

РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ СЛОЖНОГО
ТЕПЛООБМЕНА ПРИ ПОМОЩИ МАШИННОГО
ОБУЧЕНИЯК.С. КУЗНЕЦОВ , Е.В. АМОСОВА *Представлено О.С. Розановой*

Abstract: An algorithm based on machine learning for solving the problem of boundary control for a complex heat transfer model is considered. The control is a vector function included in the boundary conditions multiplicatively. The system consists of the heat equation and P_1 – approximation of the radiative transfer equation. The solution of the control problem is modeled using the principle «bang-bang».

Based on the numerical-analytical solution of a direct non-stationary nonlinear problem using the FreeFem++ software package, a dataset for machine learning is formed in order to predict the quality functional that characterizes the smoothing of the temperature field to the specified field by the input parameters of the model. The solvability of the control problem is proved, necessary optimality conditions are obtained, and a numerical algorithm to find the control function is considered. A neural network optimization problem is formulated to determine the multidimensional boundary control. The stochastic method is used to solve the optimization problem. A comparative analysis of the solution of the inverse problem obtained using machine learning with the calculations obtained by solving the optimality system in the case of one boundary control

is carried out. The potential of machine learning for the problems of parameters recovery in physical medium is shown.

Keywords: boundary control problem, machine learning, neural networks, complex heat transfer, optimization.

1 Введение

В последние годы возросла актуальность разработки новых способов решения обратных задач сложного теплообмена. Это объясняется практической значимостью решения данных задач. В частности, модели сложного теплообмена используются при описании процесса отливки стекла [1], теплообмена внутри камер сгорания энергетических установок [2], а также при описании процедуры лазерной термотерапии [3]. Наиболее важными с точки зрения прикладных задач являются задачи восстановления параметров среды, зависящих от внешних условий. Отдельный интерес в этой области представляют задачи оптимального управления взаимодействующими процессами. В силу этого возникает необходимость исследования задачи управления векторнозначной функцией. Прямая задача основывается на математической модели кондуктивного радиационного теплообмена, включающей интегро-дифференциальное уравнение переноса излучения. Поскольку решение уравнения переноса излучения сопряжено с большими вычислительными затратами, часто вместо него используют P_1 -приближение [4].

Классические методы решения задач оптимального управления основаны либо на решении системы оптимальности, которая является необходимым условием существования минимума функционала качества, либо на поиске прямого решения вариационных задач. Одним из способов решения задачи оптимальности является метод, основанный на принципе «bang-bang» [5, 6, 7]. В данном методе множество допустимых управлений состоит из кусочно-постоянных функций с конечным числом разрывов.

Отметим, что методы, построенные на выводе необходимых условий оптимальности, а также прямые методы решения вариационных задач обладают недостатками – в частности, сложностью поиска численных решений прямой и сопряженной задач. Другим существенным недостатком является большой объем временных и вычислительных ресурсов, требуемый для решения поставленной задачи. Данный недостаток обусловлен использованием итерационного алгоритма поиска решения, при котором прямая и сопряженная задачи решаются несколько раз.

В данной работе рассматривается альтернативный подход – применение машинного обучения для вычисления величины критерия качества в задачах оптимального граничного управления сложным теплообменом. В предлагаемом подходе также используется принцип «bang-bang», упомянутый ранее. Целевая функция нейронной сети строится на поиске

точек переключений режимов управления. Такое множество управлений позволяет ускорить обработку данных и сократить время для обучения сети. Целью работы является численное решение обратных задач сложного теплообмена с помощью методов машинного обучения.

2 Постановка задачи

Нестационарная задача радиационного и кондуктивного теплообмена описывается системой, состоящей из уравнения теплопроводности и P_1 – приближения уравнения переноса излучения в ограниченной области $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ [7, 8]:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} - a\Delta\theta + b\kappa_a(|\theta|\theta^3 - \varphi) = 0, \quad (1)$$

$$- \alpha\Delta\varphi + \kappa_a(\varphi - |\theta|\theta^3) = 0, \quad x \in \Omega, \quad t \in (0, T). \quad (2)$$

Граничные и начальные условия имеют следующий вид:

$$a\partial_n\theta + \beta(\theta - \theta_b) = 0, \quad \alpha\partial_n\varphi + \gamma(\varphi - \theta_b^4) = 0, \quad x \in \Gamma, \quad t \in (0, T), \quad (3)$$

$$\theta|_{t=0} = \theta_0, \quad x \in \Omega, \quad (4)$$

где θ – нормализованная температура, φ – нормализованная интенсивность излучения, κ_a – коэффициент поглощения, через ∂_n обозначается производная в направлении внешней нормали \mathbf{n} к границе области $\Gamma = \partial\Omega$.

Коэффициенты $a, b, \alpha, \beta, \gamma$ выражаются следующим образом:

$$a = \frac{k}{\rho c_v} \left[\frac{\text{см}^2}{\text{с}} \right], \quad b = \frac{4\sigma n^2 T_{max}^3}{\rho c_v} \left[\frac{\text{см}}{\text{с}} \right], \quad \alpha = \frac{1}{3\kappa - A\kappa_s} [\text{см}],$$

$$\beta = \frac{h}{\rho c_v} \left[\frac{\text{см}}{\text{с}} \right], \quad \gamma = \frac{\epsilon}{2(2 - \epsilon)},$$

где h – коэффициент теплоотдачи границы области [кг/(с³К)], ϵ – степень черноты поверхности, k – коэффициент теплопроводности [кг·см/(с³К)], ρ – плотность среды [кг/см³], c_v – коэффициент удельной теплоемкости [см²/с²К], σ – постоянная Стефана-Больцмана [кг/(с³К⁴)], n – показатель преломления, T_{max} – максимальная температура в ненормализованной модели [К], κ – коэффициент полного взаимодействия, κ_s – коэффициент рассеяния, A – коэффициент анизотропии рассеяния, $A \in [-1; 1]$.

Считаем, что Ω – ограниченная липшицева область. Введем следующие пространства: L^p , $1 \leq p \leq \infty$ – пространство Лебега интегрируемых в p -ой степени функций, H^1 – пространство Соболева W_2^1 , $L^p(0, T; X)$ – пространство Лебега функций со значениями в банаховом пространстве X .

