

ДИНАМИЧЕСКОЕ ВОССТАНОВЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТОВ СПЛОШНОЙ СРЕДЫ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ПРОЦЕССОВ

Жуков П. И.¹

(Старооскольский технологический институт
им. А.А. Угарова (филиал) НИТУ «МИСИС»,
Старый Оскол)

При моделировании нестационарных процессов в сплошных средах при помощи параболических дифференциальных уравнений часто встречаются ситуации, когда коэффициент, обеспечивающий связь левой и правой части уравнения, описывается как некоторая функция от множества переменных, включая состояния исследуемой среды. Восстановление данной зависимости, как правило, требует решения обратных коэффициентных задач, основанных на известных состояниях среды. На практике это означает, что обратная задача решается, опираясь, помимо прочего, на некоторую невязку между модельными данными и известными наблюдениям. Тем не менее нередки случаи, когда таких наблюдений критически мало во времени, например измерения состояния среды происходят с определенным очень большим временным шагом или вообще только в конце нестационарного процесса. Тогда в ретроспективных наблюдениях присутствуют моменты времени, когда состояние среды неизвестно, ввиду чего для них нельзя определить градиент ошибки и с приемлемой точностью восстановить искомую функциональную зависимость. В данной работе предлагается альтернативный взгляд на проблему восстановления коэффициентов сплошной среды для ситуаций, когда известных состояний среды значительно меньше, чем неизвестных. Непрерывный нестационарный процесс был рассмотрен, как дискретный, развивающийся во времени, и была предложена рекуррентная функция смены дискретных состояний. На основе данной функции был предложен численный метод интерполяции градиента ошибки между ожидаемым и фактическим состояниями среды внутри любых известных состояний. Был продемонстрирован процесс восстановления дискретных значений коэффициентов в отдельные моменты времени при помощи метода стохастического градиентного спуска на основе численной модели обобщенного параболического уравнения с произвольным внешним воздействием на границе.

Ключевые слова: параметрическая оптимизация, нестационарные процессы, коэффициентные обратные задачи, параболические уравнения.

¹ Пётр Игоревич Жуков, к.т.н., ассистент кафедры АИСУ им. Ю.И. Ерёменко (rockwell@control-mail.ru).

1. Введение

Пусть имеет место некоторая сплошная среда, которая обладает внутренним состоянием Q . Предположим, что внутреннее состояние среды изменяется с течением времени. Допустим, что процесс этого изменения может быть описан дифференциальным уравнением следующего вида (1):

$$(1) \quad \dot{Q} = \varphi \cdot \nabla^2 Q,$$

где φ – некоторый связующий коэффициент, позволяющий увязать размерности слева и справа в данном уравнении, ∇ – оператор набла.

Уравнение (1) относится к классу параболических дифференциальных уравнений, которыми описывают нестационарные процессы чаще всего в сплошных средах, определенных в ограниченных евклидовых пространствах, где ограничениями выступают некоторые краевые условия. В частности, при помощи уравнения вида (1) можно описать нестационарную диффузию [20, 31] или её частный случай – нестационарную теплопроводность [2, 7, 8, 27].

Коэффициент φ определяется моделируемой средой и определяет её поведение с функциями внешних и внутренних источников. Когда этот коэффициент не зависит ни от самого состояния среды, ни от времени, то решение краевых задач на основе (1) является в достаточной мере тривиальным.

Однако в практических задачах данный коэффициент изменяется вслед за изменением внутреннего состояния среды $\varphi = f_\varphi(Q, m)$ и зависит от её природы (m). На сегодняшний день существует много работ, пытающихся учесть нестационарность этого и других коэффициентов функций источников [2, 4, 8, 12, 14, 15].

В подобном случае рассмотренное выше уравнение (1) является лишь частным случаем уравнения (2), для решения которого необходимо структурно идентифицировать $f_\varphi(Q, m)$:

$$(2) \quad \dot{Q} = \nabla \cdot (\nabla \cdot f_\varphi(Q, m) \cdot Q).$$

Задача поиска и восстановления данной функциональной зависимости лежит в области обратных задач. Та их часть, которая

предполагает восстановления коэффициентов исходного уравнения на основе некоторых априорных сведений, называется коэффициентными обратными задачами. При описании с помощью (2) процессов эволюции во времени некоторых сред такими априорными сведениями могут являться их известные состояния в определённые моменты времени.

Применительно к различным областям науки и техники данные задачи хорошо исследованы в работах А.Н. Тихонова [18], М.М. Лаврентьева [11], О.М. Алифанова [1], С.И. Кабанихина [6], В.И. Дмитриева [5] и др. В разрезе вычислительной математики и численных методов обратные задачи исследованы в работах А.А Самарского и П.Н. Вабищевича [17], Г.И. Марчука [13] и др.

В частности, ставшие уже классическими математические постановки коэффициентных обратных задач и современные методы их решения можно найти в работах, упомянутых ранее – О.М. Алифанова, В.И. Дмитриева, С.И. Кабанихина, а также в работах М.Ю. Кокурина [10], А.И. Кожанова [9], А.О. Ватульяна [3] и др. За рубежом решению коэффициентных обратных задач посвящены работы William Symes [29], Heinz W. Engl [21], Masahiro Yamamoto [30], Martin Hanke [23], Andreas Kirsch [26] и др.

Современные подходы к решению обратных коэффициентных задач допускают существенный уровень шума в данных об известных состояниях среды, ограниченность по их количеству, наличие нелинейностей в исходных уравнениях и другие ограничивающие факторы. Однако очень редко рассматриваются ситуации, когда известных состояний среды, по которым можно было бы восстановить искомые коэффициенты, критически меньше, чем неизвестных. Например, известно только начальное и конечное состояние.

При этом сами такие ситуации в практических задачах нередки, например, промышленный нагрев в методических печах твердых тел приблизительно схожих внутренних конфигураций. Из-за высокотемпературного характера нагрева, а также невозможности контролируемым образом изучить каждую физико-химическую конфигурацию нагреваемого материала, осложняется процесс восстановления коэффициентов уравнения (2), что снижает практическую применимость моделей прямого решения, основанных на нем.

Одним из наиболее распространенных способов борьбы с неполнотой сведений является ввод в минимизируемые функционалы весовых коэффициентов для невязок между расчетными и наблюдаемыми состояниями среды. Такой способ при упоминании выше частном случае неполноты сведений будет подобен применению простой равномерной метрики, например максимуму известной невязки, что приведет к быстрому нарастанию погрешности.

