

УДК 517.626

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ОПТИМИЗАЦИОННЫХ МЕТОДОВ
ВТОРОГО ПОРЯДКА
ДЛЯ РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ КОЭФФИЦИЕНТНОЙ ЗАДАЧИ
В ТРЕХМЕРНОЙ ПОСТАНОВКЕ¹**

А. Ф. Албу, Ю. Г. Евтушенко, В. И. Зубов

Рассматривается обратная задача определения зависящего от температуры коэффициента теплопроводности вещества. Рассмотрение проводится на основе первой краевой задачи для трехмерного нестационарного уравнения теплопроводности. Образец исследуемого вещества имеет форму прямого параллелепипеда. Обратная коэффициентная задача сводится к вариационной задаче. В качестве целевого функционала выбрано среднее квадратичное отклонение рассчитываемого теплового потока на поверхности тела от экспериментально полученного потока. В работе исследуется возможность решения вариационной задачи оптимизационными методами второго порядка сходимости. На примере ряда нелинейных задач, коэффициенты которых зависят от температуры, проведен сравнительный анализ решения этих задач с помощью градиентного метода и метода Левенберга — Марквардта. Точность вычисления элементов матрицы типа Якоби, требуемой для реализации метода Левенберга — Марквардта, оказывает существенное влияние на сходимость итерационного процесса. Существенным в предлагаемом нами подходе является то, что элементы матрицы типа Якоби вычисляются с машинной точностью благодаря использованию методологии быстрого автоматического дифференцирования. Большое внимание в работе уделяется особенностям решения обратной задачи, связанным с ее трехмерным пространственным характером.

Ключевые слова: обратные коэффициентные задачи, нелинейные задачи, трехмерное уравнение теплопроводности, оптимальное управление, численные методы оптимизации, схемы переменных направлений.

A. F. Albu, Yu. G. Evtushenko, V. I. Zubov. Application of second-order optimization methods for solving an inverse coefficient problem in the three-dimensional statement.

An inverse problem of finding a temperature-dependent thermal conductivity coefficient of a substance is considered. The analysis is based on the first boundary value problem for the three-dimensional nonstationary heat equation. The sample of the substance under investigation has the form of a rectangular parallelepiped. The inverse coefficient problem is reduced to a variational problem. The root-mean-square deviation of the calculated heat flux on the surface of the body from the experimentally obtained flux is chosen as the cost functional. The paper investigates the possibility of solving the variational problem by optimization methods of the second order of convergence. On the example of a number of nonlinear problems whose coefficients are temperature-dependent, a comparative analysis of the solution of these problems by means of the gradient method and the Levenberg–Marquardt method is carried out. The accuracy of calculating the elements of the Jacobi-type matrix required to implement the Levenberg–Marquardt method has a significant impact on the convergence of the iterative process. It is essential that in our approach the elements of the Jacobi-type matrix are calculated with machine precision due to the use of the fast automatic differentiation technique. Much attention is paid to the features of solving the inverse problem associated with its three-dimensional spatial nature.

Keywords: inverse coefficient problems, nonlinear problems, three-dimensional heat equation, optimal control, numerical optimization methods, alternating direction schemes.

MSC: 49M05, 49N45

DOI: 10.21538/0134-4889-2021-27-4-19-34

Введение

При экспериментальном исследовании тепловых процессов иногда возникает ситуация, 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.

¹Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 21-71-30005).

Так, довольно часто приходится встречаться с ситуацией, когда коэффициент теплопроводности вещества зависит от температуры, и эта зависимость неизвестна. В связи с этим возникает задача определения зависимости коэффициента теплопроводности вещества от температуры по результатам экспериментального наблюдения за динамикой температурного поля.

Задача определения коэффициента теплопроводности вещества представляет повышенный интерес и рассматривается довольно давно. Подтверждением этому может служить большое количество публикаций, посвященных указанному вопросу (см., например, [1–9]). Существенное внимание в этих работах уделяется не только теоретическому исследованию обратных коэффициентных задач, но и разработке численных методов их решения.

В настоящей работе задача определения зависимости коэффициента теплопроводности вещества от температуры по результатам экспериментального наблюдения за динамикой температурного поля в исследуемом веществе рассматривается на основе первой краевой задачи для трехмерного нестационарного уравнения теплопроводности. Эта задача рассматривалась ранее в работах [10; 11] в двух разных постановках. Обратная коэффициентная задача сводилась к вариационной задаче и решалась с помощью градиентных методов минимизации целевого функционала.

В работе [10] в качестве целевого функционала было выбрано среднеквадратичное отклонение рассчитанного поля температуры от экспериментально определенного поля (функционал “поле”). В работе [11] в качестве целевого функционала использовалось среднеквадратичное отклонение рассчитанного теплового потока на поверхности трехмерного объекта от экспериментально определенного теплового потока (функционал “поток”).

Для эффективной работы градиентных методов необходимо знать точное значение градиента целевой функции. В работах [10; 11] для вычисления градиента использовалась методология быстрого автоматического дифференцирования (БАД-методология, см. [12]). Это позволило добиться того, что градиент целевой функции в предложенном алгоритме вычислялся с машинной точностью, что увеличивало скорость минимизации функционала. Однако в окрестности решения градиентные методы сходятся довольно медленно. Принимая во внимание этот факт, авторы в настоящей работе исследуют возможность применения оптимизационных методов второго порядка сходимости для решения обратной коэффициентной задачи в трехмерной постановке.

Так как рассматриваемые функционалы имеют квадратичный вид, то наиболее подходящим оптимизационным методом второго порядка сходимости в этом случае представляется метод Левенберга — Марквардта. Использование метода Ньютона требовало бы на каждой итерации вычисления и обращения матрицы Гесса, что зачастую является достаточно сложным процессом и приводит к большим затратам машинных ресурсов.

При использовании метода Левенберга — Марквардта отпадает необходимость вычисления и обращения матрицы вторых производных, а строится матрица типа Якоби. Ее элементы — компоненты градиента каждого из квадратичных слагаемых целевого функционала.

В настоящей работе в качестве меры отклонения экспериментальных данных от тех, которые получаются в результате решения задачи, был выбран целевой функционал “поток”. Этот выбор был сделан, исходя из следующих соображений.

Во-первых, как следует из работы [10], использование функционала “поле” может приводить к неединственности решения задачи. При исследовании большого числа задач с функционалом “поток” никогда не приходилось сталкиваться с неединственностью решения. Во-вторых, в пользу использования функционала “поток” при решении задач идентификации коэффициента теплопроводности говорит и то, что тепловой поток на границе объекта замерить проще, чем температуру в самом объекте. В-третьих, процесс построения матрицы типа Якоби в случае использования функционала “поток” требует намного меньше ресурсов компьютера, чем в случае использования функционала “поле”.

Точность вычисления элементов матрицы типа Якоби оказывает существенное влияние на сходимость метода Левенберга — Марквардта. Существенным в предлагаемом нами под-

ходе является то, что элементы матрицы типа Якоби вычисляются с машинной точностью благодаря использованию БАД-методологии.

Большое внимание в работе уделяется особенностям решения обратной задачи, связанным с ее трехмерным пространственным характером.

1. Постановка задачи

Пусть образец исследуемого вещества имеет форму прямого параллелепипеда длины R , ширины E и высоты G . Температура T этого параллелепипеда в начальный момент времени известна. Известно также, как изменяется во времени температура параллелепипеда на его гранях. Для математического описания процесса теплопроводности в параллелепипеде введем декартовы координаты x , y и z . Точки $s = (x, y, z)$ параллелепипеда образуют область $Q = \{(0, R) \times (0, E) \times (0, G)\}$ с границей $\Gamma = \partial Q$. Распределение температурного поля в параллелепипеде в каждый момент времени описывается решением следующей начально-краевой (смешанной) задачи:

$$C(s) \frac{\partial T(s, t)}{\partial t} = \operatorname{div}_s (K(T(s, t)) \nabla_s T(s, t)), \quad (s, t) \in \{Q \times (0, \Theta)\}, \quad (1.1)$$

$$T(s, 0) = w_0(s), \quad s \in \bar{Q}, \quad (1.2)$$

$$T(s, t) = w_\Gamma(s, t), \quad s \in \Gamma, \quad 0 \leq t \leq \Theta. \quad (1.3)$$

Здесь t — время; $T(s, t) \equiv T(x, y, z, t)$ — температура вещества в точке s с координатами (x, y, z) в момент времени t ; $C(s)$ — объемная теплоемкость материала; $K(T)$ — коэффициент теплопроводности; $w_0(s)$ — заданная температура параллелепипеда в начальный момент времени $t = 0$; $w_\Gamma(s, t)$ — заданная температура на границе области. Объемная теплоемкость считается известной функцией координат. При заданном коэффициенте теплопроводности $K(T)$ можно найти распределение температуры $T(s, t)$ в любой точке области $Q \times (0, \Theta]$, решив прямую задачу (1.1)–(1.3).