Обозначим через $W = \{y \in L^2(0, T; H^1): y' \in L^2(0, T; (H^1)')\}$, где $(H^1)'$ – пространство, сопряженное с пространством H^1 . Здесь и далее $y' = dy/dt$.

Нашей целью является численный анализ рассматриваемых обратных задач для модели (1)–(4). Рассмотрим задачу приближения температурного поля к заданному во всей области с помощью управления коэффициентами γ, β . Определим множество допустимых управлений

$$U_{ad} = \{\gamma \in L^2(\Gamma), \beta \in L^2(\Gamma): \gamma_1 \leq \gamma \leq \gamma_2, \beta_1 \leq \beta \leq \beta_2\},$$

где $0 < \beta_0 \leq \beta_1, 0 < \gamma_0 \leq \gamma_1$.

Множество U_{ad} является замкнутым выпуклым множеством в $L^2(\Gamma) \times L^2(\Gamma)$.

Обозначим через $Y = W \times L^2(0, T; H^1(\Omega))$ — пространство состояний системы (1)–(4).

Определение. Пара $\{\theta, \varphi\} \in Y$ называется слабым решением задачи (1)–(4), соответствующим управлению $\{\gamma, \beta\} \in U_{ad}$, если для любых $u \in H^1(\Omega), v \in H^1(\Omega)$ почти всюду на $(0, T)$ выполняются равенства

$$\begin{aligned} (\theta', u) + \int_{\Omega} a \nabla \theta \nabla u \, dx dy + \int_{\Gamma} \beta (\theta - \theta_b) u \, d\Gamma + \int_{\Omega} b \kappa_a (|\theta|^3 - \varphi) u \, dx dy &= 0, \\ \int_{\Omega} \alpha \nabla \varphi \nabla v \, dx dy + \int_{\Gamma} \gamma (\varphi - \theta_b^4) v \, d\Gamma + \int_{\Omega} \kappa_a (\varphi - |\theta|^3) v \, dx dy &= 0 \end{aligned}$$

и при этом $\theta|_{t=0} = \theta_0$.

Аналогично, как и в [8], доказывается, что при выполнении следующих условий на исходные данные

- (i): $\gamma_1, \gamma_2, \beta_1, \beta_2 \in L^\infty(\Gamma), 0 < \gamma_0 \leq \gamma_1 \leq \gamma_2, 0 < \beta_0 \leq \beta_1 \leq \beta_2, \gamma_0, \beta_0 = \text{const};$
- (ii): $\theta_b \in L^\infty(\Gamma \times (0, T)), \theta_b \geq 0, 0 \leq \theta_0 \in L^\infty(\Omega), d\theta_b/dt \in L^2(\Gamma \times (0, T))$

существует единственное слабое решение задачи (1)–(4), обладающее следующими свойствами:

$$0 \leq \theta \leq M, \quad 0 \leq \varphi \leq M^4,$$

где $M = \max\{\|\theta_b\|_{L^\infty(\Gamma \times (0, T))}, \|\theta_0\|_{L^\infty(\Omega)}\}$.

Заменим обратную задачу восстановления коэффициентов соответствующей экстремальной задачей, которая заключается в минимизации функционала качества

$$J[\gamma, \beta] = \frac{1}{2} \int_0^T \int_{\Omega} |\theta - \theta_d|^2 \, dx dy dt \rightarrow \inf_{\{\gamma, \beta\} \in U_{ad}}. \quad (5)$$

на множестве управлений U_{ad} . Здесь θ — решение системы (1)–(4), соответствующее управлению $\{\gamma, \beta\}$.

Если решение задачи (5) существует, то будем называть его оптимальным управлением, а соответствующую пару $\{\theta, \varphi\}$ — оптимальным состоянием.

Аналогично [8] устанавливается ограниченность снизу и дифференцируемость по Фреше функционала (5).

Используя подход, предложенный в [8], нетрудно доказать теорему о существовании решения задачи (5).

Теорема 1. При выполнении условий (i) и (ii) решение задачи (5) существует.

Доказательство.

Обозначим через $J_0 = \inf\{J[\gamma, \beta]: \{\gamma, \beta\} \in U_{ad}, \{\theta, \varphi\} \in Y\}$. Существует последовательность $\{\gamma_j, \beta_j\} \in U_{ad}, \{\theta_j, \varphi_j\} \in Y$ такая, что $J[\gamma_j, \beta_j] \rightarrow J_0$ при $j \rightarrow \infty$. Последовательность $\{\gamma_j, \beta_j\}$ ограничена в $L^2(\Gamma) \times L^2(\Gamma)$. Следовательно, существует подпоследовательность (обозначим ее также), такая, что $\gamma_j \rightarrow \gamma$ слабо в $L^2(\Gamma)$, $\beta_j \rightarrow \beta$ слабо в $L^2(\Gamma)$.

В [8] доказано, что $\forall j$ существует слабое решение $\{\theta_j, \varphi_j\}$ задачи (1)–(4), для которого имеют место оценки

$$\|\theta_j\|_W + \|\varphi_j\|_{L^2(0,T;H^1(\Omega))} < C,$$

где постоянная C не зависит от j . Эти оценки гарантируют возможность выбора такой подпоследовательности (обозначим её также), что

$$\theta_j \rightarrow \theta \text{ слабо в } L^2(0, T; H^1(\Omega)), \quad \varphi_j \rightarrow \varphi \text{ слабо в } L^2(0, T; H^1(\Omega)).$$

Компактность вложения $W \subset L^2(0, T; L^2(\Omega))$ обеспечивает сходимость $\theta_j \rightarrow \theta$ сильно в $L^2(0, T; L^2(\Omega))$. В работе [8] доказана сходимость $\varphi_j \rightarrow \varphi$ сильно в $L^2(0, T; L^2(\Omega))$ и обоснован предельный переход в интегральных тождествах определения слабого решения, за исключением одного слагаемого. Обоснование предельного перехода требуется в следующем выражении

$$\int_0^T \int_{\Gamma} \beta_j \theta_j u \, d\Gamma dt \rightarrow \int_0^T \int_{\Gamma} \beta \theta u \, d\Gamma dt \quad \forall u \in L^2(0, T; H^1(\Omega)). \quad (6)$$

Для справедливости (6) достаточно доказать, что $\theta_j \rightarrow \theta$ сильно в $L^2(0, T; L^2(\Gamma))$.