Ввиду данного факта в данной работе предлагается альтернативный взгляд на решение поставленной проблемы неполноты сведений при решении коэффициентной обратной задачи. Делается предположение о том, что в моменты времени, когда состояние среды известно, по дополнительным сведениям, можно оценить невязку не только непосредственно в данный момент, но и проследить её изменение для всех предшествующих по времени состояний. Идея наследует принципы, исторически применяемые в области «машинного обучения» для решения схожих задач определения ошибок в скрытых слоях нейронных сетей. Данное исследование предполагает ряд допущений, которые предполагается ослабить в ходе дальнейших изысканий. В частности о том, что значения φ постоянны в каждой точке пространства среды и зависят только от некоторого её усредненного состояния в момент времени t . Нетривиальной видится проблема определения этого усредненного состояния среды, для чего в работе предлагается рекуррентная функция на основе финитного представления (2), непрерывно дифференцируемая первого порядка по φ .

2. Определение обобщенной по пространству рекуррентной функции смены состояний среды

Для определения рекуррентной функции смены состояния необходимо построить финитную модель параболического уравнения (2) первого порядка. Пред тем как приступить к её рассмотрению, закрепим некоторые основные допущения: 1) рассматривается однородная одномерная сплошная среда; 2) связующий коэффициент φ в однородной сплошной среде является некото-

рой функцией от состояния среды в момент времени t и постоянен в каждой точке пространства среды; 3) связующий коэффициент зависит от природы среды (m), которая постоянна в момент её рассмотрения. Допущение об одномерности среды является следствием покоординатного расщепления [19], согласно которому локально-одномерный случай является частным случаем многомерного.

Для перехода к финитной модели перепишем одномерное уравнение (2) к виду в частных производных (3):

$$(3) \quad \frac{\partial Q(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(f_{\varphi}(Q(x,t), m) \frac{\partial Q(x,t)}{\partial x} \right).$$

Поскольку было принято допущение, что φ не зависит от пространственной координаты, то можно переписать (3) в следующем виде:

$$(4) \quad \frac{\partial Q(x,t)}{\partial t} = f_{\varphi}(Q_s^t, m) \cdot \frac{\partial^2 Q(x,t)}{\partial x^2},$$

где Q_s^t – это усредненное состояние среды по всем пространственным координатам в момент времени t .

Для перехода к финитному представлению необходимо замостить пространство одномерной сетью $x = [0, H]$. Внутренние состояния среды определим в узлах некоторой одномерной временной сети $t = [0, N,]$, тогда набор дискретных состояний будет определен в некоторой двумерной плоскости (рис. 1).

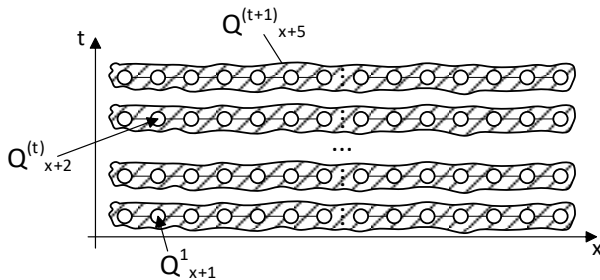


Рис. 1. Представление процесса изменения конечного набора пространственных состояний во времени

В дискретной форме дифференциальное уравнение (3) можно представить в форме уравнения (5) согласно методу конечных разностей [16]:

$$(5) \quad \frac{\partial Q_x^{t+1} - Q_x^t}{\Delta t} = f_\varphi(Q_s^t, m) \cdot \frac{Q_{x+1}^t - 2 \cdot Q_x^t + Q_{x-1}^t}{\Delta x^2},$$

где Δt и Δx – это величина дискретизации по времени и пространству соответственно.

Обратимся к допущениям, сделанным ранее, в частности к тому, что связующий коэффициент одинаков в каждой точке сплошной среды x в момент времени t . Тогда мы можем выполнить замену непрерывной функции $f_\varphi(Q_x^t, m)$ на вектор дискретных параметров φ_m^t , которые будут определены в каждый момент времени $t \neq 0$. При этом степень дискретизации здесь будет зависеть от Δt и совпадать с дискретным набором конечных состояний исследуемой среды:

$$(6) \quad \begin{cases} \vec{Q} \in [Q_x^0, Q_x^1, Q_x^2, \dots, Q_x^N] \\ \vec{\varphi} \in [\varphi_m^0, \varphi_m^1, \varphi_m^2, \dots, \varphi_m^N] \end{cases} \Rightarrow \vec{\varphi} \parallel \vec{Q}$$

Сделаем предположение, что существует такая рекуррентная зависимость между дискретными состояниями t и $(t + 1)$ -м, что зависит, помимо прочего, от φ_m^t . Обозначим такую рекуррентную зависимость как $F_s(Q_s^t, \varphi_m^t, t)$, тогда можно будет рассмотреть φ_m^t как некоторое управляющее воздействие, изменения которого в момент времени t способны привести к различным состояниям в момент времени $t + 1$. Таким образом, можно предполагать, что каждое последующее усредненное состояние исследуемой среды Q^{t+1}_s принадлежит некоторой области всех возможных состояний, в которые их способна привести функция $F^{t+1}(Q_s^t, \varphi_m^t)$:

$$(7) \quad F^{t+1} : X_Q \rightarrow Y_Q; (X_Q; Y_Q) \in \mathbb{R}.$$

Рассмотрим способ определения данной рекуррентной зависимости. Известно, что в каждый момент времени t имеется N внутренних состояний среды согласно пространственной сети. Тогда получить обобщенную рекуррентную зависимость состояния в момент времени $t + 1$ от состояния в момент времени t можно, используя следующую концепцию усреднения (рис. 2), которая позволяет напрямую проследить внешнее воздействие на

внутренние пространственные состояния среды. В представленном случае F_0 и F_H – это некоторые рекуррентные функции смены состояния на границах пространственной сети, а $F_{0...H}$ – это функция суммы внутренних состояний.

