

АЛГОРИТМИЧЕСКАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ И СЛОЖНОСТЬ ПРОЦЕССА НЕЯВНОЙ АДАПТАЦИИ СЕТОЧНОЙ МОДЕЛИ НЕСТАЦИОНАРНОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ К НАГРЕВАЕМОМУ ВЕЩЕСТВУ¹

Жуков П. И.², Фомин А. В.³

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

Глуценко А. И.⁴

(ФГБУН Институт проблем управления
им. В.А. Трапезникова РАН, Москва)

Рассматривается процесс адаптации численной модели нестационарной теплопроводности, реализованной при помощи методов конечных разностей. Для классического представления данных моделей в большинстве приложений и задач уже доказана алгоритмическая устойчивость, но в данном случае рассматривается задача, связанная с параметрической адаптацией уравнения нестационарной теплопроводности к нагреваемому веществу, выполненной при помощи решения смежной вариационной задачи. Основа данного подхода предполагает замену теплофизических параметров рассматриваемого уравнения на свободно настраиваемые параметры и их коррекцию («обучение модели») методом стохастического градиента. Чтобы избежать попадания в области неустойчивости при «обучении», необходимы ограничения на введенные настраиваемые параметры. В данной работе такие ограничения получены на основании доказанных условий устойчивости классической конечно-разностной модели нестационарной теплопроводности. В результате численного эксперимента было установлено, что предлагаемые ограничения позволяют в среднем увеличить количество устойчивых начальных условий на 14%, увеличить количество попаданий в устойчивые траектории на 61%. Также было проведено аналитическое сравнение порядков роста алгоритмической сложности классической и модифицированной модели. В результате расчетов было установлено, что обе модели имеют порядок роста $O(n^4)$, что было подтверждено численным экспериментом.

¹ Работа выполнена при частичной поддержке гранта Президента РФ (МД.1787.2022.4).

² Пётр Игоревич Жуков, аспирант (Zhukov.petr86@yandex.ru).

³ Андрей Вячеславович Фомин, к.т.н., доцент (verner444@yandex.ru).

⁴ Антон Игоревич Глуценко, д.т.н., в.н.с. (aiglush@ipu.ru).

Ключевые слова: сеточная модель, нестационарная теплопроводность, адаптация, градиентный метод, алгоритмическая сложность, вычислительная устойчивость.

1. Введение

Глобальный тренд на цифровизацию промышленности [12, 16] привел к росту популярности неклассических подходов к управлению, таких как Advanced Process Control (APC) [14, 20]. В основе таких систем лежит идея построения надсистем оптимизации [9, 11, 17], связывающих локальные контура управления с некоторыми предиктивными моделями [14, 18], которые агрегируют информацию, обрабатывают её и выдают эффективные уставки обратно в упомянутые локальные контура.

Примером объектов, для которых особенно актуально применение подобных подходов, являются нагревательные печи, осуществляющие высокотемпературный нагрев. В контексте непрерывного производства чаще всего применяют проходные многозонные печи (рис. 1), где нагрев происходит в процессе движения заготовки от посада к выдаче. Особую популярность такие печи получили в металлургии и тяжелом машиностроении.

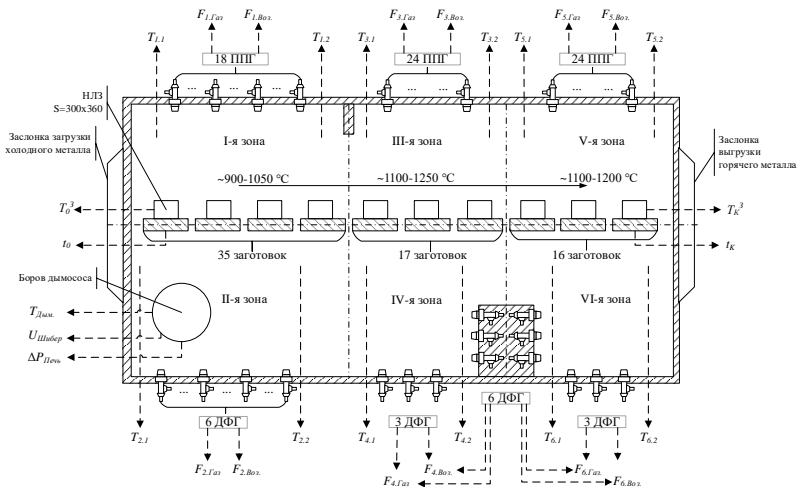


Рис. 1. Обобщенная схема многозонной проходной печи

Такого рода объекты крайне энергоемки [9, 13] из-за своего объема и температурных уставок, поэтому для них актуальна проблема повышения их энергоэффективности. Однако из-за общей нестационарности процесса нагрева без применения предиктивных моделей реализация управления, являющегося оптимальным как с точки зрения прогрева заготовок, так и с точки зрения расхода теплоносителя, является весьма нетривиальной задачей.

Одной из основных предиктивных моделей в контексте надсистемы оптимизации должна служить математическая модель нагрева заготовок, которая способна работать в режиме опережения реального времени и прогнозировать итоговую температуру заготовки еще до того, как процесс нагрева завершится. Используя подобную систему, возможно решать обратные или квазиобратные задачи и получать более оптимальные кривые нагрева (графики уставок по температуре для зон печи в различные моменты времени в соответствии с технологическими допусками).

Подобная предиктивная модель может быть построена при помощи методов машинного обучения [6, 21] или при решении некоторой краевой задачи [8, 19]. Последний подход в данном случае является «классическим», и чаще всего краевая задача ставится на базе уравнения нестационарной теплопроводности

$$(1) \quad \frac{\partial T}{\partial t} = \operatorname{div}(a \cdot \nabla T),$$

где a – это коэффициент температуропроводности, ∇T – градиент температуры по пространству, T – температура заготовки.

Граничные условия определяются, исходя из контекста моделируемой области, но для высокотемпературного нагрева в проходных печах чаще всего применяют условия 3-го рода:

$$(2) \quad \lambda \cdot \frac{\partial T}{\partial l} = \kappa(U(t) - T) + \varepsilon \cdot \sigma([U(t)]^4 - [T]^4).$$

Здесь $U(t)$ – это температура нагревающей среды; κ – коэффициент теплообмена; l – нормаль к поверхности нагреваемого вещества; λ – теплопроводность нагреваемого материала; σ – постоянная Стефана – Больцмана.

Как правило, построение модели на основании (1) и (2) происходит при помощи сеточных преобразований и получения модели конечных разностей (МКР) и, как для любой численной модели, для неё необходим анализ устойчивости получаемого решения. На сегодняшний день устойчивость базовых численных методов для разностных схем доказана и приводится, например, в работе [2]. Тем не менее, задача анализа разностных схем всё ещё является крайне актуальной из-за обилия различных приложений, в том числе и неклассических [1, 7, 10].

