

УДК 519.626

**ОБ ЭФФЕКТИВНОСТИ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ОПТИМАЛЬНОГО
УПРАВЛЕНИЯ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОЛОГИИ БЫСТРОГО
АВТОМАТИЧЕСКОГО ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЯ¹****А. Ф. Албу, В. И. Зубов**

В работе рассматривается эффективный метод решения задач оптимального управления тепловыми процессами с фазовыми переходами. Сформулировано и обосновано утверждение о том, что машинное время, требуемое для определения компонент градиента целевой функции с помощью этого метода, не превышает времени, требуемого для вычисления двух значений самой функции.

Ключевые слова: оптимальное управление, градиент, быстрое автоматическое дифференцирование, сопряженная задача, задача Стефана.

A. F. Albu, V. I. Zubov. On the efficiency of solving optimal control problems by means of Fast Automatic Differentiation technique.

A efficient method is introduced for solving the problems of optimal control of thermal processes with phase transitions. The following statement is formulated and proved: the time of computing the components of the gradient of the objective function by means of the proposed method does not exceed the time of computing two values of the function.

Keywords: optimal control, gradient, fast automatic differentiation, adjoint problem, Stefan problem.

Введение

Хорошо известно, что распространение тепла в различных средах оказывает большое влияние на характер протекания многих важных для практики процессов. С математической точки зрения распространение тепла описывается краевыми задачами для уравнения теплопроводности. Найти решение этих краевых задач в явном виде, как правило, не удается. Поэтому был разработан класс численных методов решения краевых задач для уравнения теплопроводности.

Выдвигаемые практикой задачи заключаются не только в описании и изучении процессов распространения тепла, но и в оптимальном управлении такими процессами. Это привело к созданию теории оптимального управления тепловыми процессами. Здесь также достигнуты значительные успехи, несмотря на то что задачи оптимального управления на порядок сложнее “прямых” задач (краевых задач для уравнения теплопроводности) как в теоретическом плане, так и с точки зрения получения численных решений.

Один из важных классов задач, описывающих распространение тепла, связан с наличием такого свойства процессов, что при их протекании исследуемое вещество претерпевает фазовые превращения с выделением или поглощением тепла. Задачи этого класса известны под общим названием *задачи Стефана*. Существенной чертой таких задач является наличие движущейся поверхности раздела между двумя фазами, причем ни вид данной поверхности, ни закон ее движения заранее неизвестны и должны быть определены в процессе решения. Именно на этой поверхности происходит поглощение или выделение тепла, связанное с фазовым переходом. Задачи этого класса заметно сложнее тех, в которых отсутствует переход вещества из одной фазы в другую. Основная причина возникающих сложностей состоит в том,

¹Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект 14-11-00782).

что на поверхности раздела фаз коэффициенты уравнения теплопроводности терпят разрыв. Известны два основных подхода к поиску численного решения данной проблемы. Первый связан с явным построением поверхности раздела фаз. Однако даже в простейших случаях это требует построение громоздких процедур и больших затрат машинного времени, а для практически важных задач, где таких поверхностей много и они имеют довольно причудливые формы, использование данного подхода представляется нерациональным. Вторым подход основан на использовании так называемых алгоритмов сквозного счета. Здесь явного выделения поверхности раздела фаз не требуется, но приходится работать с уравнениями, коэффициенты которых — сильно меняющиеся или разрывные функции. Получение численного решения краевой задачи здесь также требует использования специальных алгоритмов.

Что касается задач оптимального управления процессами с фазовыми переходами, то под ними понимается выбор тех или иных параметров процесса (управляющих параметров) таким образом, чтобы либо сам процесс протекал по сценарию, наиболее близкому к заданному, либо поведение границы раздела фаз или функция от значений температуры в некоторой области были наиболее близки к требуемым. К трудностям решения прямых задач здесь прибавляются еще специфические трудности решения задач оптимального управления. Вследствие этого решенных задач немного.

В настоящей работе на примере осесимметричной задачи оптимального управления процессом плавления вещества показан эффективный метод решения задач оптимального управления тепловыми процессами с фазовыми переходами. Эффективность рассматриваемого метода состоит в *одновременном* использовании трех основных элементов. Первые два элемента связаны с решением прямой задачи.

Во-первых, осуществляется переход от формулировки краевой задачи в терминах температуры к формулировке в терминах теплосодержания (см. [1]). Делается это потому, что при пересечении поверхности раздела фаз температура меняется непрерывным образом, в то время как теплосодержание меняется скачком. Методы сквозного счета позволяют в этом случае определять распределение температуры более аккуратно. Эта идея была впервые высказана М. Розе, а впоследствии развита Е. Уайтом (см. [2]).

