R_\nu)\}$ будет минимизирующей, если предел $J(R_\nu)$, $\nu = 1,2,...$ позволяет определить его минимум. При этом в окрестности минимума значение функционала может быть представлено разложением в ряд Тейлора:

$$J_{v+\varepsilon_9 1}(q) = J_{\nu,1} + \varepsilon_R J_{\nu,2} + \varepsilon_R^2 J_{\nu,3} + ..., \qquad (6)$$

где $\varepsilon_q = \dfrac{R - R_\nu}{R_{\nu+1} - R_\nu}$ — нормированный аргумент функции; $J_{\nu,2}$, $J_{\nu,3}$... — тейлоровские компоненты первого и второго порядка.

Сохранив в разложении (6) три слагаемых и воспользовавшись центральными разностями для тейлоровских компонент $J_{\nu,2}$, $J_{\nu,3}$

$$\left.\begin{aligned} J_{\nu,2} &= \frac{1}{2}(J_{\nu+1,1} - J_{\nu-1,1}) \\ J_{\nu,3} &= \frac{1}{2}(J_{\nu+1,1} + J_{\nu-1,1} - 2J_{\nu,1}) \end{aligned}\right\}, \qquad (7)$$

после взятия производной и приравнивания ее значения нулю, возникает возможность построения интерполяционной формулы:

$$R = R_\nu - \left(\frac{1}{2}\right)(R_{\nu+1} - R_\nu)\frac{J_{\nu+1} - J_{\nu-1}}{J_{\nu+1} + J_{\nu-1} - 2J_\nu}, \qquad (8)$$

по которой можно организовывать итерационный цикл. Из данного алгоритма следует, что как только будет установлен отрезок отделения искомого параметра управления $\{R_{P+1}, R_{P-1}\}$, на котором невязка в функционале (5) изменяет знак, дальнейшее уточнение параметра управления при решении ОЗТ может быть уточнено рекуррентно по формуле (8) с любой наперед заданной точностью.

6. Экспериментальные данные и их обработка

Важным этапом исследований стала разработка пакета прикладных программ (ППП) для решения коэффициентных задач теплопроводности методами математического моделирования [10]. Создание пакета выполнено с учетом требований объектно-ориентированного программирования. Процедура моделирования была реализована на основе применения многопроцессорной вычислительной системы [11]. Пакет прикладных программ предназначен для обработки теплофизических экспериментов обратными методами. Основной целью, которая ставилась при его создании, было предоставление практической помощи исследователю на всех этапах обработки экспериментальных данных.

В данном разделе исследований рассматриваются дополнительные условия, которые позволяют разделить исследуемую задачу на две — температурную и потоковую. Первая из них дает возможность решать коэффициентные задачи во всем заданном диапазоне изменения температуры с параметром управления в виде коэффициента температуропроводности (модель 1), вторая — в виде коэффициентов теплопроводности или теплоемкости (модель 2). Такой подход отвечает классическим методам технической теплофизики. Исследование математических моделей 1 и 2 проведено с приложением метода прямых. При этом модель 1 (например, алгебраическая или функциональная) и модель 2 (градиентная) позволяют решать коэффициентную задачу в экстремальной постановке. В качестве тестовой задачи было предложено определение теплофизических свойств конкретного промышленного материала [3]. Исследовались свойства кокса, изготовленного из газового угля. Для этого моделировали температурное поле образца, имеющего форму цилиндра. При решении такой коэффициентной задачи применялись следующие исходные данные: коэффициент температуропроводности $a_0 = a$, $N = 5$. Результаты моделирования, выполненного средствами многопроцессорной вычислительной системы, представлены на рис. 1. Решение коэффициентной задачи проводилось с управлением относительно обезразмеренного коэффициента температуропроводности при $R = a/a_0$. Из анализа результатов моделирования (рис. 1) следует, что минимум невязки соответствует значению параметра $R \approx 1$. Точное же значение параметра управления $R = 1$. Для задачи теплопроводности по табличным данным $\lambda = 0{,}16$. Идентификация такого параметра отражена на рис. 2.

Разработанный алгоритм решения коэффициентной задачи можно считать удовлетворительным, поскольку его вариант с использованием точных входных данных абсолютно совпадает с точным результатом аналитического решения, а погрешности результатов расчета восстанавливаемых причинных характеристик, в которых учтена погрешность входных данных, приблизительно равняются погрешности выходных данных.

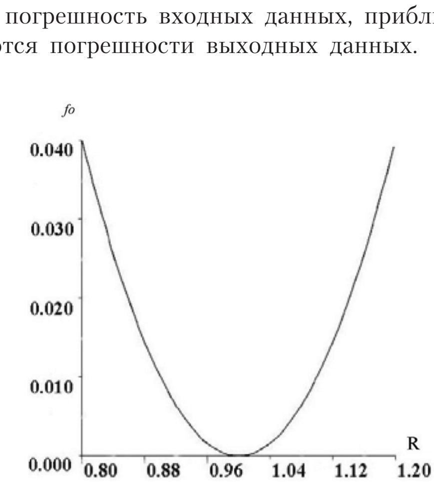

Рис. 1. График результатов расчета коэффициентной задачи при $R = a/a_0$ с параметром управления относительно коэффициента температуропроводности

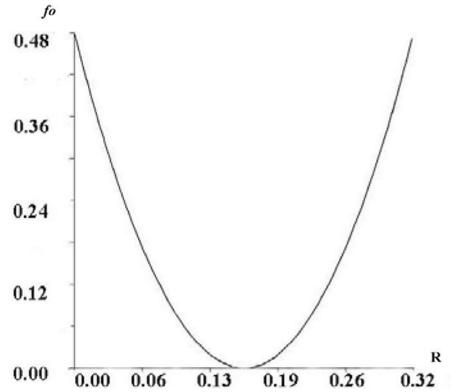

Рис. 2. График результатов расчета коэффициентной задачи при $R = \lambda$ с параметром управления относительно коэффициента теплопроводности