В работе [5] рассматривается одно из таких неклассических приложений метода конечных разностей, основанное на решении смежной вариационной задачи для устранения проблемы параметрической адаптации численного решения (1)–(2) к нагреваемому веществу. Основной идеей, предлагаемой в [5], является замена теплофизических параметров уравнения (1) на некоторые безразмерные величины и их дальнейшая оптимизация. Поскольку данное решение предполагает замены в структуре дифференциального уравнения, то становятся актуальными вопросы сохранения устойчивости численного решения предлагаемой смежной вариационной задачи.

Предполагается, что существуют такие ограничения на введенные настраиваемые безразмерные величины, которые позволяют без приведения этих величин к размерностям исходных физических параметров сохранить устойчивость модифицированной модели, гарантированную исходной МКР, и обеспечивают сходимость такого модифицированного решения к решению дифференциального уравнения. Основной целью данной работы является получение таких ограничений.

2. Анализ критериев устойчивости модифицированной модели

Пусть имеется уравнение нестационарной теплопроводности в двумерном представлении:

$$(3) \quad \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda(T)}{\rho(T) \cdot c(T)} \cdot \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right],$$

где $\lambda(T)$ – функция теплопроводности от температуры; $\rho(T)$ – функция плотности от температуры; $c(T)$ – функция теплоемкости от температуры.

На основании (3) строится модель конечных разностей (МКР) в виде системы с покоординатным расщеплением:

$$(4) \quad \begin{cases} \rho(T) \cdot c(T) \cdot \left[\frac{T_{x,y}^{n+\frac{1}{2}} - T_{x,y}^n}{\tau} \right] = \lambda(T) \cdot \left[\frac{T_{x+1}^{n+\frac{1}{2}} - 2 \cdot T_x^{n+\frac{1}{2}} + T_{x-1}^{n+\frac{1}{2}}}{h_x^2} \right], \\ \rho(T) \cdot c(T) \cdot \left[\frac{T_{x,y}^{n+1} - T_{x,y}^n}{\tau} \right] = \lambda(T) \cdot \left[\frac{T_{y+1}^{n+1} - 2 \cdot T_y^{n+1} + T_{y-1}^{n+1}}{h_y^2} \right]. \end{cases}$$

где h_x – шаг сетки вдоль Ох; h_y – шаг сети вдоль Оу; τ – шаг вдоль временной оси.

Решение МКР (4) сводится к решению двух СЛАУ, где $x \in [1, N_x]$, $y \in [1, N_y]$, которое может быть обобщено в виде

$$(5) \quad \begin{cases} A_x \cdot T_{x+1}^{n+\frac{1}{2}} - B_x \cdot T_x^{n+\frac{1}{2}} + C_x \cdot T_{x-1}^{n+\frac{1}{2}} = F_x, \\ A_y \cdot T_{y+1}^{n+1} - B_y \cdot T_y^{n+1} + C_y \cdot T_{y-1}^{n+1} = F_y. \end{cases}$$

Уравнения в системе (5) называются трехточечными разностными уравнениями второго порядка. Известно, что их можно привести к двухточечному виду, уменьшив при этом порядок. Для этого введем два коэффициента α и β :

$$(6) \quad \begin{cases} T_x^{n+\frac{1}{2}} = \alpha_x \cdot T_{x+1}^{n+\frac{1}{2}} + \beta_x, \\ T_y^{n+1} = \alpha_y \cdot T_{y+1}^{n+1} + \beta_y. \end{cases}$$

Теперь уменьшим индекс в (6) на единицу, получим решение относительно $x - 1$ и $y - 1$, и подставим в соответствующие уравнения системы (5):

$$(7) \quad \begin{cases} A_x \cdot T_{x+1}^{n+\frac{1}{2}} - B_x \cdot T_x^{n+\frac{1}{2}} + C_x \cdot \alpha_{x-1} \cdot T_x^{n+\frac{1}{2}} + C_x \cdot \beta_{x-1} = F_x, \\ A_y \cdot T_{y+1}^{n+1} - B_y \cdot T_y^{n+1} + C_y \cdot \alpha_{y-1} T_y^{n+1} + C_y \cdot \beta_{y-1} = F_y. \end{cases}$$

Таким образом было уменьшено количество неизвестных, и теперь можно свернуть уравнения системы (7) до вида (8), который эквивалентен уравнениям системы (6):

$$(8) \quad \begin{cases} T_x^{n+\frac{1}{2}} = \frac{A_x}{B_x - C_x \cdot \alpha_{x-1}} T_{x+1}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{C_x \cdot \beta_{x-1} - F_x}{B_x - C_x \cdot \alpha_{x-1}}, \\ T_y^{n+1} = \frac{A_y}{B_y - C_y \cdot \alpha_{y-1}} T_{y+1}^{n+1} + \frac{C_y \cdot \beta_{y-1} - F_y}{B_y - C_y \cdot \alpha_{y-1}}. \end{cases}$$

Согласно системе (4), значение всех коэффициентов A , B , C и F известно в каждый момент времени и может быть найдено по следующим соотношениям:

$$(9) \quad \begin{aligned} A_l = C_l = \frac{\lambda(T)}{h_l^2}; B_l = \frac{2 \cdot \lambda(T)}{h_l^2} + \frac{\rho(T) \cdot c(T)}{\tau}; \\ F_l = -\frac{\rho(T) \cdot c(T)}{\tau} \cdot T_l^n, \end{aligned}$$

где $l = x$ для первого уравнения систем (4)–(8), а $l = y$ для второго уравнения систем (4)–(8).

Соотнеся (8) и (6), можно определить формулы для расчета коэффициентов α_l и β_l для всех l , кроме $l = 1$ (в этом случае значения коэффициентов получаются из левых граничных условий). Пространственные сети в случае (4) являются локально одномерными и рассчитываются слева направо для получения прогоночных коэффициентов (прямая прогонка) и справа налево – для расчета температур в узлах (обратная прогонка). Система (8) используется для нахождения T_l для всех l , кроме $l = N_x$ и $l = N_y$ – для них температура находится из правого граничного условия задачи.

Описанный выше подход является численным методом, что подразумевает алгоритмическое решение, для которого требуется ряд условий устойчивости:

- 1) отсутствие ситуаций с делением на ноль;
- 2) отсутствие быстрого роста погрешностей округления при больших размерностях систем.

Согласно [2], для прямой прогонки достаточными условиями устойчивости являются

$$(10) \quad \begin{cases} B_l - C_l \cdot \alpha_{l-1} > 0, \\ |\alpha_l| < 1, \end{cases} \quad l = \overline{1, [N_x | N_y] - 1};$$

Также в работе [2] приводится доказанная теорема о достаточном условии корректности и устойчивости на основании (10):

$$(11) |B_l| > |A_l| + |C_l|, \forall l = 2, \overline{[N_x | N_y] - 1}, |\alpha_1| < 1 \Rightarrow |\alpha_l| < 1.$$

Разворачивая условие корректности, получим неравенство следующего вида:

$$(12) \left| \frac{2 \cdot \lambda(T)}{h_l^2} + \frac{\rho(T) \cdot c(T)}{\tau} \right| > \left| \frac{\lambda(T)}{h_l^2} \right| + \left| \frac{\lambda(T)}{h_l^2} \right|.$$

В нестационарной форме h_l и τ являются положительными величинами, не равными нулю, так же как и параметры λ , ρ и c . Таким образом, выполнение (12) гарантируется физическим обоснованием ряда величин и на практике выполняется всегда. Отсюда следует, что МКР с прямой и обратной прогонкой абсолютно устойчива и не требует дополнительных ограничений.