Вторым элементом данного подхода является алгоритм решения нелинейных систем конечно-разностных уравнений, полученных в результате аппроксимации краевой задачи, записанной в терминах теплосодержания. В упомянутой работе [2] для этой цели предложены два алгоритма: модифицированный метод Якоби и модифицированный метод Гаусса — Зейделя. В новом подходе предлагается итерационный алгоритм решения нелинейной системы уравнений (см. [3]), активно использующий метод прогонки и существенно превосходящий по эффективности (не менее чем на порядок) алгоритмы работы [2]. Это превосходство проявляется тем сильнее, чем больше число узлов сетки по пространственной переменной и чем выше требуемая итерационная точность. Особенно заметно преимущество рассматриваемого алгоритма при увеличении величины шага по времени (см., например, [4, табл. 4]). Подробно второй элемент алгоритма описан в [3].

Наконец, третий элемент связан с прямым методом решения задачи оптимального управления. Здесь предлагается решать эту задачу методом первого порядка с использованием градиента целевой функции. Вычислить градиент целевой функции, определяемой численно, — задача непростая. Известные методы вычисления либо дают неточные значения градиента (что приводит к остановке спуска в пространстве управлений), либо требуют неприемлемых затрат машинного времени. В нашем подходе предлагается для определения градиента целевой функции использовать методологию быстрого автоматического дифференцирования (БАД), предложенную Ю. Г. Евтушенко (см. [5; 6]). В основе БАД-методологии лежит сведение задачи оптимального управления к задаче нелинейного программирования. Целевой функционал и связи, наложенные на управления и фазовые переменные, аппроксимируются, в результате чего целевому функционалу ставится в соответствие функция конечного числа переменных, а связям — система алгебраических уравнений. БАД-методология предоставляет канонические

формулы, с помощью которых получается точное значение компонент градиента выбранного дискретного варианта задачи оптимального управления. В работах [5; 6] Ю. Г. Евтушенко сформулировал и обосновал утверждение о том, что вычисление градиента функции многих переменных с помощью методологии быстрого автоматического дифференцирования требует времени, не превосходящего утроенного времени решения прямой задачи.

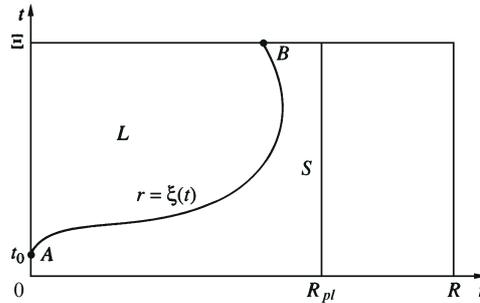
В настоящей работе на примере задачи оптимального управления процессом плавления вещества оценено машинное время, требуемое для вычисления градиента целевой функции с помощью БАД-методологии в задачах оптимального управления тепловыми процессами с фазовыми переходами. Сформулировано и обосновано утверждение о том, что время, требуемое для определения компонент градиента целевой функции с помощью указанного выше метода, не превышает времени, требуемого для вычисления двух значений этой функции.

Применение предложенного метода к решению сложных (трехмерных нестационарных) задач оптимального управления тепловыми процессами с фазовыми переходами показало его работоспособность и эффективность.

1. Математическая формулировка задачи

Физическая проблема, на примере которой описывается предложенный алгоритм, состоит в следующем: требуется расплавить заданную часть металлического образца, затратив при этом минимальное количество подводимого тепла. Сформулированная задача исследуется в рамках одномерной (с радиальной симметрией) нестационарной постановки (см. [1]). Источник подводимого тепла располагается вдоль оси симметрии, причем рассматривается случай распределенного по пространству источника. В качестве управления выбирается распределение по времени количества выделяемого источником тепла (мощность источника).

В плоскости независимых переменных (r, t) рассмотрим прямоугольную область Q (см. рисунок).



Траектория движения поверхности раздела фаз.

Область $Q = \{(r, t) : 0 < r < R, 0 < t \leq \Theta\}$ гладкой линией AB , уравнение которой есть $r = \xi(t)$, разбивается на две подобласти L (область жидкой фазы) и S (область твердой фазы). Линия AB — траектория движения поверхности раздела фаз (будем для краткости называть ее линией плавления). Если $t_0 \geq 0$ — момент времени, при котором зарождается линия плавления AB , то подобласти L и S определяются соотношениями

$$L = \{(r, t) : 0 < r < \xi(t), t_0 < t \leq \Theta\}, \quad S = \{(r, t) : \xi(t) < r < R, 0 < t \leq \Theta\}.$$