Обратная коэффициентная задача сводится к следующей вариационной задаче: требуется найти такую зависимость коэффициента теплопроводности вещества $K(T)$ от температуры T , при которой поток тепла $-K(T(s, t)) (\partial T(s, t) / \partial \bar{n})$ на границе объекта, полученный в результате решения прямой задачи (1.1)–(1.3), мало отличается от потока тепла $P(s, t)$, полученного экспериментально. В качестве меры отклонения этих функций рассматривается величина

$$\begin{aligned} \Phi(K(T)) = & \int_0^\Theta \iint_\Gamma \beta(s(\Gamma)) \left[\left(-K(T(s, t)) \frac{\partial T(s, t)}{\partial \bar{n}} \right) \Big|_{s \in \Gamma} - P(s(\Gamma), t) \right]^2 d\Gamma dt \\ & + \varepsilon \int_a^b (K'(T))^2 dT. \end{aligned} \quad (1.4)$$

Здесь $\varepsilon \geq 0$ и $\beta(s(\Gamma)) \geq 0$ — заданные весовые параметры; $P(s(\Gamma), t)$ — заданный тепловой поток на границе Γ области Q ; $\partial T / \partial \bar{n}$ является производной от температуры по направлению внешней нормали к границе области; $[a, b]$ — интервал температур, где функция $K(T)$ будет восстановлена. Последнее слагаемое в функционале (1.4) используется для “сглаживания” решения вариационной задачи с умеренными возмущениями экспериментальных данных.

Таким образом, обратная задача идентификации функции $K(T)$ сводится к следующей задаче оптимального управления: определить оптимальное управление $K(T)$ и соответствующее решение $T(s, t)$ задачи (1.1)–(1.3), при которых целевой функционал (1.4) достигает минимального значения.

2. Применение БАД-методологии для решения задачи методом Левенберга — Марквардта

Сформулированная выше задача оптимального управления решалась численно. Для дискретизации задачи в области $Q \times (0, \Theta)$ вводятся временная и пространственная сетки. Временная сетка задается набором узловых значений $\{t^j\}_{j=0}^J$, $t^0 = 0$, $t^J = \Theta$ с шагом τ^j . Пространственная сетка — множество точек $\{x_n, y_i, z_l\}$, где $n = \overline{0, N}$, $i = \overline{0, I}$, $l = \overline{0, L}$; h_n^x — расстояние между опорными точками x_n и x_{n+1} , т.е. $h_n^x = x_{n+1} - x_n$, $n = \overline{0, N-1}$; аналогично $h_i^y = y_{i+1} - y_i$, $i = \overline{0, I-1}$ и $h_l^z = z_{l+1} - z_l$, $l = \overline{0, L-1}$ (подробнее см. [11]). В каждом узле $\{x_n, y_i, z_l\}$ расчетной области $Q \times (0, \Theta)$ все функции задаются своими значениями в этой точке (например, $T(x_n, y_i, z_l, t^j) = T_{nil}^j$).

Обозначим через Γ_x^+ ту часть поверхности Γ , которая принадлежит плоскости $x = x_N$, через Γ_x^- — часть поверхности Γ , принадлежащую плоскости $x = x_0$. Аналогично определяются поверхности Γ_y^+ , Γ_y^- , Γ_z^+ и Γ_z^- .

Границы отрезка $[a, b]$, на котором идентифицируется коэффициент теплопроводности $K(T)$, задавались как минимальное и максимальное значения функций $w_0(s)$ и $w_\Gamma(s, t)$. Отрезок $[a, b]$ разбивался точками $\tilde{T}_0 = a$, $\tilde{T}_1, \tilde{T}_2, \dots, \tilde{T}_M = b$ на M частей (они могут быть как равными, так и неравными). 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 $K(T) = k_{m-1} + \frac{k_m - k_{m-1}}{\tilde{T}_m - \tilde{T}_{m-1}} (T - \tilde{T}_{m-1})$

для $\tilde{T}_{m-1} \leq T \leq \tilde{T}_m$ ($m = 1, \dots, M$). Если в процессе решения задачи температура в точке выходила за границы отрезка $[a, b]$, то для определения функции $K(T)$ использовалась линейная экстраполяция.

Одним из основных элементов предлагаемого численного метода решения обратной коэффициентной задачи является решение смешанной задачи (1.1)–(1.3). Итерационная локально-одномерная схема (см. [5]), которая использовалась для решения прямой задачи, является схемой переменных направлений (расщепляется по направлениям x , y и z). Здесь эта схема записывается в так называемом каноническом виде

x -направление:

$$\begin{aligned} T_{nil}^{j+\frac{1}{3}} &= T_{nil}^j + a_{nil} (K(T_{n+1,il}^{j+\frac{1}{3}}) T_{n+1,il}^{j+\frac{1}{3}} + K(T_{nil}^{j+\frac{1}{3}}) T_{n+1,il}^{j+\frac{1}{3}} - K(T_{n+1,il}^{j+\frac{1}{3}}) T_{nil}^{j+\frac{1}{3}} - K(T_{nil}^{j+\frac{1}{3}}) T_{nil}^{j+\frac{1}{3}}) \\ &+ b_{nil} (K(T_{n-1,il}^{j+\frac{1}{3}}) T_{n-1,il}^{j+\frac{1}{3}} + K(T_{nil}^{j+\frac{1}{3}}) T_{n-1,il}^{j+\frac{1}{3}} - K(T_{n-1,il}^{j+\frac{1}{3}}) T_{nil}^{j+\frac{1}{3}} - K(T_{nil}^{j+\frac{1}{3}}) T_{nil}^{j+\frac{1}{3}}) \equiv \Psi_{nil}^{j+\frac{1}{3}}; \quad (2.1) \end{aligned}$$

y -направление:

$$\begin{aligned} T_{nil}^{j+\frac{2}{3}} &= T_{nil}^{j+\frac{1}{3}} + c_{nil} (K(T_{n,i+1,l}^{j+\frac{2}{3}}) T_{n,i+1,l}^{j+\frac{2}{3}} + K(T_{nil}^{j+\frac{2}{3}}) T_{n,i+1,l}^{j+\frac{2}{3}} - K(T_{n,i+1,l}^{j+\frac{2}{3}}) T_{nil}^{j+\frac{2}{3}} - K(T_{nil}^{j+\frac{2}{3}}) T_{nil}^{j+\frac{2}{3}}) \\ &+ d_{nil} (K(T_{n,i-1,l}^{j+\frac{2}{3}}) T_{n,i-1,l}^{j+\frac{2}{3}} + K(T_{nil}^{j+\frac{2}{3}}) T_{n,i-1,l}^{j+\frac{2}{3}} - K(T_{n,i-1,l}^{j+\frac{2}{3}}) T_{nil}^{j+\frac{2}{3}} - K(T_{nil}^{j+\frac{2}{3}}) T_{nil}^{j+\frac{2}{3}}) \equiv \Psi_{nil}^{j+\frac{2}{3}}; \quad (2.2) \end{aligned}$$

z -направление:

$$\begin{aligned} T_{nil}^{j+1} &= T_{nil}^{j+\frac{2}{3}} + e_{nil} (K(T_{ni,l+1}^{j+1}) T_{ni,l+1}^{j+1} + K(T_{nil}^{j+1}) T_{ni,l+1}^{j+1} - K(T_{ni,l+1}^{j+1}) T_{nil}^{j+1} - K(T_{nil}^{j+1}) T_{nil}^{j+1}) \\ &+ f_{nil} (K(T_{ni,l-1}^{j+1}) T_{ni,l-1}^{j+1} + K(T_{nil}^{j+1}) T_{ni,l-1}^{j+1} - K(T_{ni,l-1}^{j+1}) T_{nil}^{j+1} - K(T_{nil}^{j+1}) T_{nil}^{j+1}) \equiv \Psi_{nil}^{j+1}, \quad (2.3) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} a_{nil} &= \frac{\tau}{6 C_{nil} h_n^x (h_n^x + h_{n-1}^x)}, & b_{nil} &= \frac{\tau}{6 C_{nil} h_{n-1}^x (h_n^x + h_{n-1}^x)}, & c_{nil} &= \frac{\tau}{6 C_{nil} h_i^y (h_i^y + h_{i-1}^y)}, \\ d_{nil} &= \frac{\tau}{6 C_{nil} h_{i-1}^y (h_i^y + h_{i-1}^y)}, & e_{nil} &= \frac{\tau}{6 C_{nil} h_l^z (h_l^z + h_{l-1}^z)}, & f_{nil} &= \frac{\tau}{6 C_{nil} h_{l-1}^z (h_l^z + h_{l-1}^z)} \end{aligned}$$

($n = \overline{1, N-1}$, $i = \overline{1, I-1}$, $l = \overline{1, L-1}$, $j = \overline{0, J-1}$).

