

УДК 669.018.91(043)

В.К. Толстых, (д-р физ.-мат. наук, доц.)¹,
Н.А. Володин (канд. физ.-мат. наук, доц.)²,
В.Е. Бодряга (зав. лаб.)¹

Донецкий национальный университет¹
Институт информатики и искусственного интеллекта Донецкого
национального технического университета²
tvk@dongu.donetsk.ua, nvolodin@yandex.ru, nadom2009@rambler.ru

О ГРАДИЕНТНЫХ МЕТОДАХ И СОПРЯЖЁННЫХ ЗАДАЧАХ ПРИ ИДЕНТИФИКАЦИИ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ

Решается задача идентификации коэффициента температуропроводности непрерывнолитого стального цилиндрического слитка. Температуропроводность представляется полиномиальной зависимостью от температуры процесса с весовыми коэффициентами. Задача рассматривается как оптимизационная. Минимизация целевой функции осуществляется методом сопряженных градиентов. Рассматриваются методы поиска градиента функции с помощью сопряженной задачи и численного дифференцирования. Приводятся сравнительный анализ расчётов задачи идентификации для обоих методов.

Ключевые слова: идентификация, оптимизация, градиент, непрерывный слиток.

Вступление

При идентификации параметров в задачах теплофизики приходится численно минимизировать функционалы от состояния системы – критерии качества идентификации. Наиболее часто здесь используются градиентные алгоритмы [1, 2]. Если искомые параметры являются пространственными или временными функциями, то градиент критерия качества также является пространственно-временной функцией и находится через решение сопряжённой задачи, например, – [3,4]. Если искомые параметры являются функциями состояния системы, то их представляют различными рядами относительно состояния с множеством коэффициентов. Такие коэффициенты образуют вектор идентифицируемых параметров, и здесь градиент критерия качества превращается в *вектор* сопряжённого пространства, например, – [4]. При этом градиент для вектора искомым параметров может быть получен и без сопряжённой задачи, а численным дифференцированием критерия качества идентификации, как это было реализовано в [5].

Постановка задачі

Предлагаемая работа посвящена исследованию вопроса эффективности решения задач параметрической идентификации в теплофизических, возможно нелинейных, системах посредством расчёта градиента через решение сопряжённой задачи и непосредственным численным дифференцированием критерия качества идентификации.

В работе рассматривается проблема математического моделирования процессов затвердевания слитков, в частности, – в машинах непрерывного литья заготовок (МНЛЗ). Точность моделирования, в основном, определяется точностью задания параметров, входящих в уравнения конвекции и тепломассопереноса. Такие уравнения довольно громоздки, при численном решении требуют значительных ресурсов компьютеров и не гарантируют желаемой точности. Значительное снижение вычислительных затрат может быть достигнуто введением эффективных коэффициентов теплопроводности и диффузии, что позволяет отказаться от расчета уравнений конвекции и существенно снизить число определяемых параметров [2, 5]. Естественно, что достоверные значения этих параметров могут быть получены только из решения задач параметрической идентификации.

Математическая модель установившегося теплового процесса в цилиндрическом непрерывном слитке может быть представлена следующим квазилинейным параболическим уравнением [2]:

$$V \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r a \frac{\partial T}{\partial r} \right), \quad (r, z) \in \Sigma = [0, R] \times [0, Z], \quad (1)$$

$$\left. T \right|_{\substack{0 \leq r \leq R \\ z=0}} = T_0, \quad \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{\substack{r=0 \\ 0 < z < Z}} = 0,$$

$$\left. T \right|_{\substack{r=R \\ 0 \leq z \leq z_c}} = T_C, \quad a \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{\substack{r=R \\ z_c < z \leq Z}} = -\alpha' (T - T_v), \quad (2)$$

где V – скорость литья, T – температура слитка, a – эффективный коэффициент температуропроводности, R – эффективный радиус слитка, Z – длина вертикальной части МНЛЗ, T_C – температура слитка в зоне кристаллизатора, T_0 – температура заливаемого в установку металла, z_c – нижняя граница кристаллизатора, T_v – температура охладителя в зоне вторичного охлаждения (ЗВО), $\alpha' = \frac{\alpha}{c\rho}$, α – коэффициент теплоотдачи в

ЗВО, c – теплоемкость, ρ – плотность. На рис. 1 схематично изображена часть МНЛЗ с затвердевающим слитком.

Предложим, что все теплофизические параметры модели (1)-(2) заданы точно, за исключением эффективного коэффициента теплопроводности a .