В области Q поставим следующую двухфазную задачу Стефана:

$$M_L \equiv \rho_L C_L \frac{\partial T_L}{\partial t} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r k_L \frac{\partial T_L}{\partial r} \right) - F(r, t) = 0, \quad (r, t) \in L, \quad (1.1)$$

$$M_S \equiv \rho_S C_S \frac{\partial T_S}{\partial t} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r k_S \frac{\partial T_S}{\partial r} \right) - F(r, t) = 0, \quad (r, t) \in S, \quad (1.2)$$

$$T_S(r, 0) = T_{in}(r), \quad 0 < r < R, \quad (1.3)$$

$$T_L(\xi(t), t) = T_S(\xi(t), t) = T_{pl}, \quad t_0 \leq t \leq \Theta, \quad (1.4)$$

$$\left[k_S \frac{\partial T_S}{\partial r} \right] \Big|_{(\xi(t)+0, t)} - \left[k_L \frac{\partial T_L}{\partial r} \right] \Big|_{(\xi(t)-0, t)} = \rho_S \lambda \xi'(t), \quad t_0 \leq t \leq \Theta, \quad (1.5)$$

$$k_S \frac{\partial T_S}{\partial r} \Big|_R = \alpha [T_{ex} - T_S(R, t)], \quad 0 < t \leq \Theta, \quad (1.6)$$

$$\frac{\partial T_L}{\partial r}(0, t) = 0, \quad t_0 < t \leq \Theta, \quad (1.7)$$

$$\frac{\partial T_S}{\partial r}(0, t) = 0, \quad 0 < t < t_0. \quad (1.8)$$

Здесь $T(r, t)$ — температура вещества в точке с координатами (r, t) ; ρ , C , k — плотность вещества, его теплоемкость и коэффициент теплопроводности соответственно; λ — теплота плавления вещества; нижние индексы L и S указывают на принадлежность величины жидкой или твердой фазе соответственно; T_{pl} — температура плавления вещества; $T_{in}(r)$ — начальная температура вещества, $T_{in}(r) \leq T_{pl}$; α — коэффициент теплообмена с окружающей средой; T_{ex} — температура окружающей среды. Источник подводимого тепла $F(r, t)$ представим в виде $F(r, t) = \varphi(r)f(t)$, где $\varphi(r)$ — некоторая заданная функция, описывающая распределение выделяемой энергии по пространству. Задачу (1.1)–(1.8) при заданной функции $f(t)$ будем называть прямой задачей.

Пусть $\xi(t)$ — линия плавления, соответствующая источнику $f(t)$, $t \in [0, \Theta]$ и ξ_f — максимальное значение величины $\xi(t)$ при $t_0 \leq t \leq \Theta$. Будем говорить, что функция $f(t)$ принадлежит классу $K(\Theta)$, если она

- определена и кусочно-непрерывна на отрезке $[0, \Theta]$,
- имеет кусочно-непрерывную производную,
- удовлетворяет ограничениям $0 \leq f(t) \leq f_{\max}$ для всех $[0, \Theta]$,
- соответствующее ей $\xi_f \geq R_{pl}$, где R_{pl} ($R_{pl} < R$) — заданная величина.

Величина f_{\max} может быть бесконечно большой, т. е. ограничение сверху может отсутствовать. Заметим также, что для заданной конечной величины f_{\max} значение величины Θ не должно быть меньше некоторого определенного значения, иначе класс $K(\Theta)$ окажется пустым.

Вариационную задачу можно сформулировать следующим образом: среди функций $f(t)$ из класса $K(\Theta)$ найти такую функцию $f_{opt}(t)$, что функционал

$$J = \int_0^{\Theta} f(t) dt \quad (1.9)$$

достигает на ней минимального значения.

На примере этой задачи ниже будут оценены трудоемкости решения прямой задачи и процедуры вычисления градиента целевой функции. Пусть T_0 — полное время, требуемое для численного решения прямой задачи (задачи определения температурного поля) и для вычисления значения целевой функции; T_g — время, требуемое для определения градиента этой функции. Нас будет интересовать отношение T_g/T_0 .

При определении T_0 и T_g будем учитывать только время выполнения арифметических операций (+, −, ×, /) и операций сравнения (*if*), которые встречаются в используемых алгоритмах. Договоримся использовать традиционную RAM-модель вычислений (см., например, [7]), в рамках которой трудоемкость доступа к ячейкам памяти и выполнения элементарных операций предполагается независимой от величины аргументов. Кроме того, во внимание не будет приниматься время, затрачиваемое на определение величин, не зависящих от фазовых переменных (значения которых могут быть вычислены до начала итерационного процесса).