Целевой функционал (1.4) аппроксимировался функцией $F(k_0, k_1, \dots, k_M)$ конечного числа переменных следующим образом:

$$\begin{aligned} \Phi(K(T)) &= \int_0^{\Theta} \iint_{\Gamma} \beta(s(\Gamma)) \left[\left(-K(T(s, t)) \frac{\partial T(s, t)}{\partial \bar{n}} \right) \Big|_{s \in \Gamma} - P(s(\Gamma), t) \right]^2 d\Gamma dt + \varepsilon \int_a^b (K'(T))^2 dT \\ &\cong F = \sum_{j=1}^J \left[\sum_{l=1}^{L-1} \sum_{i=1}^{I-1} (\beta_{0il} (H_{0il}^j - P_{0il}^j)^2 + \beta_{Nil} (-H_{Nil}^j - P_{Nil}^j)^2) h_i^y h_i^z \right. \\ &\quad \left. + \sum_{l=1}^{L-1} \sum_{n=1}^{N-1} (\beta_{n0l} (H_{n0l}^j - P_{n0l}^j)^2 + \beta_{nIl} (-H_{nIl}^j - P_{nIl}^j)^2) h_n^x h_l^z \right. \\ &\quad \left. + \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{i=1}^{I-1} (\beta_{ni0} (H_{ni0}^j - P_{ni0}^j)^2 + \beta_{niL} (-H_{niL}^j - P_{niL}^j)^2) h_n^x h_i^y \right] \tau^j + \varepsilon \sum_{s=1}^M \frac{(k_s - k_{s-1})^2}{(\tilde{T}_s - \tilde{T}_{s-1})}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Здесь через H_{0il}^j , $-H_{Nil}^j$, H_{n0l}^j , $-H_{nIl}^j$, H_{ni0}^j и $-H_{niL}^j$ обозначены тепловые потоки, вычисленные на соответствующих гранях параллелепипеда Γ_x^- , Γ_x^+ , Γ_y^- , Γ_y^+ , Γ_z^- и Γ_z^+ . Например,

$$H_{0il}^j = \frac{K(T_{1il}^j) - K(T_{0il}^j)}{2} \frac{T_{1il}^j - T_{0il}}{h_0^x}, \quad H_{Nil}^j = \frac{K(T_{Nil}^j) - K(T_{N-1,il}^j)}{2} \frac{T_{Nil}^j - T_{N-1,il}}{h_{N-1}^x}. \quad (2.5)$$

Далее для простоты изложения предположим, что “экспериментальные” тепловые потоки заданы только на двух гранях: при $x = 0$ и $x = R$ ($\beta_{0il} = 1$ и $\beta_{Nil} = 1$ для всех $i = \overline{1, I-1}$, $l = \overline{1, L-1}$, а в остальных точках весовая функция равна нулю). Заметим, что в этом случае целевая функция (2.4) представляет собой сумму D квадратов скалярных функций, т. е. $\Phi(K(T)) \approx F = \sum_{d=1}^D U_d^2$, где $D = 2(L-1)(I-1)J + M$. Скалярные функции U_d , $d = \overline{1, D}$, позволяют построить вектор-функцию $\bar{U} = \{U_d\}_{n=1}^D$ с компонентами

$$U_d = \begin{cases} \tilde{U}_d^{0ilj} = (H_{0il}^j - P_{0il}^j) \sqrt{\beta_{0il} h_i^y h_l^z \tau^j}, & d = \overline{1, 2, \dots, (L-1)(I-1)J}, \\ \tilde{U}_d^{Nilj} = (-H_{Nil}^j - P_{Nil}^j) \sqrt{\beta_{Nil} h_i^y h_l^z \tau^j}, & d = \overline{(L-1)(I-1)J + 1, \dots, 2(L-1)(I-1)J}, \\ \tilde{U}_d^s = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\tilde{T}_s - \tilde{T}_{s-1}}} (k_s - k_{s-1}), & d = \overline{2(L-1)(I-1)J + 1, \dots, 2(L-1)(I-1)J + M}. \end{cases}$$

Для решения оптимизационной задачи с помощью метода Левенберга — Марквардта необходимо построить якобиан $\Omega = \{\Omega_{dm}\}$ вектор-функции \bar{U} . Матрица Ω состоит из D строк и $(M+1)$ столбцов. Каждая d -я строка состоит из $(M+1)$ элементов: $\Omega_{dm} = \partial U_d / \partial k_m$, $d = \overline{1, D}$, $m = \overline{0, M}$. Градиент $\Omega_{dm} = \partial U_d / \partial k_m$ каждой функции U_d относительно компонент k_0, k_1, \dots, k_M найдем с помощью БАД-методологии.

Отметим, что функции U_d , $d = \overline{1, D}$, — это сложные функции, которые в общем случае зависят от вектора управления $(k_0, k_1, \dots, k_M)^T$ и от фазовых переменных T_{nil}^j . Компоненты вектора управления $\{k_m\}_{m=0}^M$ и фазовые переменные T_{nil}^j ($n = \overline{0, N}$, $i = \overline{0, I}$, $l = \overline{0, L}$, $j = \overline{0, J}$) связаны между собой системой уравнений (2.1)–(2.3). Дискретная сопряженная задача, построенная на основе БАД-методологии, базируется на выбранной аппроксимации (2.1)–(2.3) прямой задачи и согласована с ней.

Сопряженные задачи для вычисления сопряженных переменных p_{nil}^j ($n = \overline{1, N-1}$, $i = \overline{1, I-1}$, $l = \overline{1, L-1}$, $j = \overline{1, J}$), соответствующие целевым функциям U_d , $d = \overline{1, D}$, совпадают по форме с той, которая представлена в [10]. Основные матрицы всех используемых дискретных сопряженных задач одинаковы (и для вычисления градиента целевой функции (2.4), и

для вычисления всех элементов якобиана $\Omega = \{\Omega_{dm}\}$ вектор-функции \bar{U}). Единственное отличие заключается в том, что при вычислении якобиана производные $\partial F/\partial T_{nil}^j$ должны быть заменены производными $\partial U_d/\partial T_{nil}^j$, которые рассчитываются с помощью следующих соотношений:

для всех $d = \overline{1, 2, \dots, (L-1)(I-1)J}$

$$\frac{\partial U_d}{\partial T_{0qr}^g} = \frac{\partial \tilde{U}_d^{oilj}}{\partial T_{0qr}^g} = \begin{cases} \frac{[K'(T_{0qr}^g)(T_{1qr}^g - T_{0qr}^g) - (K(T_{0qr}^g) + K(T_{1qr}^g))] \sqrt{\beta_{0qr} h_q^x h_r^y \tau^g}}{2h_0^x}, & q = i, r = l, g = j, \\ 0, & \text{иначе,} \end{cases}$$

$$\frac{\partial U_d}{\partial T_{1qr}^g} = \frac{\partial \tilde{U}_d^{oilj}}{\partial T_{1qr}^g} = \begin{cases} \frac{[K'(T_{1qr}^g)(T_{1qr}^g - T_{0qr}^g) + (K(T_{0qr}^g) + K(T_{1qr}^g))] \sqrt{\beta_{1qr} h_q^x h_r^y \tau^g}}{2h_0^x}, & q = i, r = l, g = j, \\ 0, & \text{иначе,} \end{cases}$$

$$\frac{\partial U_d}{\partial T_{nqr}^g} = \frac{\partial \tilde{U}_d^{oilj}}{\partial T_{nqr}^g} = 0 \quad \text{для всех } n = \overline{2, N};$$

для всех $d = \overline{(L-1)(I-1)J + 1, \dots, 2(L-1)(I-1)J}$

$$\frac{\partial U_d}{\partial T_{N-1,qr}^g} = \frac{\partial \tilde{U}_d^{Nilj}}{\partial T_{N-1,qr}^g}$$

$$= \begin{cases} \frac{[K'(T_{N-1,qr}^g)(T_{N-1,qr}^g - T_{Nqr}^g) + K(T_{Nqr}^g) + K(T_{N-1,qr}^g)] \sqrt{\beta_{N-1,qr} h_q^x h_r^y \tau^g}}{2h_{N-1}^x}, & q = i, r = l, g = j, \\ 0, & \text{иначе,} \end{cases}$$

$$\frac{\partial U_d}{\partial T_{Nqr}^g} = \frac{\partial \tilde{U}_d^{Nilj}}{\partial T_{Nqr}^g} = \begin{cases} \frac{[K'(T_{Nqr}^g)(T_{N-1,qr}^g - T_{Nqr}^g) - K(T_{Nqr}^g) - K(T_{N-1,qr}^g)] \sqrt{\beta_{Nqr} h_q^x h_r^y \tau^g}}{2h_{N-1}^x}, & q = i, r = l, g = j, \\ 0, & \text{иначе,} \end{cases}$$

$$\frac{\partial U_d}{\partial T_{nqr}^g} = \frac{\partial \tilde{U}_d^{Nilj}}{\partial T_{nqr}^g} = 0 \quad \text{для всех } n = \overline{0, N-2};$$