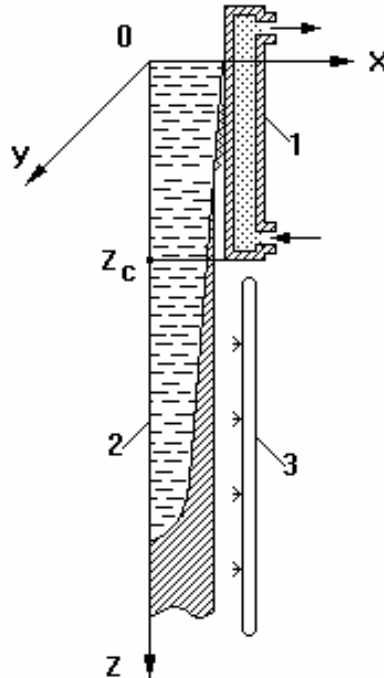


Рис. 1 Принципиальная схема затвердевающего слитка в МНЛЗ вертикального литья.

Здесь 1 – кристаллизатор, 2 – слиток, 3 – вторичный охладитель.

Качество идентификации эффективного коэффициента a будем оценивать интегральным расхождением модельной T и экспериментально наблюдаемой T_e температурами по объёму слитка:

$$J(a) = \int_0^R \int_0^Z [T(r,z) - T_e(r,z)]^2 2\pi r dr dz. \quad (3)$$

В работе [4] показано, что идентификация эффективного коэффициента теплопроводности a традиционными полиномами в общем случае невозможна, однако удастся получить хорошее решение при использовании полинома вида:

$$a \equiv a(T) = \sum_{i=0}^n \frac{1}{T_{sol}^i} c_i T^i \quad (4)$$

где $\frac{1}{T_{sol}^i}$ – коэффициент масштабирования, T_{sol} – температура затвердевания металла, c_i – коэффициенты полинома. При этом задача идентификации модели (1)-(2) сводится к задаче параметрической

идентификации вектора $\mathbf{c} = \{c_0, c_1, \dots, c_n\}$ размерности $n+1$, а минимизируемый функционал (3) превращается функцию $J(\mathbf{c})$.

Минимизацию $J(\mathbf{c})$ будем осуществлять методом сопряженных градиентов:

$$\mathbf{c}^{k+1} = \mathbf{c}^k - b^k p^k, \quad k = 0, 1, \dots \quad (5)$$

где $p^k = \nabla J^k + \frac{\|\nabla J^k\|^2}{\|\nabla J^{k-1}\|^2} p^{k-1}$, $p^0 = \nabla J^k$, а число b^k рассчитывалось с

использованием метода Вульфа [6].

Для оценки эффективности методов идентификации вектора \mathbf{c} по алгоритму (5) градиент ∇J в $n+1$ мерном пространстве будем рассчитывать двумя способами: численным дифференцированием и с использованием сопряженной задачи.

При численном дифференцировании градиент целевой функции $J(\mathbf{c})$ рассчитывался по формуле [6]:

$$\nabla_i J(\mathbf{c}^k) \approx \frac{J(\mathbf{c}^k + h e_i) - J(\mathbf{c}^k)}{h}, \quad i = 0, 1, \dots, n, \quad (6)$$

где число $h = 10^{-13} \|\mathbf{c}\|$, e_i – единичный вектор вдоль оси i в пространстве оптимизируемых параметров c_i .

Для расчета вторым способом градиент целевой функции $J(\mathbf{c})$ находился модифицированным методом множителей Лагранжа [1]:

$$\nabla_i J(\mathbf{c}^k) = \int_0^R \int_0^Z \frac{\partial T}{\partial r} \frac{\partial f}{\partial r} \frac{T^i}{(T_c)^i} 2\pi r dr dz, \quad (7)$$

где $f(r, z)$ удовлетворяет сопряженной задаче:

$$-V \frac{\partial f}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(ar \frac{\partial f}{\partial r} \right) - 2(T - T_c), \quad (8)$$

$$f \Big|_{\substack{z=Z \\ 0 < r < R}} = 0, \quad \frac{\partial f}{\partial r} \Big|_{\substack{0 < z < Z \\ r=0}} = 0, \quad f \Big|_{\substack{0 \leq z \leq z_c \\ r=R}} = 0, \quad a \frac{\partial f}{\partial r} \Big|_{\substack{z_c < z \leq Z \\ r=R}} = -\alpha' f, \quad (9)$$