Теперь рассмотрим модель, предложенную в работе [5], как альтернативное решение проблемы параметрической адаптации МКР прямого решения к нагреваемому веществу. Модель предполагает модификацию конечно-разностной системы (4) до вида:

$$(13) \begin{cases} \overline{\omega_x^{(n)}} \cdot \left[\frac{T_{x,y}^{n+1} - T_{x,y}^n}{\tau} \right] = \overline{\varphi_x^{(n)}} \cdot \left[\frac{T_{x+1}^{n+1} - 2 \cdot T_x^{n+1} + T_{x-1}^{n+1}}{h_x^2} \right], \\ \overline{\omega_y^{(n)}} \cdot \left[\frac{T_{x,y}^{n+1} - T_{x,y}^n}{\tau} \right] = \overline{\varphi_y^{(n)}} \cdot \left[\frac{T_{y+1}^{n+1} - 2 \cdot T_y^{n+1} + T_{y-1}^{n+1}}{h_y^2} \right]. \end{cases}$$

При этом введенные настраиваемые вектора покрывают собой всю временную ось $n \in [1, N]$:

$$(14) \begin{cases} \overline{\omega_l^{(n)}} = [\omega_l^{(1)} \quad \omega_l^{(2)} \quad \omega_l^{(3)} \quad \dots \quad \omega_l^{(N)}], \\ \overline{\varphi_l^{(n)}} = [\varphi_l^{(1)} \quad \varphi_l^{(2)} \quad \varphi_l^{(3)} \quad \dots \quad \varphi_l^{(N)}]. \end{cases}$$

При классическом решении (4) параметры λ , ρ и c восстанавливались путем аппроксимации дискретных значений соответствующих величин из справочной литературы. У данного подхода имеется ряд недостатков, которые более детально изложены в упомянутой ранее работе [5]. Данная замена (13) позволяет перейти от параметрической адаптации к нагреваемому веществу посредством внешних моделей аппроксимации к решению вариационной задачи:

$$(15) \begin{cases} \{u_1(n), u_1(n+1), \dots, u_1(N)\}, \frac{1}{2} \sum_{i=1}^V (y_i - g_1(T_x^{(n)}, u_1(n)_i))^2 \rightarrow \min, \\ \{u_2(n), u_2(n+1), \dots, u_2(N)\}, \frac{1}{2} \sum_{i=1}^V (y_i - g_2(T_y^{(n)}, u_2(n)_i))^2 \rightarrow \min, \end{cases}$$

где $u_1(n) = \{\varphi_x^{(n)}, \omega_x^{(n)}\}$, $u_2(n) = \{\varphi_y^{(n)}, \omega_y^{(n)}\}$; y_i – это некоторая эталонная температура уже нагретого вещества, например, измеренная пирометром после выгрузки заготовки из печи; V – количество наблюдений в выборке вариаций.

Суть подхода заключается в решении смежной задачи, когда расчетная температура находится методом прямого решения на основе систем (4)–(8), а затем выполняется коррекция параметров путем решения обратной задачи (15) методом градиентного спуска.

Основная проблема предложенного подхода заключается в том, что обратная задача накладывает ограничение на прямую задачу. В частности, это касается ограничений, которые гарантируют устойчивость предложенной процедуры. Рассмотрим эту проблему детальнее.

Оптимизационная задача (15) – это смежная вариационная задача, при которой, через МКР для прямого решения получают значения функций $g_1(\bullet)$ и $g_2(\bullet)$, а при решении обратной задачи – коррекции φ и ω .

В локально-одномерном виде (15) решается псевдопараллельно, т.е. происходит коррекция сначала параметра φ , затем ω с учетом предыдущего значения φ . В таком случае форма плоскости ошибки будет иметь N^2 -мерный вид, при этом нельзя однозначно сказать, является ли решаемая задача выпуклой или нет, так как для этого нет аналитических уравнений, только алгоритмы численного решения. Следовательно, применение методов градиентного спуска приведет к нахождению субоптимального значения [15], которое будет находиться в допустимом диапазоне оценки некоторой метрики, например, абсолютной средней ошибки.

Другими словами, задача (15) при обратном решении является задачей машинного обучения, для которой характерна в том числе проблема локальных минимумов, и чтобы избежать её,

предполагалось инициализировать параметры φ и ω в области вещественных чисел с отрицательной частью $\mathbb{R}_1 \in (-D_{max} + t_k; +D_{max} - t_k)$, где D_{max} – это программные ограничения хранения вещественных чисел, t_k – параметр коррекции окна инициализации.

При условии $(\varphi, \omega) \in \mathbb{R}_1$, очевидно, нарушается устойчивость, так как в отрицательной полуплоскости множества не выполняется неравенство (12). Для того чтобы проиллюстрировать это, перепишем его с учетом сделанных замен:

$$(16) \quad \left| \frac{2 \cdot \varphi_l^{(n)}}{h_l^2} + \frac{\omega_l^{(n)}}{\tau} \right| > \left| \frac{\varphi_l^{(n)}}{h_l^2} \right| + \left| \frac{\varphi_l^{(n)}}{h_l^2} \right|.$$

Условие положительности второго слагаемого левой части неравенства не выделялось как необходимое при рассмотрении (12), так как оно автоматически выполняется по физическим соображениям (плотность, временной шаг или теплоемкость не могут быть отрицательными). Для того чтобы неравенство (16) выполнялось, необходимо наложить ограничение на параметр ω :

$$(17) \quad \begin{cases} \omega_l^{(n)} \neq 0, \\ \frac{\omega_l^{(n)}}{\tau} > 0. \end{cases}$$

Поскольку шаг по времени (τ) не может быть отрицательным по определению, то условия (17) выполняются всегда при $\omega_l^{(n)} > 0$.

Очевидно, что для того чтобы устойчивость модифицированной МКР гарантировалась устойчивостью классической МКР, необходимо выполнение (16), однако сделанные замены в (13) с условием (17) могут нарушить процесс сходимости конечно-разностного решения к решению дифференциального уравнения. Опираясь на данное предположение, была выдвинута следующая гипотеза.

Гипотеза №1. Существуют такие ограничения для τ , h_l , $\varphi_l^{(n)}$, включая смещения $\omega_l^{(n)}$, $\varphi_l^{(n)}$ относительно друг друга, при которых устойчивость модифицированной МКР прямого решения гарантируется доказанной устойчивостью классической МКР и эквивалентна ей.