Также, как и в [8], заметим, что имеет место следующее неравенство [9]: для любого $\varepsilon > 0$ существует постоянная C_ε для которой

$$\int_{\Gamma} |\theta_j - \theta|^2 \, d\Gamma \leq \varepsilon \int_{\Omega} |\nabla \theta_j - \nabla \theta|^2 \, dx dy + C_\varepsilon \int_{\Omega} |\theta_j - \theta|^2 \, dx dy.$$

Так как $\theta_j \rightarrow \theta$ сильно в $L^2(0, T; L^2(\Omega))$ и слабо в $L^2(0, T; H^1(\Omega))$, то

$$\limsup_{j \rightarrow \infty} \int_0^T \int_{\Gamma} |\theta_j - \theta| \, d\Gamma dt \leq \varepsilon \quad \forall \varepsilon > 0.$$

Следовательно, существует подпоследовательность (обозначим её также θ_j), такая, что $\theta_j \rightarrow \theta$ сильно в $L^2(0, T; L^2(\Gamma))$. Таким образом, мы

обосновали что $\{\theta, \varphi\}$ является слабым решением задачи (1)–(4). В силу полунепрерывности снизу функционала $J[\gamma, \beta]$ относительно слабой топологии в $L^2(\Gamma) \times L^2(\Gamma)$ заключаем, что J_0 является решением задачи (5).

Следовательно, любая предельная (в смысле слабой сходимости) точка минимизирующей последовательности является решением задачи (5).

В [8] рассматривается задача управления модели сложного теплообмена (1)–(4) с одним параметром управления. В качестве управления выбирается функция $\gamma \in L^2(\Gamma)$ такая, что $\gamma_1 \leq \gamma(x) \leq \gamma_2$, где γ_1 и γ_2 имеют тот же смысл, что и в условии (i), функция $\beta \in L^\infty(\Gamma)$ считается заданной. Задача оптимального управления заключается в нахождении функции γ , при которой функционал $J[\gamma]$ вида (5) принимает минимальное значение, где β, θ_d – заданные функции. Доказана разрешимость задачи управления, получены необходимые условия оптимальности и предложен численный алгоритм нахождения функции управления.

Вывод необходимых условий оптимальности первого порядка для задачи (5) основан на оценке производной отображения $\{\gamma, \beta\} \rightarrow \{\theta, \varphi\}$. Опираясь на результаты работы [8], получим необходимые условия минимума для задачи (5).

Опишем кратко схему вывода системы оптимальности. Для оптимальной пары $\{\hat{\gamma}, \hat{\beta}\}, \{\hat{\theta}, \hat{\varphi}\}$ рассмотрим

$$\begin{aligned} \gamma_\varepsilon &= \hat{\gamma} + \varepsilon(\gamma - \hat{\gamma}), & \beta_\varepsilon &= \hat{\beta} + \varepsilon(\beta - \hat{\beta}), \\ g_\varepsilon &= (\theta - \hat{\theta})/\varepsilon, & r_\varepsilon &= (\psi - \hat{\psi})/\varepsilon, \end{aligned} \quad (7)$$

где $\varepsilon \in (0, 1]$, $\{\theta, \varphi\}$ – состояние системы (1)–(4), соответствующее управлению $\{\gamma, \beta\} \in U_{ad}$.

После подстановки (7) в (1)–(4), получим следующую систему дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_\varepsilon}{\partial t} - a\Delta g_\varepsilon + b\kappa_a(4\hat{\theta}^3 g_\varepsilon - r_\varepsilon) &= -b\kappa_a(6\varepsilon\hat{\theta}^2 g_\varepsilon^2 + 4\varepsilon^2\hat{\theta}g_\varepsilon^3 + \varepsilon^3 g_\varepsilon^4), \\ -\alpha\Delta r_\varepsilon - \kappa_a(4\hat{\theta}^3 g_\varepsilon - r_\varepsilon) &= \kappa_a(6\varepsilon\hat{\theta}^2 g_\varepsilon^2 + 4\varepsilon^2\hat{\theta}g_\varepsilon^3 + \varepsilon^3 g_\varepsilon^4), \end{aligned}$$

вместе с краевыми условиями

$$\begin{aligned} a\partial_n g_\varepsilon + \hat{\beta}g_\varepsilon + \varepsilon g_\varepsilon(\beta - \hat{\beta}) + (\beta - \hat{\beta})(\hat{\theta} - \theta_d) &= 0, & x \in \Gamma, \\ \alpha\partial_n r_\varepsilon + \hat{\gamma}r_\varepsilon + \varepsilon r_\varepsilon(\gamma - \hat{\gamma}) + (\gamma - \hat{\gamma})(\hat{\varphi} - \theta_d^4) &= 0, & x \in \Gamma, \end{aligned}$$

соответствующую начальному условию

$$g_\varepsilon|_{t=0} = 0. \quad (8)$$

Далее сформулируем три леммы, доказательство которых проводится также, как доказательство соответствующих лемм в работе [8].

Лемма 1. Для любого $\varepsilon > 0$ верна следующая оценка

$$\|g_\varepsilon\|_{L^\infty(0,T;L^2(\Omega))} + \|g_\varepsilon\|_{L^2(0,T;H^1(\Omega))} + \|g'_\varepsilon\|_{L^2(0,T;H^{-1}(\Omega))} \leq C,$$

где C – постоянная, не зависящая от ε .

Заметим, что, рассуждая также, как в работе [8], можем получить оценку

$$\|r_\varepsilon\|_{L^2(0,T;H^1(\Omega))} \leq C,$$

где C — постоянная, не зависящая от ε .