Решение задачи

Тестирование алгоритмов производилось следующим образом. Задавалось тестовое значение $\mathbf{c}_e = 2 \cdot 10^{-6}$, $i = 0, \dots, n$ и начальное приближение $\mathbf{c}_i^0 = 6 \cdot 10^{-6}$, $i = 0, \dots, n$. Квазилинейная задача (1), (2), (4)

аппроксимировалась неявной конечно-разностной схемой и решалась методом прогонки с подитерациями для учёта нелинейности [7]. В частности, для данной задачи было подобрано наилучшее число подитераций $m=3$. В результате решения прямой задачи (1), (2), (4) определялось поле температур, которое принималось как экспериментальное T_e . Далее решалась обратная задача идентификации вектора \mathbf{c} по критерию (3) методом (5), где градиент вычислялся либо по формуле (6), либо по формуле (7) с использованием линейной сопряжённой задачи (8), (9). Последняя решалась обычным методом прогонки, не требующим подитераций.

Условием завершения итераций метода сопряжённых градиентов (5), было изменение критерия качества менее чем на 0,1%. Эффективность методов идентификации оценивалось не только по степени минимизации критерия $J(\mathbf{c})$, но и по степени приближения искомого вектора к точному значению $-\Delta^k = \|\mathbf{c}^k - \mathbf{c}_e\|$. Расчёты проводились при следующих значениях:

$$V = 1 \cdot 10^{-2} \text{ м/с}, \quad R = 0,21 \text{ м}, \quad Z = 7,28 \text{ м}, \quad T_0 = 1799 \text{ К}, \quad T_{sol} = 1709 \text{ К}, \\ T_C = 1423 \text{ К}, \quad z_c = 1 \text{ м}, \quad T_h = 293 \text{ К}, \quad \mathbf{c}_e = 2 \cdot 10^{-6}, \quad i = 0, \dots, n, \quad \mathbf{c}_i^0 = 6 \cdot 10^{-6}, \quad i = 0, \dots, n.$$

Величина α' в расчетах принималась равной $\alpha' = 1 \cdot 10^{-5} \dot{i} / \ddot{n}$.

Анализ результатов вычислений

В таблице 1 приведены результаты идентификации вектора \mathbf{c} при расчете градиента посредством численного дифференцирования, а в таблице 2 – при расчете градиента с использованием сопряженной задачи.

Таблица 1. Результаты идентификации коэффициента температуропроводности при расчете градиента ∇J посредством численного дифференцирования

n	0	1	2	5	7	10
Δ^k / Δ^0	$1,06 \cdot 10^{-9}$	$7,29 \cdot 10^{-7}$	$3,70 \cdot 10^{-5}$	$2,52 \cdot 10^{-4}$	$8,75 \cdot 10^{-4}$	$2,96 \cdot 10^{-4}$
J^k / J^0	$2,24 \cdot 10^{-18}$	$4,88 \cdot 10^{-16}$	$1,73 \cdot 10^{-15}$	$4,45 \cdot 10^{-13}$	$1,65 \cdot 10^{-11}$	$1,98 \cdot 10^{-13}$
k	5	16	19	28	27	67
Кол-во решен ий диф уравн	30	144	228	588	729	2412

Видно, что в первом случае (таблица 1) удаётся существенно лучше восстановить вектор \mathbf{c} , он приближается к точному значению \mathbf{c}_e на несколько порядков ближе, чем во втором случае (таблица 2).

Таблица 2. Результаты идентификации коэффициента температуропроводности при расчете градиента ∇J посредством сопряжённой задачи

n	0	1	2	5	7	10
Δ^k / Δ^0	$1,49 \cdot 10^{-16}$	$4,19 \cdot 10^{-2}$	$7,35 \cdot 10^{-2}$	$1,50 \cdot 10^{-2}$	$4,34 \cdot 10^{-3}$	$9,85 \cdot 10^{-3}$
J^k / J^0	$1,30 \cdot 10^{-31}$	$1,46 \cdot 10^{-6}$	$9,45 \cdot 10^{-6}$	$1,12 \cdot 10^{-6}$	$5,29 \cdot 10^{-10}$	$6,81 \cdot 10^{-9}$
k	11	4	4	8	11	11
Кол-во решенных уравнений	66	24	24	48	66	66

Однако при этом затрачивается в несколько раз больше итераций k . В тоже время необходимо отметить, что с точки зрения практических результатов идентификации коэффициента теплопроводности, для МНЛЗ оба метода дают достаточно высокую точность моделирования.