3. Анализ сходимости модифицированной МКР прямого решения

Опираясь на работы [3, 4], можно предположить, что достаточным условием сходимости прямого конечно-разностного решения к решению дифференциального уравнения для задачи нестационарной теплопроводности является соблюдение следующего неравенства:

$$(18) \quad \tau < \frac{\rho \cdot c \cdot h_l^2}{2 \cdot \lambda}.$$

Произведем эквивалентные (13) замены φ и ω в (18) и получим условие вида

$$(19) \quad \tau < \frac{\omega_l^{(n)} \cdot h_l^2}{2 \cdot \varphi_l^{(n)}}.$$

Теперь перенесем всё в левую часть и сравним с нулем:

$$(20) \quad \frac{\tau \cdot 2 \cdot \varphi_l^{(n)} - \omega_l^{(n)} \cdot h_l^2}{2 \cdot \varphi_l^{(n)}} < 0.$$

Рассмотрим следующие ситуации, при которых выполняется данное условие:

$$(21) \quad \begin{cases} \left\{ \begin{array}{l} 2 \cdot \varphi_l^{(n)} < 0, \\ \tau \cdot 2 \cdot \varphi_l^{(n)} - \omega_l^{(n)} \cdot h_l^2 > 0; \end{array} \right. \\ \left\{ \begin{array}{l} 2 \cdot \varphi_l^{(n)} > 0, \\ \tau \cdot 2 \cdot \varphi_l^{(n)} - \omega_l^{(n)} \cdot h_l^2 < 0. \end{array} \right. \end{cases}$$

Для условий $2 \cdot \varphi_l^{(n)} < 0$ и $2 \cdot \varphi_l^{(n)} > 0$ вторые неравенства соответствующих систем истинны при $|\tau \cdot 2 \cdot \varphi_l^{(n)}| < |\omega_l^{(n)} \cdot h_l^2|$. Но для $2 \cdot \varphi_l^{(n)} < 0$ требуется $\omega_l^{(n)} < 0$, что противоречит (17).

Пусть $2 \cdot \varphi_l^{(n)} = \omega_l^{(n)}$, тогда неравенство $\tau \cdot 2 \cdot \varphi_l^{(n)} < \omega_l^{(n)} \cdot h_l^2$ будет зависеть только от τ и h_l^2 , которые всегда положительны, поэтому знак модуля можно опустить. Опираясь на вышеизложенное, получим условие следующего вида:

$$(22) \quad |2 \cdot \varphi_l^{(n)} \cdot \tau| < |\omega_l^{(n)} \cdot h_l^2| \Big|_{2 \cdot \varphi_l^{(n)} = \omega_l^{(n)}} \Rightarrow \frac{t_{max}}{N} < \frac{X^2}{L^2} \Rightarrow \frac{L^2 \cdot t_{max} - N \cdot X^2}{N \cdot L^2} < 0.$$

Здесь $L = [N_x|N_y]$ – количество шагов по пространству в зависимости от приложения к модели (Ox или Oy соответственно); N – количество шагов по времени; X – линейный размер по пространству; t_{max} – общее модельное время.

Сравнивая (22) с нулем, получаем комбинированное решение наподобии (21), при этом знаменатель $N \cdot L^2 > 0$ всегда, так как количество узлов сетей всегда положительное число. Исходя из этого, единственным условием выполнения неравенства (22) служит $L^2 \cdot t_{max} - N \cdot X^2 < 0$. Модель на основе предлагаемого решения должна быть постоянна по своей структуре, а это значит, что количества L и N не могут изменяться в процессе её работы, тогда пусть $t_{max} = X^2$ и получаем, что обязательным условием выполнения неравенства становится (22) становится $L^2 < N$. В действительности чаще всего $t_{max} \gg X^2$, что приводит к тому, что $N \gg L^2$, величина кратности разницы между N и L^2 при этом будет зависеть от t_{max} , X^2 , $\varphi_l^{(n)}$, $\omega_l^{(n)}$. Важно упомянуть, что t_{max} и X – это внешние по отношению к модели параметры, они являются входными данными и определяют часть граничных условий задачи, поэтому рассматривать их как настраиваемые нельзя. Таким образом, условие вида $N \gg L^2$ может не соблюдаться при определенных значениях t_{max} , X^2 . При этом известно, что временные затраты на численное решение будут расти с ростом N и L , что может привести к невозможности получения результата в режиме реального времени. Опираясь на данный факт, была выдвинута следующая гипотеза.

Гипотеза №2. Существует такое смещение $\omega_l^{(n)}$ относительно $\varphi_l^{(n)}$, при котором условие сходимости (22) выполняется при нестрогом неравенстве вида $N \geq L^2$ вместо строго $N > L^2$ и не зависит от t_{max} и X^2 .

Рассмотрим (22) с учетом $2 \cdot \varphi_l^{(n)} \neq \omega_l^{(n)}$, тогда неравенство примет следующий вид:

$$(23) \quad \frac{2 \cdot \varphi_l^{(n)} \cdot L^2 \cdot t_{max} - \omega_l^{(n)} \cdot N \cdot X^2}{N \cdot L^2} < 0.$$

Аналогичным образом, опираясь на решение (21) и тот факт, что $(N, L) \in \mathbb{N}$, можем заключить, что знаменатель никогда не будет меньше нуля, тогда условие (23) будет истинно только при соблюдении условия (24):

$$(24) \quad 2 \cdot \varphi_l^{(n)} \cdot L^2 \cdot t_{max} - \omega_l^{(n)} \cdot N \cdot X^2 < 0.$$

Выразим (24) относительно N , чтобы получить неравенство относительно шагов вдоль временной оси ($\omega_l^{(n)} > 0$):

$$(25) \quad \frac{2 \cdot \varphi_l^{(n)} \cdot L^2 \cdot t_{max}}{\omega_l^{(n)} \cdot X^2} < N \Rightarrow \frac{2 \cdot \varphi_l^{(n)}}{\omega_l^{(n)}} \cdot \frac{t_{max}}{X^2} \cdot L^2 < N$$

Прологарифмируем правую и левую часть условия (25) по основанию 10:

$$(26) \quad \lg \left(\frac{2 \cdot \varphi_l^{(n)}}{\omega_l^{(n)}} \cdot \frac{t_{max}}{X^2} \cdot L^2 \right) < \lg(N).$$

Представим правую часть (26) в виде сумм логарифмов:

$$(27) \quad \lg \left(\frac{2 \cdot \varphi_l^{(n)}}{\omega_l^{(n)}} \right) + \lg \left(\frac{t_{max}}{X^2} \right) + \lg(L^2) < \lg(N).$$

Предположим, что $\lg(L^2) = \lg(N)$, и выразим (27) относительно первого слагаемого правой части:

$$(28) \quad \lg \left(\frac{2 \cdot \varphi_l^{(n)}}{\omega_l^{(n)}} \right) < -\lg \left(\frac{t_{max}}{X^2} \right).$$

Используя неравенство (28), имеется возможность определить начальные условия инициализации параметров $\varphi_l^{(n)}$ и $\omega_l^{(n)}$, а также определить их смещения относительно друг друга, при котором (22) выполняется с нестрогим условием на количество шагов по временной и пространственной сети $N \geq L^2$.