Лемма 2. Пусть $\{\hat{\theta}, \hat{\varphi}\}$ — оптимальное состояние, соответствующее оптимальному управлению $\{\hat{\gamma}, \hat{\beta}\}$. Тогда для каждого управления $\{\gamma, \beta\} \in U_{ad}$ существует состояние $\{g, r\}$, удовлетворяющее условиям

$$\begin{aligned} \frac{\partial g}{\partial t} - a\Delta g + b\kappa_a(4\hat{\theta}^3 g - r) &= 0, & -\alpha\Delta r - \kappa_a(4\hat{\theta}^3 g - r) &= 0, \\ a\partial_n g + \hat{\beta}g + (\beta - \hat{\beta})(\hat{\theta} - \theta_d) &= 0, & x \in \Gamma, \\ \alpha\partial_n r + \hat{\gamma}r + (\gamma - \hat{\gamma})(\hat{\varphi} - \theta_d^4) &= 0, & x \in \Gamma, \\ g|_{t=0} &= 0 \end{aligned} \quad (9)$$

и вариационному неравенству

$$\int_0^T \int_\Omega (\theta - \theta_d)g \, dx dy dt \geq 0. \quad (10)$$

Лемма 3. Пусть $\{\hat{\theta}, \hat{\varphi}\}$ — оптимальные состояние, соответствующее оптимальному управлению $\{\hat{\gamma}, \hat{\beta}\}$. Сопряженное состояние определяется следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p_1}{\partial t} - a\Delta p_1 + 4\kappa_a\hat{\theta}^3(bp_1 - p_2) &= \theta - \theta_d, & -\alpha\Delta p_2 - \kappa_a(bp_1 - p_2) &= 0, \\ a\partial_n p_1 + \hat{\beta}p_1 &= 0, & \alpha\partial_n p_2 + \hat{\gamma}p_2 &= 0, & x \in \Gamma, \\ p_1|_{t=T} &= 0. \end{aligned} \quad (11)$$

Существует единственное решение $\{p_1, p_2\} \in Y$ сопряженной системы (11).

Теорема 2. Для любой оптимальной пары $\{\hat{\theta}, \hat{\varphi}\}$, соответствующей оптимальному управлению $\{\hat{\gamma}, \hat{\beta}\}$, существует единственное сопряженное состояние $\{p_1, p_2\} \in Y$, удовлетворяющее (11), а также справедливо неравенство

$$\int_0^T \int_\Gamma (\beta - \hat{\beta})(\hat{\theta} - \theta_d)p_1 \, d\Gamma dt + \int_0^T \int_\Gamma (\gamma - \hat{\gamma})(\hat{\varphi} - \theta_d^4)p_2 \, d\Gamma dt \leq 0, \quad (12)$$

верное для любых $\{\gamma, \beta\} \in U_{ad}$.

Доказательство. Умножим первое и второе уравнение (9) соответственно на p_1, p_2 , а уравнения в (11) на g, r соответственно скалярно в $L^2(\Omega)$. Учитывая условия в (9), (11) и интегрируя полученные выражения по t от 0 до T , получим равенство

$$\int_0^T \int_\Gamma (\beta - \hat{\beta})(\hat{\theta} - \theta_d)p_1 \, d\Gamma dt + \int_0^T \int_\Gamma (\gamma - \hat{\gamma})(\hat{\varphi} - \theta_d^4)p_2 \, d\Gamma dt =$$

$$= - \int_0^T \int_{\Omega} (\theta - \theta_d) g \, dx dy dt$$

из которого, в силу леммы 3, следует утверждение теоремы.

На основании теоремы 2 получим принцип максимума для оптимального состояния. Обозначим через

$$\psi_1(s) = \int_0^T (\hat{\theta} - \theta_d) p_1 \, dt, \quad \psi_2(s) = \int_0^T (\hat{\varphi} - \theta_d^4) p_2 \, dt, \quad s \in \Gamma.$$

Тогда из вариационного неравенства (10) следует

$$\psi_1(\xi_1 - \hat{\beta}) + \psi_2(\xi_2 - \hat{\gamma}) \leq 0 \quad (13)$$

для любых ξ_1, ξ_2 , таких, что $\xi_1 \in [\beta_1, \beta_2]$, $\xi_2 \in [\gamma_1, \gamma_2]$.

Неравенство (13) представляет аналог принципа «bang-bang», основанного на выборе крайних значений из множества ограничений. В зависимости от знака ψ_1 и ψ_2 , получаем

$$[\hat{\gamma}, \hat{\beta}] = \begin{cases} [\gamma_1, \beta_1], & \text{если } \psi_1(s) < 0, \quad \psi_2(s) < 0; \\ [\gamma_2, \beta_2], & \text{если } \psi_1(s) > 0, \quad \psi_2(s) > 0; \\ [\gamma_1, \beta_2], & \text{если } \psi_1(s) < 0, \quad \psi_2(s) > 0; \\ [\gamma_2, \beta_1], & \text{если } \psi_1(s) > 0, \quad \psi_2(s) < 0; \end{cases}$$

для почти всех $s \in \Gamma$.

В данной работе для нахождения решения экстремальной задачи (5) не будет учитываться сопряженная система. Используя свойство релейности оптимального управления, предлагается новая оптимизационная технология определения параметров управления на основе машинного обучения. Алгоритм поиска оптимального управления состоит из следующих этапов:

- 1). Нахождение решения прямой задачи численно-аналитическим способом при фиксированных значениях параметров управления;
- 2). Формирование базы данных численных решений прямой задачи для различных значений исходных данных;
- 3). Обучение нейронной сети на прогнозирование осредненного по области определения пространственных переменных функционала качества

$$\tilde{J}[\gamma, \beta] = J[\gamma, \beta] / \text{mes } \Omega$$

по физическим характеристикам процесса, а также параметрам на границе и в начале процесса;

- 4). Минимизация функции нейронной сети при помощи стохастического алгоритма.

Для формирования базы данных выполнены численные эксперименты в виде решений прямой задачи (1)–(4) методом конечных элементов при помощи мультифизического программного обеспечения FreeFem++ [10].

Для моделирования оптимального управления используется свойство релейности граничного управления. На полученной базе данных предлагается обучить классическую модель регрессии XGBoost Regressor [11] и глубокую нейронную сеть, обладающей большей точностью, но требующей значительных вычислительных ресурсов. Для нахождения минимума нейронной сети используется обобщенный алгоритм имитации отжига. Одним из преимуществ предлагаемой технологии является независимость метода от количества параметров управления.

3 Численное моделирование

Численное решение задачи (1)–(4) находится методом конечных элементов. Дискретизация по времени реализуется при помощи обратного метода Эйлера. Для линеаризации нелинейных слагаемых применяется разложение функции в ряд Тейлора. Полученная линеаризованная модель характеризуется тем, что решение на новом временном слое находится из линейной вариационной задачи. Сходимость полученного итерационного процесса обоснована в работе [12].