для всех $d = \overline{2(L-1)(I-1)J + 1, \dots, 2(L-1)(I-1)J + M}$

$$\frac{\partial U_d}{\partial T_{nil}^j} = \frac{\partial \tilde{U}_d^s}{\partial T_{nil}^j} = 0.$$

Следует отметить, что сопряженные переменные p_{nil}^j различны для каждого $d = \overline{1, \bar{D}}$, и соответствующая сопряженная задача решается в каждом случае отдельно для всех $d = \overline{1, \bar{D}}$. Компоненты градиентов функций U_d , $d = \overline{1, \bar{D}}$, относительно компонент $\{k_m\}_{m=0}^M$ вычисляются по формулам

для всех $d = \overline{1, 2, \dots, (L-1)(I-1)J}$

$$\frac{\partial U_d}{\partial k_m} = \frac{\partial \tilde{U}_d^{oilj}}{\partial k_m} = \Lambda_m \sqrt{\beta_{oil} h_i^y h_l^z \tau^j} + \sqrt{\beta_{oil} h_i^y h_l^z \tau^j} \sum_{j=1}^J \sum_{l=1}^{L-1} \sum_{i=1}^{I-1} \left(\frac{T_{1il}^j - T_{0il}^j}{h_0^x} \right); \quad (2.6)$$

для всех $d = \overline{(L-1)(I-1)J + 1, \dots, 2(L-1)(I-1)J}$

$$\frac{\partial U_d}{\partial k_m} = \frac{\partial \tilde{U}_d^{Nilj}}{\partial k_m} = \Lambda_m \sqrt{\beta_{Nil} h_i^y h_l^z \tau^j} + \sqrt{\beta_{Nil} h_i^y h_l^z \tau^j} \sum_{j=1}^J \sum_{l=1}^{L-1} \sum_{i=1}^{I-1} \left(\frac{T_{N-1,il}^j - T_{Nil}^j}{h_{N-1}^x} \right); \quad (2.7)$$

для всех $d = \overline{2(L-1)(I-1)J + 1, \dots, 2(L-1)(I-1)J + M}$

$$\frac{\partial U_d}{\partial k_m} = \frac{\partial \tilde{U}_d^s}{\partial k_m} = \begin{cases} \sqrt{\frac{\varepsilon}{\tilde{T}_m - \tilde{T}_{m-1}}}, & s = m, s = \overline{1, M}, m = \overline{1, M}, \\ 0, & \text{иначе,} \end{cases} \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial U_d}{\partial k_{m-1}} = \frac{\partial \tilde{U}_d^s}{\partial k_{m-1}} = \begin{cases} -\sqrt{\frac{\varepsilon}{\tilde{T}_m - \tilde{T}_{m-1}}}, & s = m, \quad s = \overline{1, M}, \quad m = \overline{1, M}, \\ 0, & \text{иначе;} \end{cases} \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned} \Lambda_m &= \sum_{g=0}^J \sum_{r=0}^L \sum_{q=0}^I \sum_{s=0}^N \left(X_{rqs}^g \frac{\partial K(T_{rqs}^g)}{\partial k_m} \right) + \sum_{g=0}^{J-1} \sum_{r=0}^L \sum_{q=0}^I \sum_{s=0}^N \left(X_{rqs}^{g+\frac{1}{3}} \frac{\partial K(T_{rqs}^{g+\frac{1}{3}})}{\partial k_m} + X_{rqs}^{g+\frac{2}{3}} \frac{\partial K(T_{rqs}^{g+\frac{2}{3}})}{\partial k_m} \right), \\ X_{rqs}^g &= \sum_{j=1}^J \sum_{l=1}^{L-1} \sum_{i=1}^{I-1} \sum_{n=1}^{N-1} \left(\frac{\partial \Psi_{nil}^j}{\partial K(T_{rqs}^g)} p_{nil}^j + \frac{\partial \Psi_{nil}^{j-\frac{1}{3}}}{\partial K(T_{rqs}^g)} p_{nil}^{j-\frac{1}{3}} + \frac{\partial \Psi_{nil}^{j-\frac{2}{3}}}{\partial K(T_{rqs}^g)} p_{nil}^{j-\frac{2}{3}} \right) \\ &= (e_{rqs}(T_{rq,s+1}^g - T_{rqs}^g) + f_{rqs}(T_{rq,s-1}^g - T_{rqs}^g)) p_{rqs}^g + e_{rq,s-1}(T_{rqs}^g - T_{rq,s-1}^g) p_{rq,s-1}^g \\ &\quad + f_{rq,s+1}(T_{rqs}^g - T_{rq,s+1}^g) p_{rq,s+1}^g, \\ X_{rqs}^{g+\frac{1}{3}} &= \sum_{j=1}^J \sum_{l=1}^{L-1} \sum_{i=1}^{I-1} \sum_{n=1}^{N-1} \left(\frac{\partial \Psi_{nil}^j}{\partial K(T_{rqs}^{g+\frac{1}{3}})} p_{nil}^j + \frac{\partial \Psi_{nil}^{j-\frac{1}{3}}}{\partial K(T_{rqs}^{g+\frac{1}{3}})} p_{nil}^{j-\frac{1}{3}} + \frac{\partial \Psi_{nil}^{j-\frac{2}{3}}}{\partial K(T_{rqs}^{g+\frac{1}{3}})} p_{nil}^{j-\frac{2}{3}} \right) \\ &= (a_{rqs}(T_{r+1,q}^{g+\frac{1}{3}} - T_{rqs}^{g+\frac{1}{3}}) + b_{rqs}(T_{r-1,q}^{g+\frac{1}{3}} - T_{rqs}^{g+\frac{1}{3}})) p_{rqs}^{g+\frac{1}{3}} + a_{r-1,q}(T_{rqs}^{g+\frac{1}{3}} - T_{r-1,q}^{g+\frac{1}{3}}) p_{r-1,q}^{g+\frac{1}{3}} \\ &\quad + b_{r+1,q}(T_{rqs}^{g+\frac{1}{3}} - T_{r+1,q}^{g+\frac{1}{3}}) p_{r+1,q}^{g+\frac{1}{3}}, \\ X_{rqs}^{g+\frac{2}{3}} &= \sum_{j=1}^J \sum_{l=1}^{L-1} \sum_{i=1}^{I-1} \sum_{n=1}^{N-1} \left(\frac{\partial \Psi_{nil}^j}{\partial K(T_{rqs}^{g+\frac{2}{3}})} p_{nil}^j + \frac{\partial \Psi_{nil}^{j-\frac{1}{3}}}{\partial K(T_{rqs}^{g+\frac{2}{3}})} p_{nil}^{j-\frac{1}{3}} + \frac{\partial \Psi_{nil}^{j-\frac{2}{3}}}{\partial K(T_{rqs}^{g+\frac{2}{3}})} p_{nil}^{j-\frac{2}{3}} \right) \\ &= (c_{rqs}(T_{r,q+1,s}^{g+\frac{2}{3}} - T_{rqs}^{g+\frac{2}{3}}) + d_{rqs}(T_{r,q-1,s}^{g+\frac{2}{3}} - T_{rqs}^{g+\frac{2}{3}})) p_{rqs}^{g+\frac{2}{3}} + c_{r,q-1,s}(T_{rqs}^{g+\frac{2}{3}} - T_{r,q-1,s}^{g+\frac{2}{3}}) p_{r,q-1,s}^{g+\frac{2}{3}} \\ &\quad + d_{r,q+1,s}(T_{rqs}^{g+\frac{2}{3}} - T_{r,q+1,s}^{g+\frac{2}{3}}) p_{r,q+1,s}^{g+\frac{2}{3}}. \end{aligned}$$

Формулы (2.6)–(2.9) для вычисления градиентов функций U_d , $d = \overline{1, D}$, являются точными для выбранной дискретизации задачи оптимального управления, так как они были выведены на основе формул быстрого автоматического дифференцирования. Таким образом, имеет место следующее важное для алгоритма минимизации

Утверждение 1. *Элементы матрицы Якоби $\Omega = \{\Omega_{dm}\}$ ($\Omega_{dm} = \partial U_d / \partial k_m$) вектор-функции \overline{U} , рассчитанные по формулам (2.6)–(2.9), вычисляются с машинной точностью.*

Если необходимо учитывать тепловые потоки и (или) на других гранях параллелепипеда, тогда в вектор-функцию \overline{U} необходимо добавить соответствующие им компоненты, а формулы для вычисления производных этих компонент выводятся подобным образом.