Вместо самих значений t_{max} и X получим их оценки, для этого пусть $t_{max} \in (t_1, t_2)$, где t_1 и t_2 – это некоторый известный диапазон, в который заключены значения t_{max} всей условной выборки входных данных, такой же диапазон имеется и для $X^2 \in (X_1^2, X_2^2)$. Тогда условие (28) можно переписать в следующем виде:

$$(29) \quad \lg \left(\frac{2 \cdot \varphi_l^{(n)}}{\omega_l^{(n)}} \right) < -\lg \left(\frac{(t_2 - t_1)}{(X_2^2 - X_1^2)} \right).$$

Воспользуемся свойствами логарифма и перепишем (29) в виде:

$$(30) \quad \lg(2 \cdot \varphi_l^{(n)}) - \lg(\omega_l^{(n)}) < -\lg \left(\frac{(t_2 - t_1)}{(X_2^2 - X_1^2)} \right).$$

Поскольку левая часть логарифмического неравенства (30) может быть вычислена в момент инициализации модели, из (30) можно получить порядок величины смещения областей значений $\omega_l^{(n)}$ относительно $\varphi_l^{(n)}$:

$$(31) \quad \begin{aligned} & -\lg(\omega_l^{(n)}) < -\lg\left(\frac{(t_2 - t_1)}{(X_2^2 - X_1^2)}\right) - \lg(2 \cdot \varphi_l^{(n)}) \Big|_{x(-1)} \Rightarrow \\ & \Rightarrow \lg(\omega_l^{(n)}) > \lg\left(\frac{(t_2 - t_1)}{(X_2^2 - X_1^2)}\right) + \lg(2 \cdot \varphi_l^{(n)}). \end{aligned}$$

Можно предположить, что для выполнения (31) параметр $\omega_l^{(n)}$ должен принадлежать некоторой области (32), чтобы гарантировать выполнение условия (22) при $N \geq L^2$:

$$(32) \quad \omega_l^{(n)} \in \left(10^{\lg(2 \cdot \varphi_l^{(n)}) + \lg\left(\frac{(t_2 - t_1)}{(X_2^2 - X_1^2)}\right) + 1}; (+D_{max} - t_\kappa) \cdot 10^{\lg(2 \cdot \varphi_l^{(n)}) + \lg\left(\frac{(t_2 - t_1)}{(X_2^2 - X_1^2)}\right) + 1} \right).$$

Отсюда можно сделать вывод о том, что первичная инициализация параметров должна быть выполнена в соответствии с системой

$$(33) \quad \left\{ \begin{aligned} & \varphi_l^{(n)} \in (0; +D_{max} - t_\kappa), \\ & \omega_l^{(n)} \in \left(10^{\lg(2 \cdot \varphi_l^{(n)}) + \lg\left(\frac{(t_2 - t_1)}{(X_2^2 - X_1^2)}\right) + 1}; (+D_{max} - t_\kappa) \cdot 10^{\lg(2 \cdot \varphi_l^{(n)}) + \lg\left(\frac{(t_2 - t_1)}{(X_2^2 - X_1^2)}\right) + 1} \right). \end{aligned} \right.$$

Таким образом предполагается, что сходимость модифицированной МКР прямого решения к решению дифференциального уравнения гарантируется доказанной сходимостью классической МКР и эквивалентна ей при соблюдении следующих условий:

$$(34) \quad \begin{aligned} & \varphi_l^{(n)} > 0, \omega_l^{(n)} > 0, N \geq L^2, \\ & \omega_l^{(n)} \in \left(10^{\lg(2 \cdot \varphi_l^{(n)}) + \lg\left(\frac{(t_2 - t_1)}{(X_2^2 - X_1^2)}\right) + 1}; (+D_{max} - t_\kappa) \cdot 10^{\lg(2 \cdot \varphi_l^{(n)}) + \lg\left(\frac{(t_2 - t_1)}{(X_2^2 - X_1^2)}\right) + 1} \right). \end{aligned}$$

Порядок роста временных затрат на получение численного решения модифицированной или классической МКР зависит от количества шагов по пространственным и временной сетям. На основании условий (34) было сделано предположение, что

классическая МКР и модифицированная с условиями (34) имеют одинаковый порядок роста временных затрат. Проверим его.

4. Анализ порядка роста временных затрат

Выдвигается предположение, согласно которому порядок роста временных затрат модифицированной МКР равен порядку роста классической МКР, а сами временные затраты процесса «обучения» МКР зависят только от размеров исходных данных для обучения.

Для того чтобы доказать данное предположение, проведем оценку алгоритмической сложности и определим порядок роста временных затрат для классической МКР. При использовании неявной разностной схемы с прямой и обратной прогонкой обобщенный алгоритм для одного запуска модели будет иметь следующий вид (рис. 2).

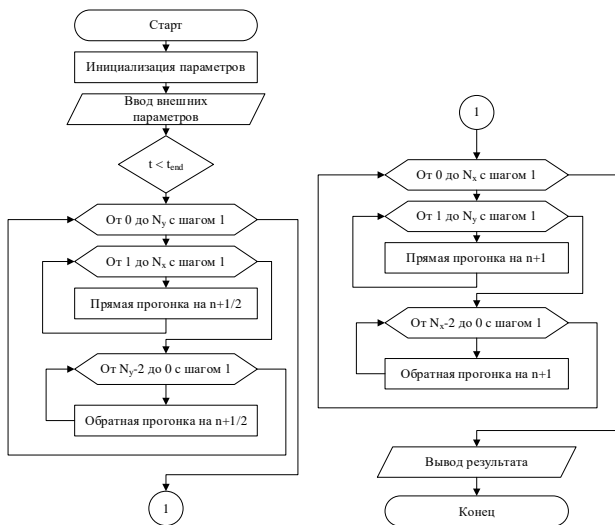


Рис. 2. Обобщенный алгоритм единичного запуска классической МКР

Согласно этому алгоритму, можно представить функцию временной сложности $f(\bullet)$ в следующем виде:

$$(35) f(N_x, N_y, N) = \sum_{t=0}^N \left(\sum_{j=0}^{N_y} \left[\sum_{i=1}^{N_x} 1 + \sum_{i=N_x-2}^0 1 \right] + \sum_{i=0}^{N_x} \left[\sum_{j=1}^{N_y} 1 + \sum_{j=N_y-2}^0 1 \right] \right)$$

Упростим (35) до следующего вида:

$$\begin{aligned} & \sum_{t=0}^N \left(\sum_{j=0}^{N_y} \left[\sum_{i=1}^{N_x} 1 + \sum_{i=N_x-2}^0 1 \right] + \sum_{i=0}^{N_x} \left[\sum_{j=1}^{N_y} 1 + \sum_{j=N_y-2}^0 1 \right] \right) \Rightarrow \\ (36) \quad & \Rightarrow \sum_{t=0}^N \left(\sum_{j=0}^{N_y} [2 \cdot N_x - 1] + \sum_{i=0}^{N_x} [2 \cdot N_y - 1] \right) \Rightarrow \\ & \Rightarrow \sum_{t=0}^N \left([2 \cdot N_x N_y + 2 \cdot N_x - N_y - 1] + [2 \cdot N_y N_x + 2 \cdot N_y - N_x - 1] \right). \end{aligned}$$