Далее будем использовать пространство конечных элементов H_h^1 вместо пространства Соболева H^1 . Пусть $\theta_h^n \in H_h^1$, $\varphi_h^n \in H_h^1$, где $f_h^n = f(x, y, n\tau)$, $(x, y) \in \Omega_h$, $n = 1, \dots, N$, $\tau = T/N$.

Конечномерный оператор, порожденный билинейной формой слабого решения задачи (1)–(4), имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} a_h(\theta_h^{n+1}, \varphi_h^{n+1}, u, v) = & \\ & = \tau^{-1} \int_{\Omega} \theta_h^{n+1} u \, dx dy + a \int_{\Omega} \nabla \theta_h^{n+1} \nabla u \, dx dy + \alpha \int_{\Omega} \nabla \varphi_h^{n+1} \nabla v \, dx dy + \\ & + b\kappa_a \int_{\Omega} (4(\theta_h^n)^3 \theta_h^{n+1} - \varphi_h^{n+1}) u \, dx dy + \kappa_a \int_{\Omega} (\varphi_h^{n+1} - 4(\theta_h^n)^3 \theta_h^{n+1}) v \, dx dy + \\ & + \int_{\Gamma} \beta \theta_h^{n+1} u \, d\Gamma + \int_{\Gamma} \gamma \varphi_h^{n+1} v \, d\Gamma, \quad \forall u, v \in H_h^1. \end{aligned}$$

Конечномерный оператор линейной формы слабого решения задачи (1)–(4) определен равенством

$$\begin{aligned} \ell_h(u, v) = & -\tau^{-1} \int_{\Omega} \theta_h^n u \, dx dy + \\ & + 3b\kappa_a \int_{\Omega} (\theta_h^n)^4 u \, dx dy - 3\kappa_a \int_{\Omega} (\theta_h^n)^4 v \, dx dy + \\ & + \int_{\Gamma} \beta \theta_b u \, d\Gamma + \int_{\Gamma} \gamma \theta_b^4 v \, d\Gamma \quad \forall u, v \in H_h^1. \end{aligned}$$

Численное исследование системы

$$a_h(\theta_h^{n+1}, \varphi_h^{n+1}, u, v) = \ell_h(u, v), \quad \forall u, v \in H_h^1$$

проводится в программном комплексе FreeFem++. Рассчитывается модель сложного теплообмена в двумерной, симметричной области. Так как далее в процессе генерации базы данных линейный размер области варьируются, то максимальный размер конечного элемента, гарантирующий достаточную погрешность численного метода, подстраивается при помощи автоадаптации сетки, выполненной программной функцией FreeFem++.

В силу симметричности области, точку переключения отдельно для каждого граничного коэффициента будем искать на половине стороны квадрата. На рисунке 1, на стороне квадрата длины L , указан диапазон поиска точки переключения, симметричной относительно средней линии квадрата, из интервала $[0.05L; 0.495L]$, а также схематично изображено симметричное расположение возможной точки переключения, обозначенной красным цветом, на расстоянии $0.3L$ от края границы.

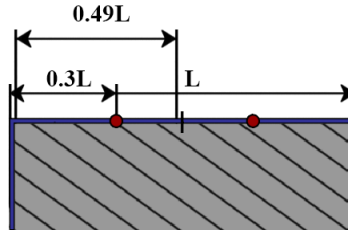


Рис. 1. Схематическое изображение точки переключения

При решении обратной задачи используется аналог принципа «bang-bang», при котором на границе происходит переключение управления на крайние значения множества управлений. На рисунке 2 изображены примеры возможных графиков функций $\gamma(x)$ и $\beta(x)$ с точками переключения, расположенными на расстоянии $0.3L$ от начала границы. При этом необходимо отметить, что точки переключения для обеих функций независимы и в общем случае могут не совпадать.

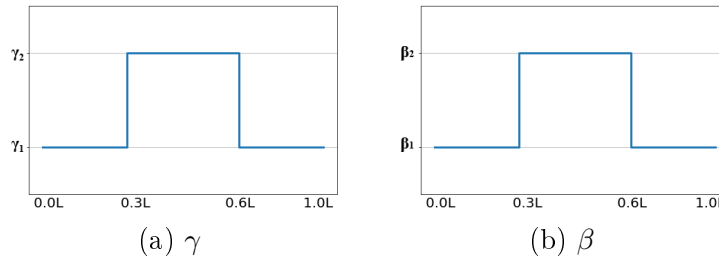


Рис. 2. Графики граничных функций

4 База данных

Для формирования базы данных необходимо определить параметры процесса, которые будут использованы для машинного обучения, а также пределы их вариации. В данном случае под параметрами понимаются физические характеристики среды, а также граничные и начальные функции. Полный список параметров, а также их единицы измерения представлены в таблице 1. Здесь γ_1, γ_2 – экстремальные значения функции γ , h_1, h_2 – экстремальные значения функции h , используемые для расчета функции β . Описание всех остальных параметров приведено в разделе 2.

Таблица 1. Варьируемые параметры и их распределение

Название	Мин. значение	Макс. значение	Единицы измерения
ρ	$0.15 \cdot 10^{-6}$	$5000 \cdot 10^{-6}$	кг/см ³
c_v	$5 \cdot 10^6$	$52 \cdot 10^6$	см ² /с ² К
T_{max}	273	3000	К
n	1	2	–
k	0	$5 \cdot 10^3$	кг · см/с ³ К
κ	0.01	1	см ⁻¹
κ_s	0	0.01	см ⁻¹
A	-1	1	–
L	10	200	см
θ_b	0.0	1.0	–
θ_0	0.0	1.0	–
θ_d	0.0	1.0	–
γ_1	0.0	0.5	–
γ_2	0.0	0.5	–
h_1	0.1	500	кг/с ³ К
h_2	0.1	500	кг/с ³ К
P_1	$0.005L$	$0.495L$	–
P_2	$0.005L$	$0.495L$	–

Генерация данных осуществлялась при помощи случайной выборки из равномерного распределения в пределах минимального и максимального значения для каждого из параметров, указанных в таблице 1. Пределы вариации параметров были выбраны достаточно широкими для возможности решения поставленной задачи практически для любых физических сред, а также граничных и начальных условий.