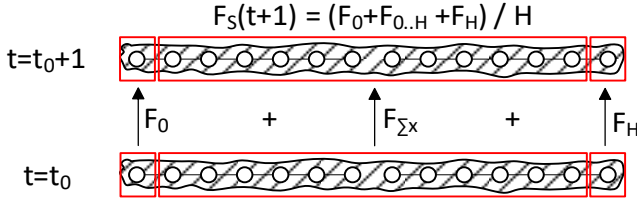


Рис. 2. Предлагаемый принцип усреднения

Пусть на границах одномерной сплошной среды выполняются следующие краевые условия:

$$(8) \quad \begin{aligned} -\psi(Q(0,t),m) \cdot \frac{\partial Q(0,t)}{\partial x} &= g_x(Q(0,t)), \\ \psi(Q(H,t),m) \cdot \frac{\partial Q(H,t)}{\partial x} &= g_x(Q(H,t)); \end{aligned}$$

где $\psi(Q)$ – это коэффициент внешнего воздействия вблизи физической границы исследуемой сплошной среды и который зависит от нее. Данные уравнения позволяют определить функции смены состояний рассматриваемой дискретной модели в точках на границах (F_0, F_H) и вместе с начальными условиями вида $t_0 = 0$, $Q(x, 0) = Q_0$ формируют некоторую начально-краевую задачу для уравнения (3).

Для нахождения функций F_0 и F_H разложим в ряд Тейлора функции $Q(1, t)$ и $Q(H - 1, t)$ в окрестностях $(x = 0, t)$ и $(x = H, t)$ соответственно:

$$(9) \quad \begin{aligned} Q_1^t &= Q_0^t + \Delta x \frac{\partial Q_0^t}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{\partial^2 Q_0^t}{\partial x^2} + O(\Delta x^3), \\ Q_{H-1}^t &= Q_H^t - \Delta x \frac{\partial Q_H^t}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{\partial^2 Q_H^t}{\partial x^2} + O(\Delta x^3). \end{aligned}$$

Предположим, что на границах $(x = 0, t)$ и $(x = H, t)$, помимо

краевых условий (8) также выполняется дифференциальное уравнение (3), и перепишем разложение (9) следующим образом:

$$(10) \quad \begin{aligned} Q_1^t &= Q_0^t + \Delta x \cdot \left(-\frac{f_x(Q_0^t)}{\psi_m^t} \right) + \frac{\Delta x^2}{2! \cdot \varphi_m^t} \frac{\partial Q_0^t}{\partial t} + O(\Delta x^3), \\ Q_{H-1}^t &= Q_H^t - \Delta x \frac{f_x(Q_H^t)}{\psi_m^t} + \frac{\Delta x^2}{2! \cdot \varphi_m^t} \frac{\partial Q_H^t}{\partial t} + O(\Delta x^3). \end{aligned}$$

Здесь коэффициент ψ был представлен в дискретном виде со степенью дискретизации Δt , а также был принят независимым от пространственной координаты. Таким образом, останется выразить (10) относительно $(t + 1)$ -го временного слоя, предварительно представив непрерывный дифференциальный оператор во втором слагаемом в дискретной форме:

$$(11) \quad \begin{aligned} F_0 &= Q_0^t - \frac{2 \cdot \varphi_m^t \cdot \Delta t \cdot (Q_0^t + Q_1^t)}{\Delta x^2} + \frac{2 \cdot \varphi_m^t \cdot \Delta t \cdot f_x(Q_0^t)}{\Delta x \cdot \psi_m^t}, \\ F_H &= Q_H^t - \frac{2 \cdot \varphi_m^t \cdot \Delta t \cdot (Q_H^t + Q_{H-1}^t)}{\Delta x^2} + \frac{2 \cdot \varphi_m^t \cdot \Delta t \cdot f_x(Q_H^t)}{\Delta x \cdot \psi_m^t}. \end{aligned}$$

Для определения $F_{0...H}$ необходимо обратиться к уравнению (5) и выразить его относительно Q^{t+1}_x :

$$(12) \quad Q_x^{t+1} = Q_x^t + \Delta t \cdot \varphi_m^t \cdot \frac{Q_{x-1}^t + Q_{x+1}^t - 2 \cdot Q_x^t}{\Delta x^2}$$

Затем просуммируем все точки в интервале $[x + 1; H - 1]$:

$$(13) \quad \sum_{x=1}^{H-1} Q_x^{t+1} = \sum_{x=1}^{H-1} \left(Q_x^t + \Delta t \cdot \varphi_m^t \cdot \frac{Q_{x-1}^t + Q_{x+1}^t - 2 \cdot Q_x^t}{\Delta x^2} \right).$$

Упростим (13) до вида

$$(14) \quad \sum_{x=1}^{H-1} Q_x^{t+1} = \frac{\Delta x^2 \cdot \sum_{x=1}^{H-1} Q_x^t + \Delta t \cdot \varphi_m^t \cdot \left(\sum_{x=1}^{H-1} Q_{x-1}^t + \sum_{x=1}^{H-1} Q_{x+1}^t - 2 \sum_{x=1}^{H-1} Q_x^t \right)}{\Delta x^2}.$$

Избыточные операции суммирования, представленные в (14), можно упростить до одной единственной операции, рассмотрев каждую из представленных сумм в виде конечной последовательности:

$$(15) \begin{cases} \sum_{t=1}^{H-1} Q_x^t = Q_1^t + Q_2^t + Q_3^t + Q_4^t + \dots + Q_{H-2}^t + Q_{H-1}^t, \\ \sum_{t=1}^{H-1} Q_{x-1}^t = Q_0^t + Q_1^t + Q_2^t + Q_3^t + \dots + Q_{H-2}^t, \\ \sum_{t=1}^{H-1} Q_{x+1}^t = Q_2^t + Q_3^t + Q_4^t + Q_5^t + \dots + Q_{H-1}^t + Q_H^t. \end{cases}$$

Несложно заметить, что имеет место возможность аппроксимировать представленные дискретные суммы одной операцией суммирования:

$$(16) \begin{cases} \sum_{t=1}^{H-1} Q_x^t = Q_1^t + \bar{Q}_x^t + Q_{H-1}^t, \\ \sum_{t=1}^{H-1} Q_{x-1}^t = Q_0^t + Q_1^t + \bar{Q}_x^t, \quad \text{где } \bar{Q}_x^t = \sum_{t=2}^{H-2} Q_x^t. \\ \sum_{t=1}^{H-1} Q_{x+1}^t = \bar{Q}_x^t + Q_{H-1}^t + Q_H^t, \end{cases}$$