В работе [12] сформулировано и обосновано утверждение о том, что вычисление градиента функции многих переменных с помощью методологии быстрого автоматического дифференцирования требует времени, не превосходящего утроенного времени вычисления значения самой функции. В [12] доказательство этого утверждения основывается на том, что вычисление любой функции может быть представлено в виде определенного многошагового процесса.

В предлагаемом нами методе вектор-функция \overline{U} — также некоторая функция, которая вычисляется в результате использования многошагового процесса (дискретная прямая задача). Следовательно, в том случае, когда для решения прямой задачи используется некоторый безытерационный процесс, время, требуемое для определения градиента скалярной функции U_d , $d = \overline{1, D}$, с помощью БАД-методологии, не превышает утроенного времени вычисления значения самой функции.

При решении нелинейных задач используются, как правило, итерационные схемы, требующие выполнения не менее двух итераций. Таким образом, количество операций при решении прямой задачи удваивается, а количество операций, которое требуется для вычисления

градиента, не меняется. Поэтому можно утверждать, что время, требуемое для определения градиента функции U_d по компонентам вектора-управления $\{k_m\}_{m=0}^M$, не превосходит времени, требуемого для вычисления двух значений этой функции. Таким образом, обосновано следующее

Утверждение 2. Пусть V_U — время, требуемое для вычисления значения функционала. Тогда машинное время V_g , требуемое для определения всех элементов матрицы Якоби $\Omega = \{\Omega_{dm}\}$ ($d = \overline{1, D}$, $m = \overline{0, M}$) с помощью формул (2.6)–(2.9), не превосходит значения $2DV_U$, т. е. $V_g/V_U \leq 2D$.

Анализ результатов решения огромного количества тестовых примеров показал правильность этого утверждения. Отметим также, что при вычислении элементов матрицы Якоби с помощью метода конечных разностей потребовалось бы решение $D(M+2)$ прямых задач. Кроме того, это все-таки приближенный метод вычисления производных, и с его помощью можно получить лишь приближенные значения элементов якобиана.

Согласно алгоритму Левенберга — Марквардта вектор управления $\{k_m\}_{m=0}^M$ меняется на каждой последующей итерации ($s+1$) по формуле: $\bar{k}_{s+1} = \bar{k}_s + \bar{r}_s$. Направление спуска \bar{r}_s определяется из следующей системы линейных алгебраических уравнений:

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

Были проведены исследования, связанные с выбором констант λ_s на каждом этапе спуска. Для рассмотренных здесь обратных задач они рассчитывались по формуле

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

где α — некоторая неотрицательная константа, которая выбирается для каждого примера отдельно, и от этого выбора зависит скорость сходимости алгоритма.

3. Результаты численных расчетов

В настоящей работе “экспериментальный” поток тепла $P(x, y, z, t)$ на поверхности параллелепипеда выбирался следующим образом: решалась прямая начально-краевая задача (1.1)–(1.3) с заданным коэффициентом теплопроводности, определялось поле температур в объекте, а затем по нему рассчитывались потоки с помощью формул, аналогичных формулам (2.5).

Результаты исследований, проведенных в работах [10; 11], показали, что в трехмерном случае получить решение обратной задачи существенно сложнее, чем в одномерных и двумерных случаях. Связано это не только с увеличивающимися затратами ресурсов компьютера, но и с особенностями распределения “экспериментальных” данных. Зависимость возможности идентифицировать коэффициент теплопроводности от плотности распределения экспериментальных данных проявилась в трехмерном случае с особой силой. В каждом конкретном случае необходимо проанализировать распределение “экспериментальных” данных по интервалам интересующего нас отрезка температур.

Для анализа распределения экспериментальных данных вводится функция $W_*(T)$ — относительная мера той подобласти области $Q \times (0, \Theta)$, температура в точках которой меньше T . Через $W(T)$ обозначим производную функции $W_*(T)$ по переменной T .

Бывают случаи, когда на некоторых участках отрезка $[a, b]$ слишком мало данных, необходимых для идентификации коэффициента теплопроводности. В процессе работы предложенного алгоритма это выражается, например, в том, что некоторые компоненты градиента принимают практически нулевые значения (с машинной точностью). Отметим, что этот факт проявляется и сильно затрудняет сходимость итерационного процесса при росте количества

разбиений отрезка температур. С учетом того, что коэффициент теплопроводности может нелинейно зависеть от температуры, нас интересует именно решение задачи при большом количестве разбиений отрезка температур.

Для ускорения итерационного процесса в численных экспериментах использовался подход, основанный на последовательном увеличении числа разбиений отрезка $[a, b]$. Начинать процесс желательно с $M = 1$. После получения оптимального решения его следует использовать в качестве начального приближения для варианта с $M = 2$. Получив оптимальное решение для $M = 2$, использовать его в качестве начального приближения для $M = 4$, и так далее. При этом в начале процесса, пока функционал падает на несколько порядков, используется градиентный метод, так как известно, что методы второго порядка более “капризны” в выборе начального приближения.

Исследования, проведенные в работе [11], позволили сделать заключение, что можно использовать “экспериментальные” тепловые потоки на минимальном количестве граней параллелепипеда, для которых сохраняется практически та же относительная плотность распределения данных, что и на всей поверхности объекта. Коэффициент теплопроводности будет при этом восстанавливаться с такой же точностью, однако оптимизационная задача решается гораздо быстрее. Анализ распределения “экспериментальных” данных всех приведенных ниже примеров показал, что относительная плотность распределения данных получается почти одинаковой в случае, когда в качестве “экспериментальных” данных используется поток тепла, вычисленный на всех гранях параллелепипеда (весовой параметр $\beta(s(\Gamma))$ равняется 1 во всех точках границы Γ объекта), и в случае, когда тепловой поток вычислен только на двух гранях параллелепипеда: при $x = 0$ и $x = R$ ($\beta_{0il} = 1$ и $\beta_{Nil} = 1$ для всех $i = \overline{1, I-1}$, $l = \overline{1, L-1}$, а в остальных точках весовая функция равна нулю). Поэтому во всех рассмотренных ниже примерах в качестве “экспериментальных” данных будет использован поток тепла, вычисленный только на указанных выше двух гранях параллелепипеда.

Выбранная в настоящей работе локально-одномерная схема аппроксимации уравнения теплопроводности является устойчивой и позволяет работать с достаточно большим шагом по времени. Тем не менее для каждой используемой пространственной сетки необходимо проводить исследования, касающиеся выбора сетки по времени.

Были проведены исследования, касающиеся устойчивости предлагаемого алгоритма восстановления коэффициента теплопроводности. Они показали, что при использовании функционала “поток” небольшие отклонения (до 10%) в “экспериментальных” данных приводят к погрешностям в решении того же порядка ($\approx 2-5\%$). Для получения устойчивого решения регуляризатор необходимо вводить лишь при больших отклонениях в “экспериментальных” данных. В отмеченных здесь исследованиях предполагалось, что параметр ε в целевом функционале (1.4) равнялся нулю.

Сравнительный анализ результатов расчета задачи с использованием градиентного метода и метода Левенберга — Марквардта представлен для четырех примеров. Все приведенные здесь примеры сильно отличаются друг от друга. Тем не менее на первом этапе решения оптимизационной задачи в качестве начального приближения для всех примеров была выбрана функция $K_{ini}(T) = 5.0$. Результаты численных расчетов получены при использовании равномерной пространственной сетки с параметрами $N = I = L = 25$. Количество интервалов разбиения отрезка $[0, \Theta]$ по времени для третьего примера $J = 36$. Для всех остальных примеров $J = 25$.

Для оценки точности получаемых численных решений обратной задачи использовались те же два критерия, которые указаны в работе [11]:

$$\varepsilon_1 = \max_{0 \leq m \leq M} \frac{|K_{opt}(\tilde{T}_m) - K(\tilde{T}_m)|}{K^*}, \quad \varepsilon_2 = \frac{1}{K^*} \sqrt{\sum_{m=0}^M \frac{(K_{opt}(\tilde{T}_m) - K(\tilde{T}_m))^2}{M+1}},$$

где $K(\tilde{T}_m)$ — значения аналитического коэффициента теплопроводности, вычисленные в опор-

ных точках отрезка температур, $K_{opt}(\tilde{T}_m)$ — значения коэффициента теплопроводности, полученного в результате решения оптимизационной задачи, а K^* — некоторое характерное значение функции $K(T)$. В работе полагалось, что $K^* = [\sum_{m=0}^M K(\tilde{T}_m)] / (M + 1)$.