2. Алгоритм решения прямой задачи

В работе [1] изложен алгоритм численного решения прямой задачи. Мы приводим данный алгоритм с незначительными сокращениями, достаточными для понимания дальнейших рассуждений. В основе метода лежит переход от формулировки задачи (1.1)–(1.8) в терминах температуры $T(r, t)$ к формулировке в терминах функции теплосодержания $E(r, t)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial t} &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \Omega(E) \frac{\partial T(E)}{\partial r} \right) + F(r, t), & (r, t) \in Q, \\ E(r, 0) &= E(T_{in}(r)), & 0 < r < R, \\ \frac{\partial E}{\partial r} \Big|_{r=0} &= 0, & 0 \leq t \leq \Theta, \\ \Omega(E) \frac{\partial T(E)}{\partial r} \Big|_{r=R} &= \alpha [T_{ex} - T(E(R, t))], & 0 \leq t \leq \Theta, \end{aligned} \quad (2.1)$$

где

$$T(E) = \begin{cases} E \rho_S^{-1} C_S^{-1}, & E < E_- = \rho_S C_S T_{pl}, \\ T_{pl}, & E_- \leq E \leq E_+ = E_- + \rho_S \lambda, \\ [E + (\rho_L C_L - \rho_S C_S) T_{pl} - \rho_S \lambda] \rho_L^{-1} C_L^{-1}, & E_+ < E, \end{cases}$$

$$\Omega(E) = k(T(E)) = \begin{cases} k_S, & E < E_-, \\ E_1 E + E_2, & E_- \leq E \leq E_+, \\ k_L, & E > E_+, \end{cases}$$

$$E_1 = (k_L - k_S)/(E_+ - E_-); \quad E_2 = k_S - E_- \cdot E_1.$$

Для численного решения краевой задачи (2.1) в области Q вводится неравномерная сетка $\omega = \{r_i, t^j\}$, где

$$r_0 = t^0 = 0, \quad r_i = r_{i-1} + h_{i-1}, \quad t^j = t^{j-1} + \tau^j, \quad i = 1, \dots, K; \quad j = 1, \dots, M.$$

Использование неявной аппроксимации по времени и интегро-интерполяционного метода приводит к следующей системе конечно-разностных уравнений:

$$\begin{aligned} E_0^j + a_0 \hat{\Omega}(E_0^j) T(E_0^j) - a_0 \hat{\Omega}(E_0^j) T(E_1^j) &= E_0^{j-1} + \tau^j F_0^j, \\ E_i^j + [a_i \hat{\Omega}(E_i^j) + b_i \hat{\Omega}(E_{i-1}^j)] T(E_i^j) - b_i \hat{\Omega}(E_{i-1}^j) T(E_{i-1}^j) - a_i \hat{\Omega}(E_i^j) T(E_{i+1}^j) &= E_i^{j-1} + \tau^j F_i^j, \quad (2.2) \\ 1 \leq i \leq K-1, \\ E_K^j + [a_K \alpha + b_K \hat{\Omega}(E_{K-1}^j)] T(E_K^j) - b_K \hat{\Omega}(E_{K-1}^j) T(E_{K-1}^j) &= a_K \alpha T_{ex} + E_K^{j-1} + \tau^j F_K^j, \\ j = 1, \dots, M. \end{aligned}$$

Здесь введены следующие обозначения:

$$E_i^j = E(r_i, t^j), \quad F_i^j = F(r_i, t^j), \quad \hat{\Omega}(E_i^j) = \Omega[(E_i^j + E_{i+1}^j)/2],$$

а выражения для коэффициентов a_i и b_i приведены в [1].

Система (2.2) разбивается на M подсистем, которые связывают величины, зависящие от значений функции теплосодержания на временном слое с номером j , с величинами, определяемыми функцией теплосодержания на предыдущем временном слое с номером $(j-1)$, где $j = 1, 2, \dots, M$.

Решение полученной конечно-разностной системы уравнений осуществляется с помощью нового метода, описанного в [3]. Для этого функцию температуры на временном слое j представляем в виде $T(E_i^j) = \mu(E_i^j)E_i^j + \nu(E_i^j)$, где функции μ и ν определяются формулами

$$\mu(E_i^j) = \begin{cases} \rho_S^{-1} C_S^{-1}, & E_i^j < E_-, \\ 0, & E_- \leq E_i^j \leq E_+, \\ \rho_L^{-1} C_L^{-1}, & E_+ < E_i^j, \end{cases} \quad \nu(E_i^j) = \begin{cases} 0, & E_i^j < E_-, \\ T_{pl}, & E_- \leq E_i^j \leq E_+, \\ E_3, & E_+ < E_i^j, \end{cases}$$

$$E_3 = ((\rho_L C_L - \rho_S C_S) T_{pl} - \rho_S \lambda) \rho_L^{-1} C_L^{-1}.$$

Итерационный процесс для решения этой системы уравнений строится следующим образом. Если $(K+1)$ -мерный вектор $\mathbf{V}^n = \|V_0^n \ V_1^n \dots \ V_K^n\|^T$ представляет собой приближение к вектору \mathbf{E}^j , полученное на n -й итерации (в качестве начальной итерации \mathbf{V}^0 берется значение вектора \mathbf{E} с предыдущего временного слоя, т.е. \mathbf{E}^{j-1}), то вектор \mathbf{V}^{n+1} на каждом шаге итерации определяется как решение следующей системы уравнений:

$$A_i(\mathbf{V}^n) V_{i-1}^{n+1} - C_i(\mathbf{V}^n) V_i^{n+1} + B_i(\mathbf{V}^n) V_{i+1}^{n+1} + D_i(\mathbf{V}^n) = 0, \quad (2.3)$$