Теперь перепишем уравнение (14) с учетом (16) и упростим:

$$(17) F_{0\dots H} = \bar{Q}_x^t + Q_{H-1}^t + Q_1^t + \frac{\varphi \cdot \Delta t \cdot (Q_H^t + 2 \cdot Q_{H-1}^t + Q_0^t - Q_1^t)}{\Delta x^2}.$$

Зная уравнения смены состояния на границах, а также усредненное состояние внутри дискретной пространственной сети, можно определить обобщенную функцию смены состояния на $(t + 1)$ -м временном шаге $F_S(Q_S^t, \varphi_m^t, t)$:

$$(18) F_S(Q^t, \varphi_m^t, \psi_m^t, t) = \frac{\bar{Q}_x^t + Q_H^t + Q_{H-1}^t + Q_0^t + Q_1^t}{H} - \frac{\varphi_m^t \cdot \Delta t \cdot (Q_H^t - Q_{H-1}^t + Q_0^t - Q_1^t)}{H \cdot \Delta x^2} + \frac{2 \cdot \varphi_m^t \cdot \Delta t \cdot (f_x(Q_0^t) + f_x(Q_H^t))}{H \cdot \psi_m^t \cdot \Delta x},$$

где Q_t – это набор всех пространственных состояний среды в момент времени t . Таким образом (18) – это упомянутая ранее рекуррентная функция смены состояния, для которой можно допустить, что в момент времени t , все значения $\underline{Q}$ из Q^t – константы. Ранее делалось предположение, что в такой ситуации можно воспринимать значения коэффициента φ_m^t как некоторое управление, которое приводит к смене одного состояния на другое, на

основе этих постоянных значений. К этому предположению можно добавить и ψ_m^t и заметить, что (18) непрерывно зависит от φ_m^t и также непрерывно зависит от ψ_m^t везде, кроме $\psi_m^t = 0$. Определим первую производную данной функции по φ_m^t :

$$(19) \quad \frac{\partial F_S(\dots)}{\partial \varphi_m^t} = \frac{\Delta t \cdot (Q_{H-1}^t - Q_0^t + Q_1^t - Q_H^t)}{H \cdot \Delta x^2} + \frac{2 \cdot \Delta t \cdot (f_x(Q_0^t) + f_x(Q_H^t))}{H \cdot \psi_m^t \cdot \Delta x}.$$

Заметим, что полученная производная не зависит от φ_m^t , являясь константой. Можно утверждать, что предложенная выше функция является непрерывно дифференцируемой первого порядка по φ_m^t . Рассмотрим производную функции (18) по ψ_m^t :

$$(20) \quad \frac{\partial F_S(\dots)}{\partial \psi_m^t} = - \frac{2 \cdot \varphi \cdot \Delta t \cdot f_x(Q_0^t) + f_x(Q_H^t)}{H \cdot (\psi_m^t)^2 \cdot \Delta x}.$$

Частная производная (20) определена на интервале $(-\infty; 0) \cup (0; +\infty)$ и на нем же непрерывна, ввиду чего можно утверждать, что предложенная формула (18) является непрерывно дифференцируемой минимум единожды по φ_m^t и ψ_m^t на упомянутом интервале.

Предложенная выше дифференцируемая рекуррентная функция смены временных состояний среды позволяет рассмотреть применение градиентных методов поиска и восстановления коэффициентов φ_m^t и ψ_m^t .

3. Предлагаемый численный метод параметрической оптимизации

Опираясь на вышеизложенное, предположим, что имеет место необходимость для численной модели (3) с граничными условиями (8) и начальными условиями вида $Q(x, 0) = Q_0(x)$, $t = [0, t_E]$ решить обратную коэффициентную задачу. Для этого предположим, что имеется набор априорных сведений, например, усредненных значений состояний среды в t -й момент времени $Q_E(t)$ и независящих от пространственной координаты:

$$(21) \quad Q(x, t) = Q_E(t), \quad t \in [1, t_E].$$

Тогда обратная задача будет заключаться в нахождении таких φ_m^t и ψ_m^t , при которых решение прямой задачи удовлетворяло

бы известным состояниям (21) в точках временного диапазона следующим образом:

$$(22) F_S(Q^t, \varphi_m^t, \psi_m^t, t) = Q_E(t), t \in [1, t_E].$$

Эту задачу можно сформулировать следующим образом: необходимо найти такие φ_m^t, ψ_m^t , минимизирующие функционал

$$(23) J(\varphi_m^t, \psi_m^t) = \int_1^{t_{end}} |F_S(Q^t, \varphi_m^t, \psi_m^t, t) - Q_E(t)|^2 dt + \lambda \cdot R(...) \rightarrow \min ,$$

где $J(\varphi_m^t, \psi_m^t)$ – целевой функционал, λ – параметр регуляризации, $R(...)$ – регуляризующий член. Это задача оптимизации в классической постановке, для решения которой можно применить различные итеративные алгоритмы, например метод градиентного спуска. Теперь рассмотрим ситуацию, при которой известные состояния имеются только в момент времени $t = t_E$. Тогда на интервале $t \in [1, t_E]$ функционал не определен в явном виде, что усложняет расчет градиента и, как следствие, применение градиентных методов.

Рассмотрим следующий предлагаемый численный метод на основе внутренней интерполяции значений градиента ошибка целевого функционала на интервале $t \in [1, t_E]$. Для этого будем воспринимать упомянутую ранее финитную модель как систему с конечным набором состояний: стационарные, когда дополнительные сведения известны; нестационарные – все остальные. Определить градиент невязки в стационарные моменты времени можно тривиальным образом:

$$(24) \frac{\partial J^{t_E}}{\partial \varphi_m^{t_E}} = \frac{\partial J^{t_E}}{\partial F(..., t_E)} \cdot \frac{\partial F(..., t_E)}{\partial \varphi_m^{t_E}}, \quad \frac{\partial J^{t_E}}{\partial \psi_m^{t_E}} = \frac{\partial J^{t_E}}{\partial F(..., t_E)} \cdot \frac{\partial F^{t_E}}{\partial \psi_m^S},$$

где $\partial F / \partial \varphi$ и $\partial F / \partial \psi$ уже были определены ранее как частные производные (19) и (20) соответственно.