Раскрыв последнюю сумму в (36), получим вид функции $f(\bullet)$, приближенно оценивающий временную сложность конечно-разностной модели:

$$(37) f(N_x, N_y, N) = (4 \cdot N_x N_y + N_x + N_y - 2)(N + 1).$$

Пусть имеет место равномерная сеть, где $N_x = N_y = n$, тогда

(37) примет вид полинома 2-й степени:

$$f_1(n, N) = (4 \cdot n^2 + 2 \cdot n - 2)(N + 1);$$

$$(38) f_1(n, N) \in O(n^2, N).$$

Функция (38) относится к асимптотическому классу роста $O(n^2, N)$. Теперь рассмотрим алгоритм конечно-разностной модели, в структуре единичного запуска которой находится алгоритм коррекции (рис. 3).

Рассмотрим функцию приближенной временной сложности:

$$(39) f_2(N_x, N_y, N) = \sum_{t=0}^{t_{end}} \left(\sum_{j=0}^{N_y} \left[\sum_{i=1}^{N_x} 1 + \sum_{i=N_x-2}^0 1 \right] + \sum_{i=0}^{N_x} \left[\sum_{j=1}^{N_y} 1 + \sum_{j=N_y-2}^0 1 \right] + \sum_{i=N}^0 2 \right).$$

Часть функции (39) упрощается в (36), поэтому сразу приведем её к конечному виду с раскрытием последней суммы, предполагая, что $N_x = N_y = n$:

$$(40) f_2(N_x, N_y, N) = (4 \cdot n^2 + 2 \cdot n + 2 \cdot N)(N + 1).$$

Важно заметить, что в действительности функции сложности (38) и (40) будут иметь отличные от представленных коэффициенты, но не порядок сложности, так как все процедуры алгоритма были упрощены до единичных.

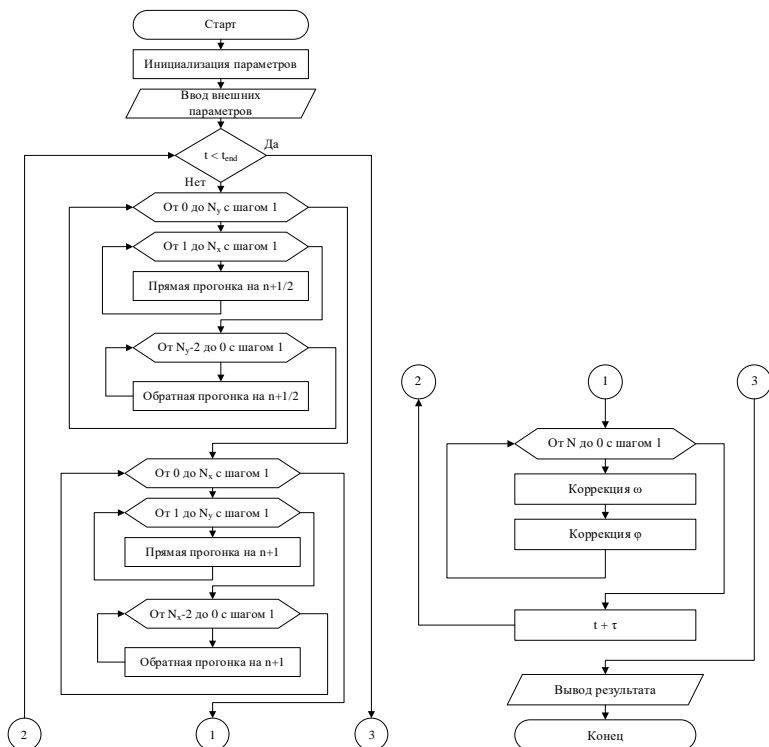


Рис. 3. Обобщенный алгоритм единичного запуска модифицированной МКР (с коррекцией параметров)

Пусть имеется общее требование для выбора количества шагов по пространственным и временным сетям:

$$(41) \quad N, N_x, N_y \in \mathbb{N}.$$

Для устойчивой модели по условию (22) минимальным требованием на N является:

$$(42) \quad N = L^2 \Rightarrow \big|_{L=N_x=N_y=n} N = n^2.$$

Подставим (42) в (38) и в (40) и раскроем скобки:

$$(43) \begin{cases} f_1(n) = 4 \cdot n^4 + 2 \cdot n^3 + 2 \cdot n^2 + 2 \cdot n - 2, \\ f_2(n) = 6 \cdot n^4 + 2 \cdot n^3 + 6 \cdot n^2 + 2 \cdot n. \end{cases}$$

Как видно из анализа функций $f_1(n)$ и $f_2(n)$, они принадлежат к одному классу роста $O(n^4)$. Таким образом, предлагаемая модификация алгоритма не приводит к росту алгоритмической сложности модели.

Таким образом, можно сделать вывод, что существенное влияние на алгоритмическую сложность будет оказывать только количество этих единичных включений алгоритма в процессе «обучения» МКР (рис. 4).

Таким образом, функция алгоритмической сложности будет иметь вид:

$$(44) f_3(V) = \sum_{i=1}^V i \Rightarrow \frac{V(V+1)}{2} \approx \frac{1}{2}V^2; f_3(V) \in \Theta(V^2).$$

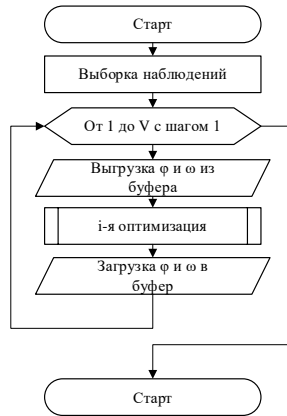


Рис. 4. Обобщенный алгоритм «обучения» МКР

На основании (43), можно сделать вывод, что предлагаемый подход не увеличивает порядок роста алгоритмической сложности самого единичного включения модели. Рост временных затрат обусловлен необходимостью множественного включения модели при решении оптимизационной задачи. Согласно (44),

временные затраты процесса оптимизации из-за множественного включения являются классом роста n^2 .

5. Численный эксперимент

Для того чтобы подтвердить сделанные выше предположения и гипотезы, был проведен численный эксперимент. Для этого применена написанная на С# модель МКР в двух вариациях: классическая с параметрической адаптацией при помощи регрессионных уравнений и модифицированная с настройкой введенных параметров φ и ω . Для начала тестировалась модифицированная МКР с настройкой φ и ω со сделанными выше предположениями, касающимися ограничений устойчивости.

Моделировался нагрев заготовок в шестизонной проходной печи нагрева. В качестве входных данных использовались сведения, полученные с действующего объекта одного из металлургических комбинатов Белгородской области. Входной массив разбивался на обучающее и тестовое подмножество в соотношении 85 к 15 при общем объеме 6097 записей, представляющих пространственный набор данных.