Пример 1. Рассматривается задача нахождения коэффициента теплопроводности вещества при следующих входных данных: в качестве начальной функции $w_0(x, y, z)$ и граничной функции $w_\Gamma(x, y, z, t)$ выбираются следы функции

$$\Lambda(x, y, z, t) = x + y + z + 3t + 0.5 \quad (3.1)$$

на параболической границе области $Q \times (0, \Theta) = (0, 1) \times (0, 1) \times (0, 1) \times (0, 1)$. В этом случае функция (3.1) является решением смешанной задачи (1.1)–(1.3) при $C(x) = 1$ и $K(T) = T$. Температура на параболической границе рассматриваемой области изменяется от $a = 0.5$ до $b = 6.5$.

На рис. 1 представлено распределение функции $W(T)$ вдоль отрезка $[0.5, 6.5]$. Оно напоминает нормальное распределение с центром в точке $T = 3.5$. Отрезку температур $T \in [2.5, 5.0]$ соответствует основное количество “экспериментальных” данных, а в окрестности концов отрезка этих данных сравнительно мало.

Отметим, что если количество разбиений отрезка температур невелико ($M \leq 10$), то и градиентный метод, и метод Левенберга — Марквардта дают решение задачи за сравнительно небольшое время. Далее, в силу линейной зависимости искомого коэффициента теплопроводности от температуры описанный выше переход к большим значениям M не представляет в этом случае трудностей, и искомый коэффициент восстанавливается с машинной точностью.

Совсем по-другому протекает итерационный процесс, если оптимизационный метод запускается с начального приближения сразу для большого количества разбиений отрезка температур. Приведем результаты численных расчетов для случая, когда количество разбиений отрезка $[0.5, 6.5]$ равно 25. Целевой функционал на начальном приближении $F_0 = 6.4253$.

При решении задачи с использованием градиентного метода требовалось около 250000 итераций. Целевой функционал уменьшился до $F_{opt} = 1.4272 \cdot 10^{-9}$, значение градиента функционала на оптимальном управлении достигло значения $1.7554 \cdot 10^{-9}$ в норме C . Первая компонента вектора управления на протяжении всего итерационного процесса почти не изменилась, т. е. она осталась практически такой же, что и у начального приближения. На остальной части отрезка температур (на подотрезке $[0.74, 6.5]$) отклонение коэффициента теплопроводности, полученного в результате решения задачи с помощью градиентного метода, от его аналитического значения $K(T) = T$ составило $\varepsilon_1 = 5.4888 \cdot 10^{-4}$ и $\varepsilon_2 = 3.6693 \cdot 10^{-6}$ соответственно.

При решении задачи с помощью метода Левенберга — Марквардта потребовалось всего 7 итераций. В этом случае задача решалась в 33 раза быстрее по времени. Константа α , которая фигурирует в методе Левенберга — Марквардта, равнялась 0.001. Целевой функционал уменьшился до $F_{opt} = 8.2568 \cdot 10^{-26}$, значение градиента на оптимальном управлении достигло

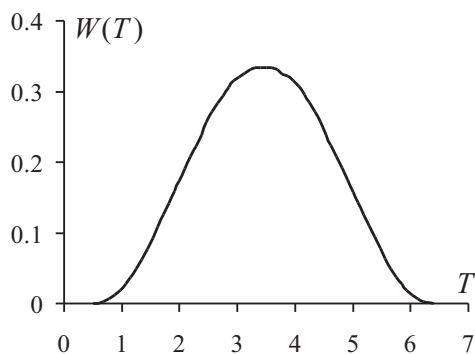


Рис. 1.

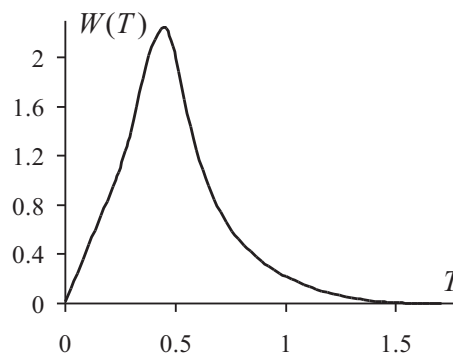


Рис. 2.

значения $3.6729 \cdot 10^{-14}$ в норме C . Все компоненты коэффициента теплопроводности восстановились с высокой точностью: $\varepsilon_1 = 1.4737 \cdot 10^{-11}$ и $\varepsilon_2 = 7.1876 \cdot 10^{-14}$ на всем отрезке $[0.5, 6.5]$.

Пример 2. Рассматривается задача нахождения коэффициента теплопроводности при следующих входных данных: в качестве начальной функции $w_0(x, y, z)$ и граничной функции $w_\Gamma(x, y, z, t)$ выбираются следы функции

$$\Lambda(x, y, z, t) = \sqrt{\frac{x^2 + y^2 + z^2}{9 - 8t}} \quad (3.2)$$

на параболической границе области $Q \times (0, \Theta) = (0, 1) \times (0, 1) \times (0, 1) \times (0, 1)$. Функция (3.2) является в этом случае решением смешанной задачи (1.1)–(1.3) при $C(x) = 1$ и $K(T) = T^2$. Температура на параболической границе рассматриваемой области изменяется от $a = 0.0$ до $b = 1.732$.

На рис. 2 представлено распределение “экспериментальных” данных в виде зависимости функции $W(T)$ от температуры. Анализ этого распределения показывает, что правому концу отрезка $[0.0, 1.732]$ соответствует слишком мало “экспериментальных” данных. Поэтому можно предположить, что там возникнут трудности с восстановлением коэффициента теплопроводности. Проведенные расчеты подтвердили это предположение.

В рассматриваемом примере метод Левенберга — Марквардта расходился, с какого бы начального приближения мы ни начинали расчет. Поэтому на первом этапе задача решалась с помощью градиентного метода последовательно для $M = 1, M = 2, \dots, M = 16$ (разбиения интервала температур).

В силу того что на правом конце отрезка $[0.0, 1.732]$ слишком мало “экспериментальных” данных, при разбиении отрезка температур на 64 подотрезка ($M = 64$) последние компоненты градиента целевой функции практически равнялись нулю. Метод Левенберга — Марквардта при таком разбиении отрезка температур не работал (функционал практически не меняется). Градиентный метод также не приводил ни к каким изменениям в последних компонентах вектора управления. Там оставался лишь след от решения, полученного при $M = 16$. С учетом этого факта оптимизационная задача решалась лишь на первых 60 подотрезках, т. е. на отрезке температур $[0.0, 1.624]$.

В качестве начального приближения для дальнейшего итерационного процесса было выбрано решение, полученное при $M = 16$ на первых 15 интервалах. Для такого управления значение функционала $F_0 = 9.7098 \cdot 10^{-8}$, а $\varepsilon_1 = 2.8372 \cdot 10^{-3}$ и $\varepsilon_2 = 1.2722 \cdot 10^{-3}$.

Далее оптимизационная задача решалась и с помощью градиентного метода, и с помощью метода Левенберга — Марквардта. После осуществления 360000 итераций с помощью градиентного метода целевой функционал уменьшился до $F_{opt} = 3.5373 \cdot 10^{-15}$. При этом отклонение коэффициента теплопроводности от его аналитического значения $K(T) = T^2$ на отрезке $[0.0, 1.624]$ составило $\varepsilon_1 = 5.2283 \cdot 10^{-4}$ и $\varepsilon_2 = 7.4259 \cdot 10^{-7}$ соответственно.

При решении задачи с помощью метода Левенберга — Марквардта потребовалось всего 5 итераций. В этом случае задача решалась в 15 раз быстрее по времени. Константа α , которая фигурирует в методе Левенберга — Марквардта, равнялась 0.001. Целевой функционал уменьшился до $F_{opt} = 1.2363 \cdot 10^{-28}$. Коэффициент теплопроводности определился с точностью $\varepsilon_1 = 1.2226 \cdot 10^{-13}$ и $\varepsilon_2 = 2.8527 \cdot 10^{-14}$ соответственно.

Пример 3. Рассматривается задача нахождения коэффициента теплопроводности при следующих входных данных: в качестве начальной функции $w_0(x, y, z)$ и граничной функции $w_\Gamma(x, y, z, t)$ выбираются следы функции

$$\Lambda(x, y, z, t) = \frac{3}{1.8 \cdot (5 - x - y - z - 1.8t)} \quad (3.3)$$

на параболической границе области $Q \times (0, \Theta) = (0, 1) \times (0, 1) \times (0, 1) \times (0, 1)$. Функция (3.3) является решением смешанной задачи (1.1)–(1.3) при $C(x) = 1$ и $K(T) = 1/T$. Температура на параболической границе рассматриваемой области изменяется от $a = 0.333$ до $b = 8.333$.