Общее время наблюдения составило $T=300$ [с], временной шаг $\tau=0.1$ [с].

Всего было сгенерировано 20000 наборов параметров, для каждого из которых была численно решена прямая задача, а также получено соответствующее значение функционала качества \tilde{J} .

5 Машинное обучение

На сформированной базе данных были обучены нейронная сеть и, основанная на методе градиентного бустинга, модель регрессии XGBoost Regressor. Входными параметрами являлись все параметры из таблицы 1, единственным выходным параметром являлось значение функционала качества $\tilde{J}[\gamma, \beta]$, введенного в разделе 2.

Для оценки качества работы моделей использовались метрики R^2 , MAE и SMAPE.

Коэффициент детерминации, R^2 :

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - x_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}.$$

Средняя абсолютная ошибка, MAE:

$$\text{MAE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - x_i|.$$

Средняя абсолютная ошибка в процентах, MAPE:

$$\text{MAPE} = \frac{100}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|y_i - x_i|}{|x_i|}.$$

Здесь y_i – прогнозируемые значения, x_i – значения, полученные при численном моделировании, $\bar{y} = (1/n) \sum_{i=1}^n y_i$.

Так как функционал \tilde{J} принимает в том числе и значения от 0 до 1, то средняя абсолютная ошибка в процентах (MAPE) может иметь непропорционально высокие значения и не является адекватным способом процентной оценки качества прогнозирования модели. Для адекватной процентной оценки предлагается использовать симметричную абсолютную ошибку в процентах, SMAPE:

$$\text{SMAPE} = \frac{100}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|y_i - x_i|}{|y_i| + |x_i|},$$

Данная метрика учитывает разницу между прогнозируемыми значениями и данными численных экспериментов и имеет предел от 0 до 100%, где более низкое значение соответствует более высокому качеству прогнозирования.

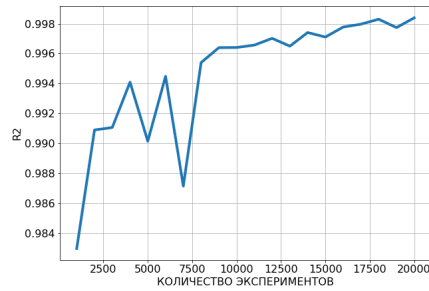
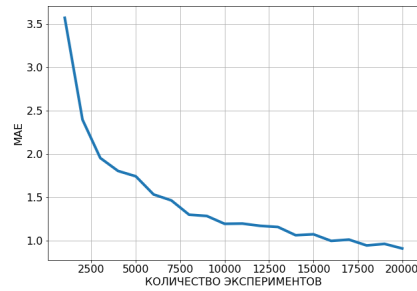
Для обучения и валидации моделей использовалась десятиблочная кросс-валидация. Были получены результаты, представленные в таблице 2.

Нейронная сеть показала лучший результат. Обучающие кривые для неё представлены на рисунке 3.

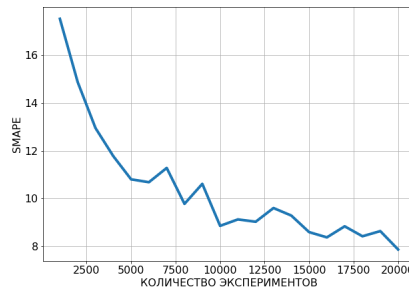
Из полученных данных видно, что модель прогнозирует значение функционала \tilde{J} с достаточно высокой точностью. На это указывает высокое значение R^2 , близкое к единице, а также низкие значения SMAPE=7.87%,

ТАБЛИЦА 2. Результаты работы моделей машинного обучения

	XGBoost	Нейронная сеть
R2	0.983	0.998
MAE	5.61	0.91
SMAPE	28.42%	7.87%

(a) R^2 

(b) MAE



(c) SMAPE

Рис. 3. Обучающие кривые для нейронной сети

которое показывает среднюю процентную ошибку и $MAE=0.91$, которое показывает среднюю абсолютную ошибку.

6 Оптимальное управление

Для решения задачи оптимального управления использовалась минимизация обученной нейронной сети при помощи обобщенного алгоритма имитации отжига [13], [14].

$$F(z) \rightarrow inf,$$

где $F(z) = R_o(R_h(Wz))$ – функция нейронной сети с одним скрытым слоем, прогнозирующая значение функционала \tilde{J} по набору входных

параметров $z = \{\rho, c_v, T_{max}, \dots, h_2, P_1, P_2\}$, W – матрица весов нейронной сети, полученная в результате обучения, R_o – функция активации выходного слоя, R_h – функция активации скрытого слоя,

Используемый алгоритм имитирует физический процесс, происходящий при отжиге металлов. В ходе этого процесса металл достигает своего кристаллического состояния, которое является глобальным минимумом с точки зрения термодинамической энергии. При применении алгоритма целевая функция рассматривается как функция энергии расплавленного металла. Вводится искусственная температура, которая постепенно снижает своё значение. Эта температура добавляет стохастичность методу, что помогает избегать локальных минимумов. В конце процесса целевая функция находит свой глобальный минимум или значение, близкое к нему.

В процессе минимизации функции $F(z)$ при применении метода имитации отжига предлагается варьировать 6 функций из набора параметров z : $\gamma_1, \gamma_2, \beta_1, \beta_2, P_1, P_2$. Данные параметры в совокупности позволяют найти функции γ и β , отвечающие принципу «bang-bang». Все остальные параметры в процессе оптимизации оставались неизменными.

В силу неточности, возникающей при работе нейронной сети, а также в силу стохастичности метода имитации отжига, для оценки предложенной технологии необходимо произвести как качественный, так и количественный анализ сравнения полученных результатов с результатами классических методов. В силу отсутствия статистического анализа применения классических методов оптимального управления, данная работа была проделана авторами текущей статьи. За основу была взята работа [7], в которой описывается численный метод применения алгоритма классического оптимального управления граничным параметром γ для системы, аналогичной (1)–(4), на примере физических параметров модели, соответствующих стеклу.