7. Выводы

Решение обратной коэффициентной задачи в предложенной постановке сводится к прямому определению последовательностей значений функционалов (5) на математических моделях (3) и вычислению в них минимальных носителей $J_{\min}$. Процедура определения $J_{\min}$ может быть реализована при помощи простой сортировки или по изменению знака $J^*(a)*J^*(b)$ на отрезке $R = a$, $R = b$, где для линейного значения функционала (5) $(a<b)$. Понятно, что $J^*(R)=0$ на отделенном отрезке $R\in[a,b]$ будет иметь корень. Уточнение значений этого корня может быть реализовано с любой наперед заданной точностью по зависимости (8) или, например, с помощью метода хорд или касательных.

Заметим, что разбиение полного временного интервала на самостоятельные интервалы с решением обратных задач в каждом из них по указанной выше схеме позволяет определить значение искомых параметров как функций температуры $T_{p,1}(T)$. Поэтому последующий этап обработки экспериментальных данных состоит в построении температурных зависимостей $\lambda_{p,1}(T)$, $C\nu(T)$ в виде некоторых полиномиальных разложений той или иной степени методом математического планирования и регрессионного анализа. На этом этапе для проверки и установления адекватности целесообразно использовать дискретную нелинейную математическую модель на полном пространственно-временном интервале.

Литература

1. Иващенко, В. П. Информационная система интеллектуальной поддержки принятия решений для процесса прокатки [Текст] / В. П. Иващенко, Г. Г. Швачич, А. В. Соболенко, Д. В. Протопопов // Восточно-Европейский журнал передовых технологий. — 2003. — № 3. — С. 4—9.
2. Коздоба, Л. А. Вычислительная теплофизика [Текст] / Л. А. Коздоба. — Киев: Наук. Думка, 1992. — 224 с.
3. Ильченко, К. Д. Теплофизические свойства промышленных материалов [Текст] : справочник / К. Д. Ильченко, В. А. Чеченев, В. П. Иващенко, В. С. Терещенко. — Днепропетровск: Січ, 1999. — 152 с.
4. Роуч, П. Вычислительная гидромеханика [Текст] : пер. с англ. / П. Роуч. — М.: Мир, 1980. — 616 с.
5. На, Ц. Вычислительные методы решения прикладных граничных задач [Текст] : пер. с англ. / Ц. На. — М.: Мир, 1982. — 296 с.
6. Воеводин, В. В. Математические модели и методы в параллельных процессах [Текст] / В. В. Воеводин. — М.: Наука, 1986. — 296 с.
7. Системы параллельной обработки [Текст] : пер. с англ. / под ред. Д. Ивенса. — М.: Мир, 1985. — 416 с.
8. Яненко, Н. Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики [Текст] / Н. Н. Яненко. — Новосибирск: Наука, 1967. — 196 с.
9. Ковеня, В. М. Метод расщепления в задачах газовой динамики [Текст] / В. М. Ковеня, Н. Н. Яненко. — Новосибирск: Наука, 1981. — 304 с.
10. Швачич, Г. Г. Математическое моделирование одного класса задач металлургической теплофизики на основе многопроцессорных параллельных вычислительных систем [Текст] / Г. Г. Швачич // Математичне моделювання. — 2008. — № 1(18). — С. 60—65.
11. Швачич, Г. Г. ППП исследования решений некоторого класса задач нестационарной теплопроводности [Текст] : сб. науч. трудов НМетАУ в 2-х кн. / Г. Г. Швачич, А. А. Шмукин, Д. В. Протопопов // Металлургическая теплотехника. — Кн. 2. — Днепропетровск: Пороги, 2005. — С. 448—453.
12. Башков, Є. О. Високопродуктивна багатопроцесорна система на базі персонального обчислювального кластера [Текст] / Є. О. Башков, В. П. Іващенко, Г. Г. Швачич // Наук. пр. Донецького національного технічного університету. Серія «Проблеми моделювання та автоматизації проектування». — Вип. 9(179). — Донецьк : ДонНТУ, 2011. — С. 312—324.

ЕКСТРЕМАЛЬНІ АЛГОРИТМИ РОЗВ'ЯЗАННЯ КОЕФІЦІЄНТНИХ ЗАДАЧ ВИСОКОГО ПОРЯДКУ ТОЧНОСТІ

Для дослідження теплофізичних властивостей матеріалів оберненими методами виведено відповідний клас математичних моделей. Процедура обробки математичних моделей зведена до екстремальної постановки, що дозволило розробити ефективні алгоритми розв'язку коефіцієнтних задач довільного порядку точності. Приводяться результати розв'язку тестових задач на основі запропонованого підходу.

Ключові слова: коефіцієнтні задачі, екстремальна постановка, математичні моделі, теплопровідність, перенесення тепла.

***Швачич Геннадий Григорьевич**, доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой, кафедра прикладной математики и вычислительной техники, Национальная металлургическая академия Украины, Украина, **e-mail: sgg1@ukr.net**.*

***Швачич Геннадій Григорович**, доктор технічних наук, професор, завідувач кафедри прикладної математики та обчислювальної техніки, Національна металургійна академія України, Україна.*

Shvachych Gennady**, National metallurgical academy of Ukraine, Ukraine, **e-mail: sgg1@ukr.net