Невязку для нестационарных состояний определим из следующего предположения. Пусть набор нестационарных состояний формирует некоторую траекторию переходного процесса, которая приводит дискретную систему в точку $Q_E(t_E)$. Если процесс перехода будет описываться предложенной выше рекуррентной функцией (18), тогда отклонение от этой траектории можно проследить через влияние φ_m^t, ψ_m^t на Q_x^t в моменты времени между двумя стационарными состояниями. Начальное условие

($Q(x, 0) = Q_0(t)$) по определению можно также отнести к стационарному состоянию, тогда предположим, что градиенты невязки между двумя стационарными состояниями можно вычислить цепными уравнениями следующего вида:

$$(25) \quad \begin{cases} \frac{\partial J^t}{\partial \varphi_m^t} = \left(\frac{\partial F(..., t)}{\partial \varphi_m^t} \cdot \frac{\partial F(..., t)}{\partial \bar{Q}_x^t} \right) \cdot \frac{\partial J^{t+1}}{\partial \varphi_m^{t+1}}, \\ \frac{\partial J^t}{\partial \psi_m^t} = \left(\frac{\partial F(..., t)}{\partial \psi_m^t} \cdot \frac{\partial F(..., t)}{\partial \bar{Q}_x^t} \right) \cdot \frac{\partial J^{t+1}}{\partial \psi_m^{t+1}}, \end{cases} \quad t = (0; t_E).$$

Частная производная $\partial F / \partial \bar{Q}_x$ в любой момент времени равна $(1/H)$, что можно заметить из (18). Тогда уравнение цепной связи будет иметь вид (26):

$$(26) \quad \begin{cases} \frac{\partial J^t}{\partial \varphi_m^t} = \left(\frac{1}{H} \cdot \frac{\partial F(..., t)}{\partial \varphi_m^t} \right) \cdot \frac{\partial J^{t+1}}{\partial \varphi_m^{t+1}}, \\ \frac{\partial J^t}{\partial \psi_m^t} = \left(\frac{1}{H} \cdot \frac{\partial F(..., t)}{\partial \psi_m^t} \right) \cdot \frac{\partial J^{t+1}}{\partial \psi_m^{t+1}}, \end{cases} \quad t = (0; t_E).$$

Можно заметить, что вычисление (26) возможно только обратнo по временной координате от $t = t_E$ до $t = 0$. Важно упомянуть, что здесь рассматривается худший случай, когда стационарные состояния среды известны только в начале и конце процесса, однако предложенный выше подход к интерполяции градиента применим для двух любых произвольных стационарных состояний на интервале $t \in [0, t_E]$. Опираясь на (24) и (26) можно применить метод градиентного спуска, однако перед этим необходимо определить условия корректности расчета модели на ЭВМ [16]. Будем использовать условие устойчивости разностной схемы, дополнив его ограничением функции (18):

$$(27) \quad 2 \cdot \Delta t \cdot \varphi_m^t < \Delta x^2; \quad \psi_m^t \neq 0.$$

Слежение за соблюдением условия (25) в процессе восстановления коэффициентов – это нетривиальная задача, требующая разработки отдельных инструментов, которой предполагается посвятить дальнейшие исследования. Для обеспечения начальной устойчивости достаточно инициализировать (φ_m^t, ψ_m^t) без нарушения (27), например при помощи метода псевдослучайной генерации вещественных чисел в заданном диапазоне.

Дальнейшая суть обратной задачи заключается в настройке первично инициализированных φ_m^t , и ψ_m^t таким образом, чтобы функционал (23), определенный в стационарные моменты, минимизировался. Применяя градиентные методы, важно помнить, что согласно предложенному методу интерполяции градиент, распространяемый вдоль временных слоев, будет затухать [22] пропорционально размерности временной сети. Это вычислительная проблема, устранить которую может помочь модификация законов настройки для φ_m^t , и ψ_m^t . В частности, предлагается использовать законы настройки (28) и (29), которые известны в области машинного обучения как оптимизатор «Adam» [25]:

$$(28) \quad \Delta\varphi_m^t = -\eta \cdot \frac{\hat{m}_t}{\sqrt{\hat{v}_t} + \varepsilon}; \quad \hat{m}_t = \frac{m_t}{(1 - \beta_1^t)}; \quad \hat{v}_t = \frac{v_t}{(1 - \beta_1^t)},$$

где η – это шаг настройки; $\beta_{1,2}$ – это нормированные значения от 0 до 1, определяющие степень вклада момента и скорости изменения соответственно; $\hat{m}_t$ – это усредненный скорректированный момент градиента ошибки в t -й момент времени; $\hat{v}_t$ – это скорректированная скорость градиента ошибки в t -й момент времени; m_t , v_t – это момент и скорость изменения градиента ошибки в t -й момент времени, определяемые по формулам

$$(29) \quad m_t = \beta_1 \cdot m_{t-1} + (1 - \beta_1) \cdot \frac{\partial J^t}{\partial \varphi_m^t}; \quad v_t = \beta_2 \cdot v_{t-1} + (1 - \beta_2) \cdot \left[\frac{\partial J^t}{\partial \varphi_m^t} \right]^2.$$

Закон настройки для ψ_m^t имеет аналогичный (28) и (29) вид.

Таким образом, предлагается следующий численный метод в виде конечного алгоритма, основанный на стохастическом градиентном спуске:

1. На первом этапе инициализировать φ_m^t и ψ_m^t таким образом, чтобы не нарушалось условие (27);
2. В цикле с предусловием, пока невязка больше определенной критической величины (ε):
 - а. На основании полученных φ_m^t и ψ_m^t произвести расчет всех внутренних состояний сплошной среды как по пространству, так и по времени;
 - б. По дополнительным сведениям, получить эталонные стационарные состояния среды;

- в. Вычислить состояние сплошной среды в этот момент времени по функции (18);
 - г. Вычислить определить невязку по значению функционала (23) для стационарного состояния;
 - д. Вычислить при помощи (19) частную производную $\partial F/\partial \varphi$;
 - е. Вычислить при помощи (20) частную производную $\partial F/\partial \psi$;
 - ж. Вычислить частную производную ошибки по φ_m^t и ψ_m^t при помощи (24) для стационарных состояний среды;
 - з. Настроить значения коэффициентов φ_m^t и ψ_m^t для стационарного состояния среды, используя законы настройки (28) и (29);
 - и. В цикле с параметром t по всем нестационарным состояниям, двигаясь обратно по времени:
 - i. При помощи (19) и (20) вычислить частные производные $\partial F/\partial \varphi$ и $\partial F/\partial \psi$;
 - ii. Вычислить частные производные ошибок цепным уравнением (26);
 - iii. Настроить значения коэффициентов φ_m^t и ψ_m^t для стационарного состояния среды, используя законы настройки (28) и (29);
 - к. Вернуться к пункту 3.
3. Завершить расчет.