где

$$A_i(\mathbf{V}^n) = b_i \hat{\Omega}(V_{i-1}^n) \mu(V_{i-1}^n), \quad B_i(\mathbf{V}^n) = a_i \hat{\Omega}(V_i^n) \mu(V_{i+1}^n),$$

$$C_i(\mathbf{V}^n) = 1 + (a_i \hat{\Omega}(V_i^n) + b_i \hat{\Omega}(V_{i-1}^n)) \mu(V_i^n),$$

$$D_i(\mathbf{V}^n) = b_i \hat{\Omega}(V_{i-1}^n) \nu(V_{i-1}^n) - (a_i \hat{\Omega}(V_i^n) + b_i \hat{\Omega}(V_{i-1}^n)) \nu(V_i^n) + a_i \hat{\Omega}(V_i^n) \nu(V_{i+1}^n) + E_i^{j-1} + \tau^j F_i^j, \\ i = 1, \dots, K-1,$$

$$A_0(\mathbf{V}^n) = 0, \quad B_0(\mathbf{V}^n) = a_0 \hat{\Omega}(V_0^n) \mu(V_1^n), \quad C_0(\mathbf{V}^n) = 1 + a_0 \hat{\Omega}(V_0^n) \mu(V_0^n),$$

$$D_0(\mathbf{V}^n) = -(a_0 \hat{\Omega}(V_0^n)) \nu(V_0^n) + a_0 \hat{\Omega}(V_0^n) \nu(V_1^n) + E_0^{j-1} + \tau^j F_0^j,$$

$$A_K(\mathbf{V}^n) = b_K \hat{\Omega}(V_{K-1}^n) \mu(V_{K-1}^n), \quad B_K(\mathbf{V}^n) = 0, \quad C_K(\mathbf{V}^n) = 1 + (\alpha a_K + b_K \hat{\Omega}(V_{K-1}^n)) \mu(V_K^n),$$

$$D_K(\mathbf{V}^n) = b_K \hat{\Omega}(V_{K-1}^n) \nu(V_{K-1}^n) - (\alpha a_K + b_K \hat{\Omega}(V_{K-1}^n)) \nu(V_K^n) + \alpha a_K T_{ex} + E_K^{j-1} + \tau^j F_K^j.$$

Операции, используемые при реализации метода прогонки и при вычислении прогоночных коэффициентов A_i, B_i, C_i, D_i ($i = 0, 1, \dots, K$), являются арифметическими операциями между двумя переменными или одной переменной и константой. Время, необходимое для выполнения операций сложения, вычитания, умножения и деления, обозначим соответственно $T_+, T_-, T_\times, T_/\$. Пусть $N_+, N_-, N_\times, N_/\$ — соответственно количество сложений, вычитаний, умножений и делений среди арифметических операций. Кроме того, при определении прогоночных коэффициентов системы уравнений (2.3) необходимы значения функций $\hat{\Omega}(E_i^j), \mu(E_i^j)$ и $\nu(E_i^j)$, для вычисления которых используются операции сравнения if . Обозначим время, необходимое для выполнения одной операции сравнения, через T_{if} , а количество этих операций — через N_{if} . Предполагаем, что $T_+ = T_-$. Поэтому количество сложений и вычитаний будем суммировать вместе и обозначать N_+ .

При вычислении прогоночных коэффициентов A_i, B_i, C_i, D_i ($i = 0, 1, \dots, K$) и при решении системы уравнений (2.3) с помощью указанного выше алгоритма выполняются $N_+ = 12K + 3$ операций сложения и вычитания, $N_\times = 11K + 3$ операций умножения, $N_/\ = 3K + 6$ операций деления и $N_{if} = 6K + 4$ операций сравнения. Если обозначить через N^* количество итераций, выполненных на одном временном слое для достижения требуемой точности, то количество операций, необходимое для определения температурного поля, увеличивается в $N^* \cdot M$ раз.

Заканчивается процесс решения задачи (2.1) выделением линии плавления. Пусть $E_{pl} = (E_- + E_+)/2$. Если для некоторого значения $0 \leq z \leq K$ при $t = t^j$ выполняются условия $E_z^j \geq E_{pl}$, а $E_{z+1}^j < E_{pl}$, тогда радиус плавления ξ^j вычисляется по формуле

$$\xi^j = \frac{(E_{pl} - E_{z+1}^j)(r_z - r_{z+1})}{E_z^j - E_{z+1}^j} + r_{z+1}. \quad (2.4)$$

Соотношение (2.4) позволяет заключить, что при определении радиуса плавления ξ^j во все моменты времени выполняются в среднем $M \cdot K/2$ операций сравнения, $M \cdot K/2$ операций умножения, $M \cdot K/2$ операций деления и $2M \cdot K$ операций сложения и вычитания.