Более высокая погрешность второго метода (таблица 2) объясняется добавлением в градиент ∇J вычислительных погрешностей сопряжённого дифференциального уравнения (8) к погрешностям решения исходного дифференциального уравнения (1). Эти дополнительные погрешности оказались существенно выше погрешностей численного дифференцирования по формуле (6). Заметим (см. таб. 1), что погрешности численного дифференцирования возрастают с ростом размерности вектора c , о чём свидетельствует увеличение числа итераций с увеличением n .

Если оценивать вычислительные затраты в обоих методах, то мы получим следующее. Метод численного дифференцирования (6) на каждой итерации требует $(n+2)k$ решений дифференциального уравнения (1) с учётом внутренних подитераций для преодоления нелинейности задачи, а метод с линейной сопряжённой задачей требует всего $k+1$ решений: дифференциального уравнения (1) и сопряжённого дифференциального уравнения (8) на каждой итерации. В нижних строках таблиц 1 и 2 приведено результирующее количество решений дифференциальных уравнений в каждом случае. Мы видим, что «высокоточный метод» численного дифференцирования с ростом размерности вектора c требует значительно возрастающих вычислительных затрат. В то же время метод с сопряжённой задачей не чувствителен к размерности искомого вектора c .

Выводы

Таким образом, при идентификации градиентными методами теплофизических векторов-параметров небольшой размерности целесообразно использовать численное дифференцирование целевой функции, к тому же оно относительно просто реализуется. При большой размерности, и тем более бесконечной, когда искомый параметр – функция, необходимо использовать сопряжённую задачу для расчёта градиента.

Список литературы

1. Толстых В.К. Прямой экстремальный подход для оптимизации систем с распределёнными параметрами / Виктор Константинович Толстых. – Донецк: Юго-Восток, 1997. – 178 с.
2. Прямая оптимизация теплофизических процессов / [Огурцов А.П., Недопекин Ф.В., Толстых В.К., Володин Н.А.]. – Донецк: Юго-Восток, 1997. – 150 с.
3. Бородин В.С. Идентификация параметров в моделях формирования отливок / В.С. Бородин, Н.А. Володин, В.К. Толстых // Процессы литья. – 1995. – № 1. – С. 96 - 101.
4. Толстых В.К. Идентификация теплофизических параметров в виде полиномов, зависящих от температуры / Толстых В.К., Недопекин Ф.В., Бодряга В.Е. // Технічна теплофізика та промислового теплоенергетика. – 2009. – Вип. №1. – С. 193-199.
5. Недопекин Ф.В. Математическое моделирование гидродинамики и теплопереноса в слитках / Федор Викторович Недопекин. – Ижевск: Из-во Удмуртского университета, 1995. – 236 с.
6. Jorge Nocedal Numerical Optimization / Jorge Nocedal, Stephan J. Wright. – Springer, 1999. – 636 p.
7. Тихонов А.Н. Уравнения математической физики / А. Тихонов, А. Самарский. – М.: Наука, 1966. – 724 с.

Надійшла до редакції 28.10.2011.

Рецензент: д-р техн. наук, проф. Святный В.А.

В.К. Толстых¹, Н.А. Володин², В.Є. Бодряга¹

¹Донецький національний університет, ²Інститут інформатики та штучного інтелекту Донецького національного технічного університету

Про градієнтні методи та спряжені задачі при ідентифікації теплофізичних параметрів. Вирішується задача ідентифікації коефіцієнта температуропровідності безперервнолитого сталевого циліндричного злитку. Температуропровідність подається у вигляді поліноміальної залежності від температури процесу з ваговими коефіцієнтами. Задача розглядається як оптимізаційна. Мінімізація цільової функції здійснюється методом спряжених градієнтів. Розглядаються методи пошуку градієнта функції за допомогою спряженої задачі і чисельного диференціювання. Наводиться порівняльний аналіз розрахунків задачі ідентифікації для обох методів.

Ключові слова: ідентифікація, оптимізація, градієнт, безперервний злиток.

V.K. Tolstikh , N.A Volodin, V.E Bodryaga

¹Donetsk National University, ²Institute of Informatics and Artificial Intelligence of Donetsk National Technical University

About a Gradient Methods and the Attended Tasks during Authentication of Thermophysical Parameters. We solve the problem of identification of the thermal diffusivity of continuously cylindrical steel ingot. Thermal diffusivity is a polynomial dependence on the temperature of the process with weighting factors. The problem is considered as an optimization. We consider methods for finding the gradient of the function with the dual problem and the numerical differentiation. We perform a comparative analysis of the calculations of the identification problem for both methods.

Keywords: identification, optimization, gradient, continuous ingot.