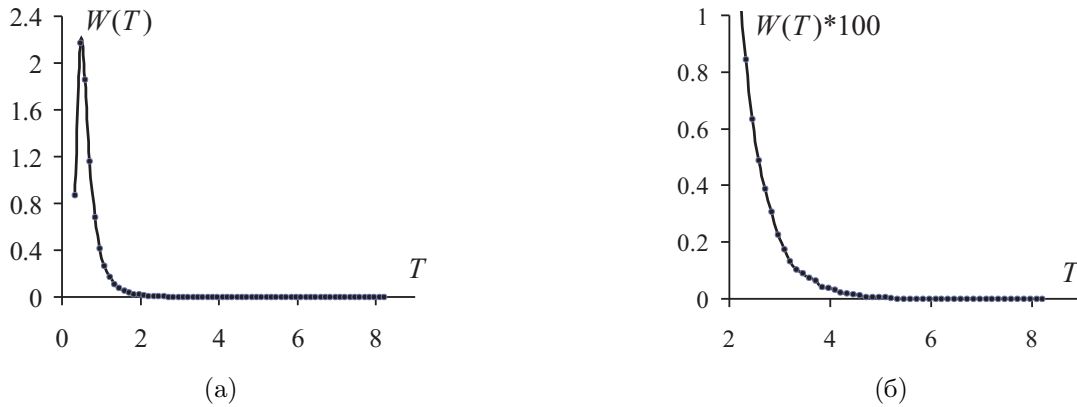


Рис. 3.

На рис. 3(а) представлено распределение “экспериментальных” данных по отрезку температур $[0.333, 8.333]$ (функция $W(T)$), а на рис. 3(б) — фрагмент рисунка 3(а), который крупным планом показывает поведение функции $W(T)$ на правом конце отрезка. Анализируя представленный на этом рисунке график, нетрудно увидеть, что на правом конце отрезка практически нет “экспериментальных” данных. Как показали проведенные расчеты этого примера с помощью градиентного метода, коэффициент теплопроводности на подотрезке $[5.333, 8.333]$ не восстанавливался. При разбиении отрезка температур на $M = 64$ интервала на последних 24 подотрезках остается след от решения задачи при предыдущих разбиениях. Компоненты градиента функционала на этих интервалах практически равны нулю. Учитывая эти обстоятельства, сравнительный анализ градиентного метода и метода Левенберга — Марквардта разумно проводить, когда задача решается на первых 40 подотрезках температур, т. е. на отрезке $[0.333, 5.333]$.

В качестве начального приближения для сравнения итерационных процессов было выбрано полученное решение при $M = 32$ на первых 20 интервалах. При этом управлении значение функционала $F_0 = 2.3299 \cdot 10^{-4}$, а $\varepsilon_1 = 6.0983 \cdot 10^{-1}$ и $\varepsilon_2 = 1.6006 \cdot 10^{-2}$.

После осуществления 260000 итераций с помощью градиентного метода целевой функционал уменьшился до $F_{opt} = 9.8054 \cdot 10^{-13}$. При этом отклонение коэффициента теплопроводности от его аналитического значения $K(T) = 1/T$ на отрезке $[0.333, 5.333]$ составило $\varepsilon_1 = 1.3257 \cdot 10^{-3}$ и $\varepsilon_2 = 2.9061 \cdot 10^{-4}$ соответственно.

При решении задачи с помощью метода Левенберга — Марквардта потребовалось всего 4 итерации. В этом случае задача решалась в 7 раз быстрее по времени. Константа α , которая фигурирует в методе Левенберга — Марквардта, равнялась 10^{-6} . Целевой функционал уменьшился до $F_{opt} = 7.6730 \cdot 10^{-27}$. На отрезке $[0.333, 5.333]$ коэффициент теплопроводности определился с точностью $\varepsilon_1 = 1.0572 \cdot 10^{-10}$ и $\varepsilon_2 = 2.2153 \cdot 10^{-11}$.

Пример 4. Рассматривается задача нахождения коэффициента теплопроводности при следующих входных данных: в качестве начальной функции $w_0(x, y, z)$ и граничной функции $w_\Gamma(x, y, z, t)$ выбираются следы функции

$$\Lambda(x, y, z, t) = \sqrt{\frac{9(x+1)^2 + 20y^2 + 25z^2}{9-8t}}$$

на параболической границе области $Q \times (0, \Theta) = (0, 1) \times (0, 1) \times (0, 1) \times (0, 1)$. В качестве “экспериментальных” данных используется поток тепла, вычисленный по температурному полю, полученному в результате решения прямой задачи (1.1)–(1.3) при $C(x) = 1$ и с коэффициентом теплопроводности $K(T) = k(T)$, где функция $k(T)$ определяется следующим равенством:

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

Анализ построенного таким образом температурного поля позволил определить диапазон изменения температуры: $a = 1$, $b = 9$.

На примере решения этой задачи мы продемонстрируем не только высокую эффективность применения метода Левенберга — Марквардта в окрестности получаемого решения вариационной задачи, но также покажем зависимость предложенного здесь алгоритма Левенберга — Марквардта от выбора коэффициента α .

На рис. 4 представлено распределение функции $W(T)$ вдоль отрезка $[1.0, 9.0]$. В данном случае практически нет “экспериментальных” данных лишь на небольшом подотрезке на правом конце отрезка температур.

Учитывая этот факт, мы проведем сравнительный анализ методов для случая, когда задача решается на первых 60 подотрезках разбиения отрезка $[1.0, 9.0]$ на 64 интервала, т. е. на отрезке $[1.0, 8.5]$.

В качестве начального приближения для сравнения итерационных процессов было выбрано решение, полученное с помощью градиентного метода при $M = 16$ на первых 15 интервалах. При этом управлении значение функционала $F_0 = 5.5967 \cdot 10^{-4}$, а $\varepsilon_1 = 1.1431 \cdot 10^{-2}$ и $\varepsilon_2 = 3.2073 \cdot 10^{-3}$.

При решении задачи с использованием градиентного метода требовалось около 32000 итераций. Целевой функционал уменьшился до $F_{opt} = 4.7562 \cdot 10^{-21}$. Отклонение коэффициента теплопроводности, полученного в результате решения задачи с помощью градиентного метода, от его аналитического значения $K(T) = k(T)$ на отрезке $[1.0, 8.5]$ составило $\varepsilon_1 = 8.0947 \cdot 10^{-10}$ и $\varepsilon_2 = 1.6921 \cdot 10^{-10}$.

В том случае, когда константа α , которая фигурирует в методе Левенберга — Марквардта, равнялась 0.001, для решения задачи с помощью этого метода потребовалось 6 итераций и примерно в 1.2 раза меньше времени, чем при решении задачи градиентным методом. Целевой функционал уменьшился до $F_{opt} = 2.3052 \cdot 10^{-25}$. Отклонение коэффициента теплопроводности от его аналитического значения $K(T) = k(T)$ на отрезке $[1.0, 8.5]$ составило $\varepsilon_1 = 6.0239 \cdot 10^{-13}$ и $\varepsilon_2 = 1.5537 \cdot 10^{-13}$.

Во втором случае константа α равнялась 10^{-6} . Для решения оптимизационной задачи с помощью метода Левенберга — Марквардта в этом случае потребовалось только 4 итерации и примерно в 1.8 раза меньше времени, чем при решении задачи градиентным методом. Целевой функционал уменьшился до $F_{opt} = 2.3504 \cdot 10^{-25}$. Отклонение коэффициента теплопроводности от его аналитического значения $K(T) = k(T)$ на отрезке $[1.0, 8.5]$ составило $\varepsilon_1 = 2.0703 \cdot 10^{-13}$ и $\varepsilon_2 = 4.7636 \cdot 10^{-14}$. Следовательно, решение этой задачи с константой $\alpha = 10^{-6}$ более выгодно, чем в случае использования константы $\alpha = 0.001$.

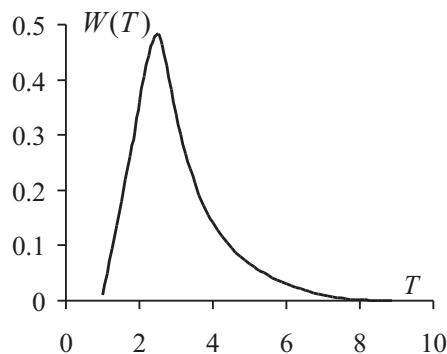


Рис. 4.

Заключение

Проведенные численные эксперименты показали, что качество восстановления коэффициента теплопроводности в трехмерном случае сильно зависит от распределения “экспериментальных” данных. Поэтому в каждом конкретном случае необходимо проанализировать распределение “экспериментальных” данных по интервалам интересующего нас отрезка температур.