Для сравнения было сгенерировано 500 наборов с параметрами, соответствующими стеклу, а также с различными граничными и начальными условиями. После решения прямой задачи для решения прямой задачи системы (1) – (4) для каждого из численных экспериментов была решена обратная задача и проведен анализ в следующих четырех случаях:

I) В первом случае был использован метод простой итерации, описанный в [7], реализующий оптимальное управление коэффициентом γ классическим способом. Поиск решения при этом осуществлялся из выбранных интервалов:

$$\gamma_1 \in [0, 0.25], \gamma_2 \in [0.25, 0.50], P_1 \in [0.025L, 0.475L].$$

II) Во втором случае использовалась предложенная в данной работе оптимизационная технология на основе машинного обучения, в ходе которого в качестве граничного управления также использовалась функция γ , поиск которой осуществлялся в аналогичных предыдущему пункту интервалах. Данный этап был проведен для сравнения с предыдущим

пунктом. Вариация граничных параметров осуществлялись в следующих пределах:

$$\gamma_1 \in [0, 0.25], \gamma_2 \in [0.25, 0.50], P_1 \in [0.025L, 0.475L].$$

III) В третьем случае использовалась предложенная авторами технология для управления граничной функцией γ . В данном случае не соблюдается принцип, присущий классическим методам, такой, что $\gamma_1 \leq \gamma_2$. Целью данного этапа было проверить влияние данного ограничения на конечный результат оптимизации. Пределы варьирования искомым функций следующие:

$$\gamma_1 \in [0, 0.5], \gamma_2 \in [0, 0.50], P_1 \in [0.025L, 0.475L].$$

IV) В четвертом случае использовалась предложенная в данной работе технология для управления сразу двумя граничными функциями, γ и β . Таким образом, в данном случае исследовалось влияние граничной функции β на оптимальное управление. Граничные функции при оптимизации варьировались в следующих пределах:

$$\gamma_1 \in [0.0, 0.5], \gamma_2 \in [0.0, 0.5], P_1 \in [0.025L, 0.475L],$$

$$\beta_1 \in [6 \cdot 10^{-7}, 0.03], \beta_2 \in [6 \cdot 10^{-7}, 0.03], P_2 \in [0.025L, 0.475L].$$

Для количественной оценки рассчитывался процент успешного применения оптимального управления:

$$V_1 = 100 \cdot \frac{m - m_0}{m},$$

где m – общее число случаев, m_0 – число случаев, для которых оптимальное управление не привело к снижению функционала качества. В случае классических методов данная метрика говорит о сходимости метода, в случае предложенной технологии – о точности прогнозирования значения функционала нейронной сетью.

Для качественной оценки использовалось среднее значение снижения функционала качества от первоначального значения в процентах. Учитывались только те случаи, для которых удалось понизить значение функционала:

$$V_2 = 100 \cdot \frac{1}{500} \sum_{i=1}^{n=500} \frac{\tilde{j}_i^{init} - \tilde{j}_i^{opt}}{\tilde{j}_i^{init}},$$

Полученные результаты для каждого из четырех этапов представлены в таблице 3.

ТАБЛИЦА 3. Результаты оптимизации

	I	II	III	IV
V_1	45.8%	49.4%	50%	71.2%
V_2	2.45%	7.74%	8.8%	12.82%

Из результатов, представленных для этапов I и II в таблице 3, видно, что оптимальное управление, реализующее классический алгоритм, незначительно проигрывает предложенной авторами технологии как в количественной, так и в качественной оценке.

Сравнение результатов этапов II и III показало, что отсутствие ограничения $\gamma_1 \leq \gamma_2$ не играет существенной роли и привело к улучшению результата лишь в пределах статистической погрешности.

Анализ результатов этапов III и IV показал, что возможность управлять двумя граничными функциями, являющаяся эксклюзивной особенностью предложенной авторами технологии, приводит к значительному улучшению как качественного, так и количественного показателей качества оптимизации. Таким образом, можно утверждать о большой роли коэффициента β в задачах оптимального управления граничными коэффициентами в модели сложного теплообмена.

Для демонстрации возможностей работы предложенной технологии был рассчитан численный эксперимент с физическими характеристиками стекла и следующими граничными и начальными условиями:

$$a = 0.006, \quad b = 0.025, \quad \alpha = 0.435, \quad T_{max} = 1057,$$

$$L = 23.86, \quad \theta_0 = 0.639, \quad \theta_b = 0.141, \quad \theta_d = 0.65.$$

Для данного эксперимента были реализованы II, III и IV этапы оптимизации. Значения граничных функций после различных этапов оптимизации показаны ниже:

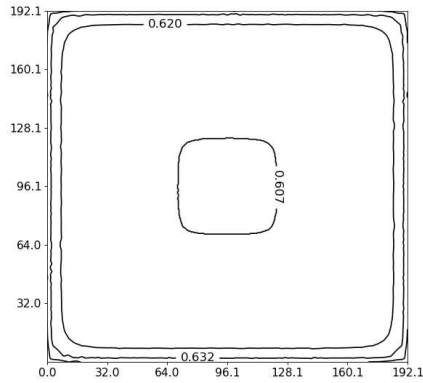
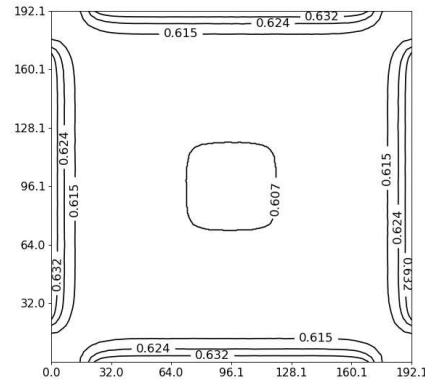
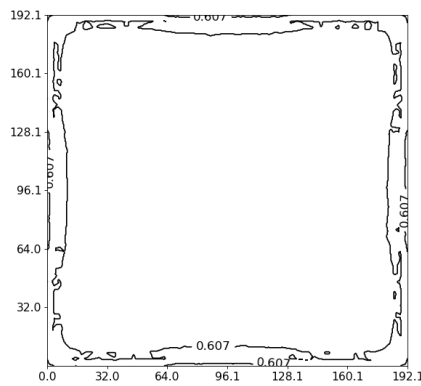
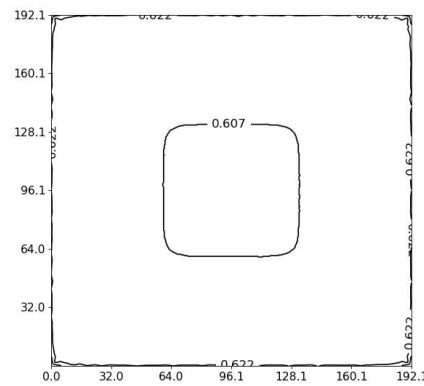
$$\text{II)} \gamma_1 = 9.33 \cdot 10^{-2}, \quad \gamma_2 = 0.472, \quad P_1 = 0.4625L.$$