Для проведения тестов на устойчивость модифицированная модель была представлена в трех вариациях: 1) М1 – модель без ограничений и смещений; 2) М2 – модель только с ограничением $N \geq L^2$; 3) М3 – модель со смещениями и со всеми ограничениями.

Предполагалось запустить три модели с фиксированным шагом по пространству ($N_x = N_y = 25$) и различным шагом по времени ($N_{M1} = 50$, $N_{M2} = N_{M3} = 625$), при этом в случае модели М3 инициализировать параметры ω со смещением.

Всего было проведено 60 запусков, в процессе тестирования были выделены две отметки: 200 и 400 эпох обучения. Результаты пусков модели приведены в таблице 1.

Таблица 1. Результаты тестов на устойчивость

| | Общее кол-во запусков | Успешно прошли 200 эпох обучения | Успешно прошли 400 эпох обучения | Неустойчивые запуски |
|----|-----------------------|----------------------------------|----------------------------------|----------------------|
| М1 | 60 | 30 | 6 | 30 |
| М2 | 60 | 45 | 34 | 15 |
| М3 | 60 | 47 | 38 | 13 |

Как можно заметить, в результате введения ограничений процент запусков моделей, завершивших полный цикл в 400 эпох обучения, увеличивается значительно по сравнению с моделью без каких-либо ограничений (рис.5). При этом общее количество устойчивых пусков возросло, но по-прежнему существуют такие пуски моделей, при которых возникает аварийное завершение работы программы обучения.

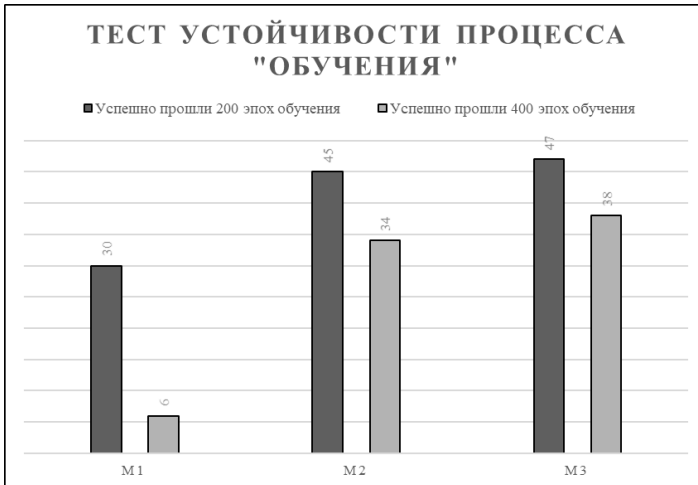


Рис. 5. Сравнительная гистограмма теста на устойчивость

Предполагается, что помимо сделанных ранее предположений, существуют также дополнительные ограничения, которые не были учтены при переходе к смежной вариационной задаче.

Таким образом, следование ограничениям, предлагаемым в данной работе, повышает процент устойчивых запусков, но не решает проблему устойчивости целиком. Согласно таблице 2, количество устойчивых траекторий, для которых наблюдаются «удачные» начальные условия и стабильный процесс обучения, увеличилось, в среднем, на 61%, при этом количество устойчивых («удачных») начальных условий при сделанных ограничениях, увеличилось, в среднем, на 14%.

Таблица 2. Результаты тестов на устойчивость

| | Процент успешно устойчивых прогонов от устойчивых запусков | Общий процент устойчивых запусков |
|----|--|-----------------------------------|
| M1 | 20 % | 50 % |
| M2 | 76 % | 57 % |
| M3 | 81 % | 64 % |

Порядка 36% остающихся неустойчивыми запусков возникают при нарушении условия неотрицательности φ ввиду отсутствия строгих ограничений на сами функции коррекции параметра. Требуется такая модификация используемого оптимизатора (стохастического градиентного спуска), чтобы параметр φ мог асимптотически приближаться к нулю, но не пересекать его.

Для проверки предположения о том, что модифицированная МКР имеет такой же порядок алгоритмической сложности, как и классическая МКР, было решено провести эксперимент с двумя моделями: 1) МК – классическая МКР без решения обратной задачи; 2) ММ – модифицированная МКР с решением обратной задачи и коррекцией φ и ω . Тестировалось время в секундах на единственный запуск модели (1 набор входных данных – 1 выход) при разных значениях N , N_x и N_y (таблица 3).

Таблица 3. Результаты тестов временных затрат

| | $N = 100,$ $L = 10$ | $N = 625,$ $L = 25$ | $N = 10000,$ $L = 100$ |
|-------------|------------------------|------------------------|---------------------------|
| МК | 0,05 с | 2,1545 с | 92 с |
| ММ | 0,08 с | 3,345 с | 134 с |
| Соотношение | 62,5 | 64,40956652 | 68,65671642 |

Как можно заметить, модифицированная МКР имеет большие временные затраты, чем модель классическая, однако соотношение показывает, что время расчета растет пропорционально. Наблюдаемая погрешность является следствием полуручного анализа времени без привлечения специализированных программных средств оценки процессорного времени.

Таким образом, проведенный эксперимент подтверждает сделанное ранее предположение о равенстве классов роста алгоритмической сложности между модифицированной МКР и классической.

6. Заключение

В результате проведенного численного эксперимента было установлено, что сделанные ранее предположения об ограничениях (34) позволяют повысить алгоритмическую устойчивость модифицированной численной модели, представленной в работе [5]. При этом сделанные в работе предположения об эквивалентности устойчивости классической МКР нестационарной теплопроводности и модифицированной МКР не подтвердились в полной мере.

Данный факт может свидетельствовать о необходимости введения дополнительных ограничений на процесс решения смежной вариационной задачи или введения дополнительных переменных.

Сделанные предположения относительно алгоритмической сложности подтвердились. Модель только прямого решения обладает тем же порядком роста временных затрат, что и модель со смежным решением обратной задачи. Различие во времени (см. таблицу 3) объясняется разницей коэффициентов уравнений алгоритмической сложности.

В ходе дальнейших исследований предполагается более глубоко изучить результаты экспериментов на устойчивость и рассмотреть возможность введения в модель «виртуального» шага по времени (τ_v) для обеспечения выполнения условия (18). Также в качестве альтернативы предполагается введение ограничений на процесс коррекции параметров с целью обеспечения соблюдения условий (34).