Для предложенного численного метода были проведены численные эксперименты с целью определить сходимость метода параметрической оптимизации и степень качества аппроксимации обобщенного по пространству состояния среды (18).

4. Численные эксперименты

Первым экспериментом, который было решено провести – это апробировать предложенную аппроксимационную функцию (18) для расчета обобщенного состояния среды. Внешние воздействия на сплошную среду в её граничных пространственных узлах описывалось следующей функцией:

$$(30) \quad \begin{aligned} -\psi(Q_0^t, m) \cdot \frac{\partial Q(0, t)}{\partial x} &= \kappa_1 \cdot (550 - Q_0^t), \\ \psi(Q_H^t, m) \cdot \frac{\partial Q_H^t}{\partial x} &= \kappa_2 \cdot (550 - Q_H^t). \end{aligned}$$

Параметры κ_1 и κ_2 здесь описывают степень воздействия на границе. Эксперимент проводился без предварительной коррекции связующего коэффициента φ_m^t с параметрами $\kappa_1 = \kappa_2 = 5, 0$ и начальными условиями $t_0 = 0$, $Q^{t0} = 50$. Общие параметры модели представлены в таблице 1.

Таблица 1. Параметры модели для тестирования

Параметр модели	Значение
Общее время моделирования (t_{max})	1000
Пространственная размерность (L_{max})	500
Шаг по времени (Δt)	5
Шаг по пространству (Δx)	50
Начальное состояние среды (Q_x^0)	50
Размерность пространственной сети (H)	10
Размерность временной сети (N)	200
Коэффициент связи в каждом узле временной сети (φ_m^t)	12
Граничный коэффициент в каждом узле временной сети (ψ_m^t)	60

Всего проводились 15 экспериментов с изменением параметров φ_m^t и Δx в рамках окна устойчивости, определенного условием (27). График изменения усредненного состояния среды представлен на рис. 3.

Как можно заметить, имеется статическая ошибка между фактическим средним значением пространственных состояний среды в $(t + 1)$ -й момент времени и расчетным значением, полученным на основании предложенной функции (18) в тот же момент времени.

Для численной оценки качества была использована метрика абсолютного среднего (31) [24]:

$$(31) \quad MAE = \frac{\sum_{i=0}^N |F(..., t) - AVG(Q_x^t)|}{N}.$$



Рис. 3. Сравнение точности предложенного показателя (18)

Результаты эксперимента (таблица 2) показали, что чем больше шаг вдоль пространственной сети Δx , тем медленней прирастает ошибка с ростом ϕ_m^t .

Кроме того, было установлено, что изменение статических ψ_m^t никаким образом не влияет на представленный выше результат. Тем не менее дальнейшие эксперименты с корректировкой ψ_m^t показали, что наблюдается снижение расхождения, посчитанного метрикой (18) значения и простого усредненного значения пространственных состояний среды.

На основе приведенных данных экспериментов был получен следующий график уменьшения статической ошибки при увеличении пространственного шага моделирования (рис. 4).

Вторым тестом в рамках апробации было экспериментальное исследование сходимости предложенного метода по значению. В качестве критерия сходимости было выбрано отклонение абсолютной ошибки наблюдения не более чем на 10. В качестве естественного стационарного состояния использовалось неуправляемое начальное состояние $t = 0$, а в качестве второго стационарного состояния рассматривался конец моделирования $t = N$, таким образом было рассмотрено наиболее широкое окно переходного процесса.

Таблица 2. Результаты экспериментов сходимости аппроксимационной функции (18)

Значение φ_m^t	Статическая ошибка (19) $e = MAE$	Скорость изменения ошибки $\partial e / \partial t$	Ускорение роста ошибки $\partial^2 e / \partial t^2$
$\Delta x = 75, \Delta t = 5$			
2,02	20	0	0
2,62	25	0,6	0
3,246	30	0,626	0,026
3,877	35	0,631	0,005
4,517	40	0,64	0,009
$\Delta x = 100, \Delta t = 5$			
1,275	20	0	0
1,669	25	0,394	0
2,078	30	0,409	0,015
2,497	35	0,419	0,01
2,925	40	0,428	0,009
$\Delta x = 125, \Delta t = 5$			
0,993	20	0	0
1,309	25	0,316	0
1,63	30	0,321	0,005
1,97	35	0,34	0,019
2,32	40	0,35	0,01

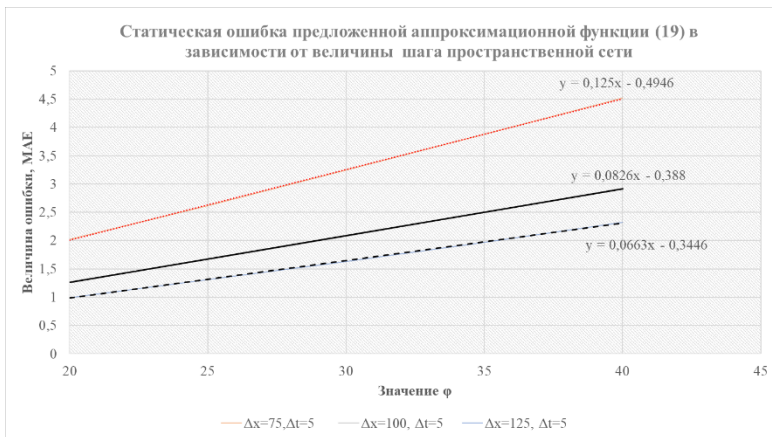


Рис. 4. Связь статической ошибки с величиной пространственного шага

В результате был получен следующий график (рис. 5). Как можно заметить, различные эталонные значения и процесс псевдослучайно инициализации φ_m^t и ψ_m^t формировали различные стартовые условия, из которых предложенный численный метод успешно сходиллся по значению ошибки.