Бывают случаи, когда на некоторых участках отрезка $[a, b]$ слишком мало данных, необходимых для идентификации коэффициента теплопроводности. Для большого количества разбиений отрезка температур это выражается в том, что некоторые компоненты градиента принимают практически нулевые значения (с машинной точностью). Метод Левенберга — Марквардта в этом случае плохо работает (функционал практически не меняется). Градиентный метод также не вносит никаких изменений в соответствующие компоненты вектора управления. Там остается лишь след от решения, полученного при небольшом разбиении отрезка температур. Учитывая этот факт, оптимизационную задачу имеет смысл решать лишь на том участке отрезка температур, где достаточно “экспериментальных” данных.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Коздоба Л. А., Круковский П. Г.** Методы решения обратных задач теплопереноса. Киев: Наукова Думка, 1982. 358 с.
2. **Алифанов О. М.** Обратные задачи теплообмена. М: Машиностроение, 1988. 280 с.
3. **Вабищевич П. Н., Денисенко А. Ю.** Численные методы решения коэффициентных обратных задач // Методы мат. моделирования и вычислительной диагностики. М.: Изд-во МГУ. 1990. С. 35–45.
4. **Самарский А. А., Вабищевич П. Н.** Разностные методы решения обратных задач математической физики // Фундаментальные основы мат. моделирования. М.: Наука. 1997. С. 5–97.
5. **Самарский А. А., Вабищевич П. Н.** Вычислительная теплопередача. М.: Едиториал УРСС, 2003. 784 с.
6. **Марчук Г. И.** Сопряженные уравнения и анализ сложных систем. М.: Наука, 1992. 334 с.
7. **Balazs Czel, Gyula Grof.** Inverse identification of temperature-dependent thermal conductivity via genetic algorithm with cost function-based rearrangement of genes // Int. J. Heat Mass Transf. 2012. Vol. 55, no. 15. P. 4254–4263. doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2012.03.067.
8. **Miao Cui, Kai Yang, Xiao-liang Xu, Sheng-dong Wang, Xiao-wei Gao.** A modified Levenberg–Marquardt algorithm for simultaneous estimation of multi-parameters of boundary heat flux by solving transient nonlinear inverse heat conduction problems // Int. J. Heat Mass Transf. 2016. Vol. 97. P. 908–916. doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.02.085.
9. **Matsevityi Yu. M., Alekhina S. V., Borukhov V. T., Zayats G. M., Kostikov A. O.** Identification of the thermal conductivity coefficient for quasi-stationary two-dimensional heat conduction equations // J. Eng. Phys. Thermophysics. 2017. Vol. 90, no. 6. P. 1295–1301. doi: 10.1007/s10891-017-1686-7.
10. **Албу А. Ф., Зубов В. И.** Идентификация коэффициента теплопроводности вещества в трехмерном случае путем решения соответствующей задачи оптимизации // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 2021. Т. 61, № 9. С. 1447–1463. doi: 10.31857/S0044466921090040.
11. **Албу А. Ф., Зубов В. И.** Определение коэффициента теплопроводности вещества по тепловому потоку на поверхности трехмерного тела // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 2021. Т. 61, № 10. С. 1594–1609. doi: 10.31857/S0044466921100033.
12. **Евтушенко Ю. Г.** Оптимизация и быстрое автоматическое дифференцирование. М.: Изд-во ВЦ им. А. А. Дородницына РАН, 2013. 144 с.

Поступила 17.05.2021

После доработки 10.06.2021

Принята к публикации 28.06.2021

Албу Алла Филипповна
д-р. физ.-мат. наук
ведущий науч. сотрудник
Федеральный исследовательский центр “Информатика и управление”
Российской академии наук
г. Москва
e-mail: alla.albu@mail.ru

Евтушенко Юрий Гаврилович
академик РАН
главный науч. сотрудник
Федеральный исследовательский центр “Информатика и управление”
Российской академии наук
г. Москва
e-mail: yuri-evtushenko@yandex.ru

Зубов Владимир Иванович
д-р. физ.-мат. наук
главный науч. сотрудник
Федеральный исследовательский центр “Информатика и управление”
Российской академии наук
г. Москва
e-mail: vladimir.zubov@mail.ru

REFERENCES

1. Kozdoba L.A., Krukovskii P.G. *Metody resheniya obratnykh zadach teploperenosa* [Methods for solving inverse heat transfer problems]. Kiev: Naukova Dumka Publ., 1982, 358 p.
2. Alifanov O.M. *Obratnye zadachi teploobmena* [Inverse heat transfer problems]. Moscow: Mashinostroenie Publ., 1988, 280 p. ISBN: 5-217-00134-8.
3. Vabishchevich P.N., Denisenko A.Yu. Numerical methods for solving the inverse coefficient problem. In: *Methods of mathematical modeling and computational diagnostics*, Moscow: MGU Publ., 1990, pp. 35–45 (in Russian).
4. Samarskii A.A., Vabishchevich P.N. Difference methods for solving inverse problems of mathematical physics. In: *Fundamental principles of mathematical modeling*, Moscow: Nauka Publ., 1997, pp. 5–97 (in Russian).
5. Samarskii A.A., Vabishchevich P.N. *Vychislitel'naya teploperedacha* [Computing heat transfer]. Moscow: Editorial URSS Publ., 2003, 784 p. ISBN: 5-354-00234-6.
6. Marchuk G.I. *Adjoint equations and analysis of complex systems*. Netherlands: Springer, 1995, 468 p. doi: 10.1007/978-94-017-0621-6. Original Russian text published in Marchuk G.I., *Sopryazhennye uravneniya i analiz slozhnykh sistem*, Moscow: Nauka Publ., 1992, 334 p.
7. Balazs Czel, Gyula Grof. Inverse identification of temperature-dependent thermal conductivity via genetic algorithm with cost function-based rearrangement of genes. *Int. J. Heat Mass Transf.*, 2012, vol. 55, no. 15, pp. 4254–4263. doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2012.03.067.
8. Miao Cui, Kai Yang, Xiao-liang Xu, Sheng-dong Wang, Xiao-wei Gao. A modified Levenberg–Marquardt algorithm for simultaneous estimation of multi-parameters of boundary heat flux by solving transient nonlinear inverse heat conduction problems. *Int. J. Heat Mass Transf.*, 2016, vol. 97, pp. 908–916. doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.02.085.
9. Matsevityi Yu.M., Alekhina S.V., Borukhov V.T., Zayats G.M., Kostikov A.O. Identification of the thermal conductivity coefficient for quasi-stationary two-dimensional heat conduction equations. *J. Eng. Phys. Thermophysics*, 2017, vol. 90, no. 6, pp. 1295–1301. doi: 10.1007/s10891-017-1686-7.
10. Albu A.F., Zubov V.I. Identification of the thermal conductivity coefficient in the three-dimensional case by solving a corresponding optimization problem. *Comput. Math. Math. Phys.*, 2021, vol. 61, no. 9, pp. 1416–1431. doi: 10.1134/S0965542521090037.

11. Albu A.F., Zubov V.I. Determination of the thermal conductivity from the heat flux on the surface of a three-dimensional body. *Comput. Math. Math. Phys.*, 2021, vol. 61, no. 10, pp. 1567–1581. doi: 10.1134/S096554252110002X.
12. Evtushenko Y.G. *Optimizatsiya i bystroie avtomaticheskoe differentsirovanie* [Optimization and fast automatic differentiation]. Moscow: Computing Center of RAS Publ., 2013, 144 p. ISBN: 978-5-91601-082-4.

Received May 10, 2021

Revised June 17, 2021

Accepted June 28, 2021

Funding Agency: This work was supported by the Russian Science Foundation (project no. 21-71-30005).

Alla Filippovna Albu, Dr. Phys.-Math. Sci., Federal Research Center “Computer Science and Control” of Russian Academy of Sciences, Moscow, 119333 Russia, e-mail: alla.albu@mail.ru.

Yury Gavrilovich Evtushenko, Academician RAS, Prof., Federal Research Center “Computer Science and Control” of Russian Academy of Sciences, Moscow, 119333 Russia, e-mail: yuri-evtushenko@yandex.ru.

Vladimir Ivanovich Zubov, Dr. Phys.-Math. Sci., Prof., Federal Research Center “Computer Science and Control” of Russian Academy of Sciences, Moscow, 119333 Russia, e-mail: vladimir.zubov@mail.ru.

Cite this article as: A. F. Albu, Yu. G. Evtushenko, V. I. Zubov. Application of second-order optimization methods for solving an inverse coefficient problem in the three-dimensional statement, *Trudy Instituta Matematiki i Mekhaniki UrO RAN*, 2021, vol. 27, no. 4, pp. 19–34.