Решение вариационной задачи, сформулированной в первом разделе, проводилось численно с использованием градиентных методов. Для выделения функций сравнения из множества функций, принадлежащих классу $K(\Theta)$, применялся метод внешних штрафных функций. Выбиралась штрафная функция следующего вида $g(r) = A \cdot (r - R_{pl})^2$, где A — константа. При этом задача условной минимизации целевого функционала J из (1.9) сводилась к задаче без условной минимизации обобщенного функционала $I = J + g(\xi_f)$.

Максимальное значение радиуса плавления ξ_f находится по формуле $\xi_f = \max_{1 \leq j \leq M} \xi^j$, где ξ^j определено в (2.4). Если этот максимум достигается при $j = m$ ($1 \leq m \leq M$), то

$$\xi_f = \xi_f(f) = \frac{(E_{pl} - E_{z+1}^m)(r_z - r_{z+1})}{E_z^m - E_{z+1}^m} + r_{z+1}.$$

Используя для аппроксимации целевого функционала из (1.9) метод прямоугольников, получим следующее выражение, аппроксимирующее обобщенный функционал I :

$$I \approx \tilde{I}(f) = \sum_{j=1}^M \tau^j f^j + A(\xi_f(f) - R_{pl})^2.$$

При вычислении значения \tilde{I} выполняются $(M+2)$ операций умножения и 2 операции сложения и вычитания.

Таким образом, полное время T_0 , требуемое для численного решения прямой задачи и для вычисления значения целевой функции, рассчитывается по формуле

$$T_0 = (N^* \cdot M \cdot (6K + 4) + M \cdot K/2) \cdot T_{if} + (N^* \cdot M \cdot (3K + 6) + M \cdot K/2) \cdot T_f + (N^* \cdot M \cdot (11K + 3) + M \cdot K/2 + M + 2) \cdot T_x + (N^* \cdot M \cdot (12K + 3) + 2M \cdot K + 2) \cdot T_+.$$

Оценим теперь время T_g , требуемое для вычисления градиента целевой функции.

3. Алгоритм вычисления градиента в задаче оптимального управления процессом плавления вещества

Соотношения, с помощью которых вычисляется градиент функционала I , выводятся на основе методологии быстрого автоматического дифференцирования (см. [5]). Для того чтобы воспользоваться этим методом, дискретный вариант (2.2) краевой задачи (2.1) приводится к так называемому каноническому виду

$$E_i^j = \Psi[(i, j), Z_{(i,j)}, U_{(i,j)}]. \quad (3.1)$$

Здесь через $Z_{(i,j)}$ обозначено множество всех E_i^j со всеми индексами i и j , элементы которых встречаются во всех слагаемых левой части, кроме первого, и в правой части равенств (2.2), а через $U_{(i,j)}$ — множество всех f^j , элементы которых встречаются в правой части равенств (2.2). Тогда согласно БАД-методологии [5; 1, с. 525] компоненты градиента обобщенной функции \tilde{I} по компонентам вектора f^j вычисляются по формуле

$$\frac{d\tilde{I}}{df^j} = \tilde{I}_{f^j} + \sum_{(q,v) \in \bar{K}_{(q,v)}} \Psi_{f^j}^T[(q, v), Z_{(q,v)}, U_{(q,v)}] \cdot p_q^v, \quad 1 \leq j \leq M, \quad (3.2)$$

где p_q^v — сопряженные переменные (импульсы) — определяются как решения следующей системы линейных алгебраических уравнений:

$$p_i^j = \sum_{(q,v) \in \overline{Q}_{(q,v)}} \Psi_{E_i^j}^T [(q,v), Z_{(q,v)}, U_{(q,v)}] \cdot p_q^v + \tilde{I}_{E_i^j}, \quad 0 \leq i \leq K; \quad 1 \leq j \leq M. \quad (3.3)$$

Индексные множества $\overline{Q}_{(i,j)}$ и $\overline{K}_{(i,j)}$ определяются соотношениями

$$\overline{Q}_{(i,j)} = \{(q,v) : (i,j) \in Q_{(q,v)}\}, \quad Q_{(i,j)} = \{(i,j) : E_i^j \in Z_{(i,j)}\},$$

$$\overline{K}_{(i,j)} = \{(q,v) : (i,j) \in K_{(q,v)}\}, \quad K_{(i,j)} = \{(i,j) : f^j \in U_{(i,j)}\}.$$