На графике можно заметить, что в эксперименте №5, где эталонное значение было близко к значению некоторого внешнего воздействия на сплошную среду, в определенный момент наблюдается потеря устойчивости процесса коррекции. Одним из возможных решений данной проблемы является снижение ошибки между средним значением пространственных состояний сплошной среды и предложенной метрикой (18).

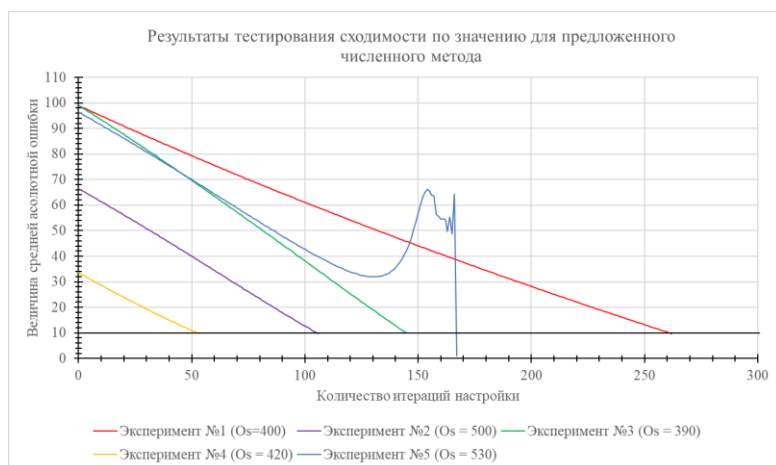


Рис. 5. Результат практического теста на сходимость к значению

Было замечено, что закономерное увеличение степени дискретизации временной сети приводит к росту качества модели, однако, это сильно снижает скорость её работы. Предполагается, что существует такая степень дискретизации, которая позволит добиться достаточно высокой точности предложенного численного метода с адекватными временными затратами. В качестве дальнейшего развития темы, помимо прочего, предполагается вывести аналитические ограничения на параметры дискретизации модели.

5. Заключение

В работе рассмотрена математическая модель численного решения параболического уравнения первого порядка с функциональной зависимостью связующего коэффициента в правой части неизвестного вида. В качестве альтернативного взгляда на нахождение данной зависимости было предложено дискретное восстановление искомых коэффициентов в каждый момент времени эволюции модели. Для этого была предложена рекуррентная функция, описывающая зависимость между t и $(t + 1)$ -м моментом времени, для которой выполняется условие непрерывной дифференцируемости первого порядка, что позволяет применять её в методе градиентного спуска. Была поставлена классическая обратная задача восстановления искомых коэффициентов по дополнительным данным о состоянии среды в отдельные моменты времени. Для неё был рассмотрен нетривиальный случай, когда состояния среды известны только в отдельные ограниченные моменты времени и градиент ошибки не может быть рассчитан для всего времени жизни модели. Был предложен подход интерполяции градиента ошибки для неизвестных состояний среды, заключенных между двумя известными состояниями при помощи цепных уравнений, решающий упомянутую проблему. Также была предложена модификация законов настройки классического стохастического градиентного спуска при помощи оптимизатора «Adam». Эта модификация позволяет решить вычислительную проблему, связанную с быстрым затуханием градиента при использовании цепных уравнений в процессе интерполяции.

Рассмотренная в данной работе модель, согласно принципу покоординатного расщепления, может быть использована со всеми предложенными модификациями в двух и трехмерных моделях. Однако она имеет ряд недостатков.

Имеется статическая ошибка между усредненным пространственным состоянием среды и предложенной аппроксимационной функцией, попытаться устранить которую предполагается в будущих исследованиях.

В процессе работы автором намеренно не давался никакой конкретный физический смысл коэффициентами φ_m^t и ψ_m^t для

того, чтобы продемонстрировать универсальность подхода. Однако при практическом применении к моделям нестационарных процессов необходимо учитывать диапазоны физических аналогов упомянутых коэффициентов, чтобы избежать нарушение условия корректности (27).

Наконец, в основе финитной модели находится явная схема аппроксимации, что накладывает определенные ограничения на размерности шагов временной и пространственных сетей.

Предполагается, что данная математическая модель может быть особенно полезна при моделировании процессов, описываемых законами Фика (диффузия) или Фурье (теплопроводность). Например, при моделировании нагрева твердых тел из сталей в промышленных печах, когда неизвестна форма изменения теплофизических параметров материала от температуры тела и одновременно нагревается несколько разнородных материалов. Или при моделировании нестационарной диффузии в твердых телах, например диффузии примесей в металлах, когда неизвестна функциональная зависимость коэффициента диффузии от параметров тела.

Литература

1. АЛИФАНОВ О.М. *Обратные задачи теплообмена*. – М: Машиностроение, 1988. – 280 с.
2. БРИЗИЦКИЙ Р.В., САРИЦКАЯ Ж.Ю. *Краевые и экстремальные задачи для уравнения реакции-диффузии конвекции с переменными коэффициентами* // Марчуковские научные чтения. – 2022. – Т. 1. – С. 102–103.
3. ВАТУЛЬЯН А.О *Обратные задачи в механике деформируемого твердого тела*. – М: Litres, 2022. – 223 с.
4. ДИМИТРИЕНКО Ю.И., БОГДАНОВ И.О., ЮРИН Ю.В. и др. *Конечно-элементное моделирование нестационарной термоустойчивости композитных конструкций* // Математическое моделирование и численные методы. – 2024. – №1 (41). – С. 38–54.
5. ДМИТРИЕВ В.И. *Обратные задачи геофизики*. – М: МАКС Пресс, 2012. – 340 с.