Литература

1. БУЛАНОВ С.Г. *Анализ устойчивости систем линейных дифференциальных уравнений на основе преобразования разностных схем* // Мехатроника, автоматизация, управление. – 2019. – Т. 20, №9. – С. 542–549.
2. ВЕРЖБИЦКИЙ В.М. *Основы численных методов*. – Москва-Берлин: Директ-Медиа, 2021. – 849 с.
3. ДЕГТЯРЁВ С.Л. *Об устойчивости разностных схем с переменными весами для одномерного уравнения теплопроводности* // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1994. – Т. 34, №8–9. – С. 1316–1322.
4. ДЕГТЯРЕВ С.Л. *Устойчивость локально неявных разностных схем для двумерного нестационарного уравнения теплопроводности* // Препринты ИПМ им. МВ Келдыша. – 1994. – №76. – С. 1–24.
5. ЖУКОВ П.И., ФОМИН А.В., ГЛУЩЕНКО А.И. *Неявная адаптация сеточной модели нестационарной теплопроводности к нагреваемому веществу* // Управление большими системами. – 2022. – Вып. 100. – С. 78–106.
6. ЖУКОВ П.И., ГЛУЩЕНКО А.И., ФОМИН А.В. *Модель для прогнозирования температуры заготовки по ретроспекции ее нагрева на основе бустинга структуры* // Вестник Новосибирского государственного университета. Серия: Информационные технологии. – 2020. – Т. 18, №4. – С. 11–27.
7. МАТУС П.П. *Критерий устойчивости разностных схем для нелинейных дифференциальных задач* // Дифференциальные уравнения. – 2021. – Т. 57, №6. – С. 821–829.
8. ОЖЕРЕЛКОВА Л.М., САВИН Е.С. *Температурная зависимость нестационарной теплопроводности твердых тел* // Russian Technological Journal. – 2019. – Т. 7, №2. – С. 49–60.
9. ПАРСУНКИН Б.Н., АНДРЕЕВ С.М., МУХИНА Е.Ю. *Экстремально-оптимизирующее автоматизированное управление нагревом непрерывнолитых заготовок в печах проходного типа* // Вестник Череповецкого государственного университета. – 2021. – №5 (104). – С. 22–34.

10. ФРОЛОВ А.Ю., ДРУЖИНИНА О.В. *Устойчивость разностных схем численного решения обобщенной системы уравнений Максвелла в задачах моделирования Z-пинчей* // Электромагнитные волны и электронные системы. – 2020. – Т. 25, №3. – С. 5–13.
11. BARBASOVA T.A., FILIMONOVA A.A., ZAKHAROV A.V. *Energy-saving oriented approach based on model predictive control system* // IEEE Int. Russian Automation Conference. – IEEE, 2019. – P. 243-252.
12. BELYAEV A.M., IVANOV I.N., BELYAEV E.D. *Digital Technologies in Russian Metallurgy* // Institute of Scientific Communications Conference. – Springer, Cham, 2021. – P. 1817–1824.
13. FENG Y., WU M., CHEN L., CHEN X., CAO W., DU S., PEDRYCZ W. *Hybrid intelligent control based on condition identification for combustion process in heating furnace of compact strip production* // IEEE Trans. on Industrial Electronics. – 2021. – Vol.69, No. 3. – P. 2790–2800
14. HADJISKI M., DELIISKI N. *Advanced Process Control of Distributed Parameter Plants by Integration First Principle Modeling and Case-Based Reasoning: Part 1: Framework of DPP Control with Initial Uncertainty* // Int. Conf. Automatics and Informatics – 2020 (ICAI–2020). – IEEE, 2020. – P. 1–6.
15. HARVEY N. J., LIAW C., PLAN Y., RANDHAWA S *Tight analyses for non-smooth stochastic gradient descent* // Conference on Learning Theory. – PMLR, 2019. – P. 1579–1613.
16. SCHULTE M. *Steel Production Efficiency Improvements by Digitalization* // REWAS 2022: Developing Tomorrow’s Technical Cycles. – 2022. – Vol. 1. – P. 487–488.
17. SHCHERBAKOV M.V., GLOTOV A.V., CHEREMISINOV S.V. *Proactive and predictive maintenance of cyber-physical systems* // Cyber-Physical Systems: Advances in Design & Modelling. – Springer, Cham, 2020. – P. 263-278.
18. VASILYEVA N., FEDOROVA E., KOLESNIKOV A. *Big data as a tool for building a predictive model of mill roll wear* // Symmetry. – 2021. – Vol. 13, No. 5. – P. 859–870.

19. YU B., HU P., SAPUTRA A. A., GU Y. *The scaled boundary finite element method based on the hybrid quadtree mesh for solving transient heat conduction problems* // Applied Mathematical Modelling. – 2021. – Vol. 89. – P. 541–571.
20. ZANOLI S. M., BARBONI L., COCCHIONI F., PEPE C. *Advanced process control aimed at energy efficiency improvement in process industries.* // IEEE Int. Conf. on Industrial Technology (ICIT–2018). – IEEE, 2018. – P. 57–62.
21. ZANOLI S. M., PEPE C., MOSCOLONI E., ASTOLFI G. *Data Analysis and Modelling of Billets Features in Steel Industry* // Sensors. – 2022. – Vol. 22, No. 19. – P. 7333.

ALGORITHMIC STABILITY AND COMPLEXITY OF IMPLICIT ADAPTATION OF NONSTATIONARY THERMAL CONDUCTIVITY MESH MODEL TO HEATED SUBSTANCE

Petr Zhukov, STI NUST “MISIS”, Stary Oskol, postgraduate student (Zhukov.petr86@yandex.ru).

Andrey Fomin, STI NUST “MISIS”, Stary Oskol, Candidate of Technical Sciences, docent (verner444@yandex.ru)

Anton Glushchenko, V.A. Trapeznikov Institute of Control Sciences of RAS, Moscow, Doctor of Sciences, docent (aiglush@ipu.ru).

Abstract: This paper deals with the process of adaptation of a numerical model of nonstationary thermal conductivity implemented with the help of finite difference methods. The algorithmic stability has already been proved for the classical representation of these models in most applications and problems, but in this case we consider a problem related to the parametric adaptation of the equation of nonstationary heat conduction to the heated substance implemented by solving of the related variational problem. The basis of this approach implies replacement of thermophysical parameters of the equation in question by freely adjustable parameters and their adaptation ("model training") by a stochastic gradient method. Optimization of algorithmic equations that do not have an analytical form is associated with unstable initial conditions and "training" trajectories. To avoid falling into these regions we need to impose restrictions on the adjustable parameters. In this paper, such constraints are derived on the basis of proven stability conditions for the classical finite-difference model of non-stationary thermal conductivity. As a result of the numerical experiments, it is shown that the proposed constraints allow one to increase, on average, the number of stable initial conditions by 13%, as well as the number of experiments when stable trajectories are achieved - by 61%. In addition to this result, an analytical

comparison of the growth orders of algorithmic complexity of the classical model and the modified one is also made. As a result of the calculations, it is found that both models have a growth order of $O(n^4)$, which is confirmed by numerical experiments.

Keywords: mesh model, nonstationary thermal conductivity, adaptation, gradient descent method, algorithmic complexity, computational stability.

УДК 519.63

ББК 22.193

DOI: 10.25728/ubs.2023.101.3

*Статья представлена к публикации
членом редакционной коллегии П.С. Щербаковым.*

Поступила в редакцию 01.12.2022.

Опубликована 31.01.2023.