Для конкретного вида функции Ψ из (3.1), определяемого аппроксимацией (2.2) краевой задачи (2.1), систему уравнений (3.3) записываем в следующем виде:

$$p_i^{M+1} = 0, \quad i = 0, \dots, K,$$

$$p_0^j = -a_0 Y_1^j p_0^j + b_1 Y_1^j p_1^j + p_0^{j+1} + \tilde{I}_{E_0^j}, \quad (3.4)$$

$$p_i^j = a_{i-1} X_i^j p_{i-1}^j - a_i Y_{i+1}^j p_i^j - b_i X_i^j p_i^j + b_{i+1} Y_{i+1}^j p_{i+1}^j + p_i^{j+1} + \tilde{I}_{E_i^j}, \quad 1 \leq i \leq K-1,$$

$$p_K^j = a_{K-1} X_K^j p_{K-1}^j - b_K X_K^j p_K^j - a_K \alpha T'_{E_K^j}(E_K^j) p_K^j + p_K^{j+1} + \tilde{I}_{E_K^j},$$

$$j = M, M-1, \dots, 1.$$

Здесь через X_i^j , Y_i^j , $\tilde{I}_{E_i^j}$ обозначены производные

$$X_i^j = \frac{\partial}{\partial E_i^j} (\hat{\Omega}(E_{i-1}^j) T(E_i^j)) - \frac{\partial}{\partial E_i^j} (\hat{\Omega}(E_{i-1}^j) T(E_{i-1}^j)), \quad i = 1, 2, \dots, K,$$

$$Y_i^j = \frac{\partial}{\partial E_{i-1}^j} (\hat{\Omega}(E_{i-1}^j) T(E_{i-1}^j)) - \frac{\partial}{\partial E_{i-1}^j} (\hat{\Omega}(E_{i-1}^j) T(E_i^j)), \quad i = 1, 2, \dots, K,$$

$$\tilde{I}_{E_i^j} = \begin{cases} \Lambda(E_{pl} - E_{z+1}^m), & i = z, & j = m, \\ \Lambda(E_z^m - E_{pl}), & i = z+1, & j = m, \quad i = 0, 1, \dots, K, \\ 0, & \text{в остальных случаях,} \end{cases}$$

где

$$\Lambda = 2A \frac{(r_{z+1} - r_z)}{(E_z^m - E_{z+1}^m)^2} \left[\frac{(E_{pl} - E_{z+1}^m)(r_z - r_{z+1})}{E_z^m - E_{z+1}^m} + r_{z+1} - R_{pl} \right],$$

z — индекс, который определяется при расчете радиуса плавления по формуле (2.4), а коэффициенты a_i , b_i ($i = 0, 1, \dots, K$) определены во втором разделе.

Для того чтобы воспользоваться методом прогонки, система уравнений (3.4) приводится к трехдиагональному матричному виду. При вычислении прогоночных коэффициентов этой системы выполняются $N_{if} = 20K + 4$ операций сравнения, $N_{/} = K + 6$ операций деления, $N_{\times} = 16K + 7$ операций умножения и $N_{+} = 16K + 9$ операций сложения и вычитания. При решении системы линейных алгебраических уравнений (3.4) на одном временном слое с помощью метода прогонки выполняются еще $N_{/} = 2K + 2$ операций деления, $N_{\times} = 3K + 1$ операций умножения и $N_{+} = 3K$ операций сложения и вычитания.

Таким образом, для решения сопряженной задачи требуется выполнение $N_{if} = M \cdot (20K + 4)$ операций сравнения, $N_{/} = M \cdot (3K + 8)$ операций деления, $N_{\times} = M \cdot (19K + 8)$ операций умножения и $N_{+} = M \cdot (19K + 9)$ операций сложения и вычитания.

И, наконец, согласно формуле (3.2) компоненты вектора градиента обобщенной функции \tilde{I} могут быть вычислены с помощью формулы

$$\frac{d\tilde{I}}{df^j} = \tau^j + \tau^j \sum_{i=0}^w p_i^j \varphi_i, \quad 1 \leq j \leq M,$$

где w — номер узла, определяемого равенством

$$\varphi(r) = \begin{cases} \varphi_w(r) \neq 0, & 0 \leq r \leq r_w, \\ 0, & r > r_w. \end{cases}$$

Для вычисления всех компонент градиента по этой формуле выполняются не более $N_{\times} = M(K+2)$ операций умножения и M операций сложения.