6. КАБАНИХИН С.И. *Обратные и некорректные задачи*. – Новосибирск: ФГУП «Издательство СО РАН», 2018. – 512 с.
7. КАЗАКОВ А.Л., НЕФЕДОВА О.А., СПЕВАК Л.Ф. *Решение двумерного нелинейного параболического уравнения теплопроводности при краевом режиме, заданном на подвижном многообразии* // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2024. – Т. 64, №2. – С. 283–303.
8. КАРТАШОВ Э. М. *Теплопроводность при переменном во времени относительном коэффициенте теплообмена* // Известия Российской академии наук. Энергетика. – 2015. – № 2. – С. 138–149.
9. КОЖАНОВ А.И., ТЕЛЕШЕВА Л.А. *Обратные задачи восстановления параметров в параболическом и гиперболическом уравнениях* // Математические заметки СВФУ. – 2022. – Т. 29, №3. – С. 57–69.
10. КОЗЛОВ А.И., КОКУРИН М.Ю. *Об интегральных уравнениях типа М.М. Лаврентьева в коэффициентных обратных задачах для волновых уравнений* // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2021. – Т. 61, №9. – С. 1492–1507.
11. ЛАВРЕНТЬЕВ М.М., ВАСИЛЬЕВ В.Г. *О постановке некоторых некорректных задач математической физики* // Сибирский математический журнал. – 1966. – Т. 7, №3. – С. 559–576.
12. ЛЮБИМОВА Т.П., РУШИНСКАЯ К.С., ЗУБОВА Н.А. *Влияние переменного коэффициента термодиффузии на конвекцию бинарной смеси в прямоугольных полостях* // Вычислительная механика сплошных сред. – 2021. – Т. 14, №2. – С. 233–244.
13. МАРЧУК Г.И. *О постановке некоторых обратных задач* // Доклады Академии наук. – 1964. – Т. 156, №3. – С. 503–506.
14. МАТУС П.П., ТУЕН В.Т.К. *Трехслойные компактные разностные схемы для параболического уравнения* // Труды Института математики НАН Беларуси. – 2024. – Т. 32, №1. – С. 110–120.

15. ПАВЛОВ К.И., ПОПОВА Т.М. *Численное решение задачи неоднородной диффузии* // ТОГУ-СТАРТ: Фундаментальные и прикладные исследования молодых. – 2020. – С. 74–79.
16. САМАРСКИЙ А.А. *Теория разностных схем*. – М.: Изд-во «Наука», – 1989. – 656 с.
17. САМАРСКИЙ А.А., ВАБИЩЕВИЧ П.Н. *Численные методы решения обратных задач математической физики*. – М.: URSS: Изд-во ЛКИ, 2015. – 478 с.
18. ТИХОНОВ А.Н., ЛЕОНОВ А.С., ЯГОЛА А.Г. *Нелинейные некорректные задачи*. – М.: ООО «Научно-издательский центр ИНФРА-М», 2017. – 306 с.
19. ЯНЕНКО Н.Н. *Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики*. – Новосибирск: Изд-во «Наука», 1967. – 197 с.
20. ELANGO S., TAMILSELVAN A., VADIVEL R. et al. *Finite difference scheme for singularly perturbed reaction diffusion problem of partial delay differential equation with nonlocal boundary condition* // Advances in Difference Equations. – 2021. – Vol. 2021. – P. 1–20.
21. ENGL H.W., GROETSCH C.W. *Inverse and ill-posed problems*. – Elsevier, 2014. – Vol. 4.
22. GRIMMER B. *Provably faster gradient descent via long steps* // SIAM Journal on Optimization. – 2024. – Vol. 34, No. 3. – P. 2588–2608.
23. HANKE M. *On the shape derivative of polygonal inclusions in the conductivity problem* // arXiv preprint. – arXiv:2402.02793. – 2024.
24. HODSON T. O. *Root mean square error (RMSE) or mean absolute error (MAE): When to use them or not* // Geoscientific Model Development Discussions. – 2022. – Vol. 2022. – P. 1–10.
25. KINGMA D.P. *Adam: A method for stochastic optimization* // arXiv preprint. – arXiv:1412.6980. – 2014.
26. KIRSCH A., KIRSCH A. *Nonlinear Inverse Problems* // An Introduction to the Mathematical Theory of Inverse Problems. – 2021. – P. 119–168.

27. KOROCHE K.A. *Numerical solution for one dimensional linear types of parabolic partial differential equation and application to heat equation* // Mathematics and Computer Science. – 2020. – Vol. 5, No. 4. – P. 76–85.
28. QUITTNER P. *An optimal Liouville theorem for the linear heat equation with a nonlinear boundary condition* // Journal of Dynamics and Differential Equations. – 2024. – Vol. 36, No. Suppl 1. – P. 53–63.
29. SYMES W.W., CHEN H., MINKOFF S.E. *Solution of an acoustic transmission inverse problem by extended inversion* // Inverse Problems. – 2022. – Vol. 38, No. 11. – P. 115003.
30. YAMAMOTO M. et al. *Inverse coefficient problem for one-dimensional evolution equation vanishing initial condition* // arXiv preprint. – arXiv:2409.20321. – 2024.
31. ZHAN H., FENG Z. *Optimal partial boundary condition for degenerate parabolic equations* // Journal of Differential Equations. – 2021. – Vol. 284. – P. 156–182.

DYNAMIC RESTORATION OF CONTINUUM COEFFICIENTS IN MODELING OF NON-STATIONARY PROCESSES

Petr Zhukov, STI NUST “MISIS”, Stary Oskol, Cand.Sc., Department Assistant (rockwell@control-mail.ru).

Abstract: When modeling nonstationary processes in continuous media by means of parabolic differential equations, we often encounter situations when the coefficient providing the connection between the left and right parts of the equation is described as a function of a set of variables, including the states of the medium under study. The recovery of this dependence, as a rule, requires the solution of inverse coefficient problems based on known states of the medium. In practice, this means that the inverse problem is solved relying, among other things, on some discrepancy between model data and known observations. Nevertheless, there are cases when such observations are critically small in time, for example, measurements of the state of the medium occur with a certain very large time step or only at the end of a nonstationary process. In such cases, retrospective observations contain time moments when the state of the medium is unknown, which makes it impossible to determine the error gradient for them and to restore the desired functional dependence with acceptable accuracy. In this paper, we propose an alternative view of the problem of restoring continuum coefficients for situations when the known states of the medium are much

smaller than the unknown ones. A continuous nonstationary process was considered as a discrete process evolving in time, and a recurrent function of discrete state change was proposed. Based on this function, a numerical method for interpolating the error gradient between the expected and actual states of the medium within any two known states was proposed. The process of recovery of discrete values of coefficients at separate moments of time by means of the stochastic gradient descent method was demonstrated on the basis of a numerical model of a generalized parabolic equation with an arbitrary external influence on the boundary.

Keywords: parametric optimization, nonstationary processes, coefficient inverse problems, parabolic equations.

УДК 517.95 + 519.63

ББК 22.193

*Статья представлена к публикации
членом редакционной коллегии А.В. Горбуновой.*

*Поступила в редакцию 31.10.2024.
Опубликована 31.03.2025.*