$$\text{III)} \gamma_1 = 5.6 \cdot 10^{-2}, \quad \gamma_2 = 0.275, \quad P_1 = 0.178L.$$

$$\text{IV)} \gamma_1 = 8 \cdot 10^{-4}, \quad \gamma_2 = 0.5, \quad P_1 = 0.46L, \quad \beta_1 = 3 \cdot 10^{-3}, \quad \beta_2 = 2.68 \cdot 10^{-3}, \quad P_1 = 0.232L.$$

Результаты оптимизации являются репрезентативными для всей выборки численных экспериментов. На рисунке 6 представлено поле температур до и после каждого из упомянутых выше этапов оптимизации вместе со значениями функционала качества \bar{J} .

Стоит также отметить, что основная вычислительная нагрузка происходит на этапе обучения нейронной сети. Применение оптимизационного метода на уже обученную сеть позволяет получить решение обратной задачи при любых параметрах в течение нескольких минут практически на любом вычислительном устройстве, в то время как классические методы требуют циклического решения прямой и обратной задачи для каждого отдельного случая. Вышеизложенные факты говорят о том, что применение машинного обучения для решения данных задач не является избыточно сложным с вычислительной точки зрения, особенно при решении практических задач, когда необходимо рассчитать целый ряд вычислительных экспериментов с отличающимися параметрами.

(a) Без оптимизации, $J = 0.336$ (b) II этап, $J = 0.25$ (c) III этап, $J = 0.258$ (d) IV этап, $J = 0.0597$

7 Заключение

В данной работе предложена оптимизационная технология на базе машинного обучения для управления граничными параметрами в модели сложного теплообмена, использующая принцип «bang-bang» в своей основе. Авторами проведен количественный и качественный сравнительный анализ с методом классического оптимального управления, который показал, что предложенная технология решает задачу оптимального управления более эффективно. Основное преимущество данной технологии состоит в возможности управления сразу двумя граничными функциями.

References

- [1] R. Pinnau, G. Thömmes, *Optimal boundary control of glass cooling processes*, Math. Methods Appl. Sci., **27**:11 (2004), 1261–1281. Zbl 1049.35044
- [2] E. Schneider, M. Seaid, J. Janicka, A. Klar, *Validation of simplified PN models for radiative transfer in combustion systems*, Commun. Numer. Meth. Engng., **24**:2, (2006), 85–96.
- [3] A.Yu. Chebotarev, N.M. Park, A.E. Kovtanyuk, *Analysis and Numerical Simulation of the Initial–Boundary Value Problem for Quasilinear Equations of Complex Heat Transfer*, J. Appl. Industr. Math., **17**:4 (2023), 698–709. Zbl 7895614
- [4] M.F. Modest, *Radiative heat transfer*, New York: Academic Press, 2003.
- [5] G. V. Grenkin , A. Yu. Chebotarev, *Control of complex heat transfer on producing extremal fields*, Comput. Math. Math. Phys., **56**:10 (2016), 1708–1715. Zbl 1357.80007
- [6] G.V. Grenkin, *Optimal control in a non-stationary problem of complex heat transfer*, Dal’nevost. Mat. Zh., 2014, **14**:2, 160–172.
- [7] G.V. Grenkin, *Algorithm for Solving the Boundary Optimal Control Problem in a Complex Heat Transfer Model*, Far Eastern Mathematical Journal, **16**:1, (2016), 24–38.
- [8] G.V. Grenkin, A.Yu. Chebotarev, A.E. Kovtanyuk, N.D. Botkin, K.-H. Hoffmann, *Boundary optimal control problem of complex heat transfer model*, Journal of Mathematical Analysis and Applications, **433**:2, (2016), 1243–1260.
- [9] P-L. Lions, *Mathematical Topics in Fluid Mechanics, Incompressible Models*, Clarendon Press, Oxford Science Publ., **1**, (1996).
- [10] F. Hecht, *New development in freefem++*, J. Numer. Math., **20**:3-4 (2012), 251–265. Zbl 1266.68090
- [11] T. Chen, C. Guestrin, *XGBoost: A Scalable Tree Boosting System*, Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (2016), 785–794.
- [12] E.M. Mukhamadiev, V.Y. Stetsenko, *Sufficient conditions for convergence of the Newton-Kantorovic method in solving boundary value problems for quasilinear equations of elliptic type*, Sib. Math. J., **12** (1971), 408–412. Zbl 0238.35004
- [13] Y. Xiang, S. Gubian, B. Suomela, J. Hoeng, *Generalized Simulated Annealing for Global Optimization: The GenSA Package*, The R Journal, **5**:1 (2013), 13–29.
- [14] Y. Xiang , X. Gong, *Efficiency of Generalized Simulated Annealing*, Phys. Rev. E, **62**:3 (2000), 4473.
- [15] G.V. Grenkin, *Convergence of Newton’s Method for Complex Heat Transfer Equations*, Dal’nevost. Mat. Zh., **17**:1 (2017), 3–10. Zbl 1395.65123

KIRILL SERGEYEVICH KUZNETSOV
 FAR EASTERN FEDERAL UNIVERSITY (FEFU),
 AJAX BAY 10, RUSSKY ISLAND,
 690922, VLADIVOSTOK, RUSSIA,
 INSTITUTE OF APPLIED MATHEMATICS FEB RAS,
 RADIO STR., 7,
 690041, VLADIVOSTOK, RUSSIA

ELENA VLADIMIROVNA AMOSOVA
 FAR EASTERN FEDERAL UNIVERSITY (FEFU),
 AJAX BAY 10, RUSSKY ISLAND,
 690922, VLADIVOSTOK, RUSSIA,
 INSTITUTE OF APPLIED MATHEMATICS FEB RAS,
 RADIO STR., 7,
 690041, VLADIVOSTOK, RUSSIA