Общее время T_g , требуемое для вычисления градиента целевой функции с помощью формул быстрого автоматического дифференцирования, определяется соотношением

$$T_g = M \cdot (20K + 4) \cdot T_{if} + M \cdot (3K + 8) \cdot T_l + M \cdot (20K + 10) \cdot T_{\times} + M \cdot (19K + 10) \cdot T_{+}. \quad (3.5)$$

Исследуемая в работе задача является нелинейной. Следовательно, при решении прямой задачи осуществляются как минимум две итерации ($N^* = 2$). Таким образом, время T_0 , требуемое для численного решения прямой задачи и для вычисления значения целевой функции, удовлетворяет неравенству

$$\begin{aligned} T_0 &\geq (2M \cdot (6K + 4) + M \cdot K/2) \cdot T_{if} + (2M \cdot (3K + 6) + M \cdot K/2) \cdot T_l \\ &\quad + (2M \cdot (11K + 3) + M \cdot K/2 + M + 2) \cdot T_{\times} + (2M \cdot (12K + 3) + 2M \cdot K + 2) \cdot T_{+} \\ &> M \cdot (10K + 2) \cdot T_{if} + M \cdot (1.5K + 4) \cdot T_l + M \cdot (10K + 5) \cdot T_{\times} + M \cdot (9.5K + 5) \cdot T_{+}. \end{aligned}$$

Сравнивая последнее неравенство и выражение, определяющее значение T_g по формуле (3.5), можно сделать вывод о том, что $T_g/T_0 < 2$. Таким образом, справедливо следующее утверждение.

Теорема. *Предположим, что*

1) $\tilde{I}(f)$ — скалярная неявно заданная дифференцируемая целевая функция векторного аргумента $f \in R^M$;

2) арифметические действия и вычисление основных элементарных функций, используемые для определения значений функции $\tilde{I}(f)$, производятся точно. Тогда время, требуемое для определения градиента целевой функции $\tilde{I}(f)$ с помощью формул быстрого автоматического дифференцирования в задаче оптимального управления (1.1)–(1.9), не превышает времени, необходимого для вычисления двух значений самой функции.

Результат настоящей работы превосходит результат работы [6] за счет следующих условий:

а) в алгоритме вычисления градиента не появляются элементарные функции, производные которых вычисляются за время, вдвое большее времени вычисления самой функции;

б) в рассматриваемых задачах для вычисления целевой функции требуется проведение итераций, в то время как сопряженная задача является линейной (в [6] функция вычисляется безитерационно).

Предложенный алгоритм решения задачи оптимального управления оказался эффективным для определения градиента целевой функции при исследовании тепловых задач с фазовым переходом. Этот метод успешно использовался для решения трехмерных нестационарных вариационных задач (см., например, [8;9]). Многочисленные расчеты прямых задач показали, что для достижения требуемой итерационной точности (максимальное относительное отклонение между двумя итерациями не превышало 10^{-12}) необходимо выполнение не менее четырех итераций на каждом временном слое (т. е. $N^* \geq 4$). Поэтому в рассмотренных задачах фактически $T_g/T_0 \leq 1$, т. е. вычисление градиента требует примерно столько же машинного времени, что и решение прямой задачи.

Следует также отметить, что указанный подход является универсальным и он может быть успешно применен при исследовании других задач оптимального управления сложными системами.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Албу А.Ф., Горбунов В.И., Зубов В.И.** Оптимальное управление процессом плавления // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 2000. Т. 40, № 4. С. 517–531.
2. **White R.E.** An enthalpy formulation of the Stephan problem // SIAM J. Numer. Anal. 1982. Vol. 19, no. 6. P. 1129–1157.
3. **Албу А.Ф., Зубов В.И.** О модификации одной схемы для расчета процесса плавления // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 2001. Т. 41, № 9. С. 1434–1443.
4. **Албу А.Ф., Зубов В.И.** Усовершенствованный алгоритм расчета процессов с фазовыми переходами // Методы оптимизации и их приложения: Тр. XIII Междунар. шк.-семинара / ИСЭМ СО РАН. Иркутск, 2005. Т. 2. С. 51–56.
5. **Evtushenko Y.G.** Computation of exact gradients in distributed dynamic systems // Optim. Methods Softw. 1998. Vol. 9, no. 1–3. P. 45–75.
6. **Евтушенко Ю.Г.** Оптимизация и быстрое автоматическое дифференцирование / ВЦ им. А. А. Дородницына РАН М., 2013. 144 с.
7. **Ахо А., Хопкрофт Дж., Ульман Дж.** Построение и анализ вычислительных алгоритмов. М.: Мир, 1979. 536 с.
8. **Албу А.Ф., Зубов В.И.** Исследование задачи оптимального управления процессом кристаллизации вещества в новой постановке // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 2014. Т. 54, № 5. С. 734–745.
9. **Албу А.Ф., Зубов В.И.** Исследование задачи оптимального управления процессом кристаллизации вещества в новой постановке для объекта сложной геометрической формы // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 2014. Т. 54, № 12. С. 1879–1893.

Албу Алла Филипповна
канд. физ.-мат. наук, старший науч. сотрудник
Вычислительный центр им. А. А. Дородницына РАН
e-mail: alla.albu@mail.ru

Поступила 01.04.2015

Зубов Владимир Иванович
д-р физ.-мат. наук, главный науч. сотрудник
Вычислительный центр им. А. А. Дородницына РАН
e-mail: zubov@ccas.ru