ИНЖЕНЕРНО-ФИЗИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

2003 г. МАРТ–АПРЕЛЬ ТОМ 76, № 2

УДК 519.6:536

В. К. Толстых

ЭФФЕКТИВНЫЙ МЕТОД ОПТИМИЗАЦИИ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Предлагаются новые экстремальные алгоритмы, обеспечивающие равномерную сходимость в пространстве искомых функций к оптимали u_*. Особенность заключается в аналитическом определении градиента целевого функционала задачи оптимизации и в оригинальном регулировании направления спуска относительно бесконечномерного градиента.

Задачи оптимизации физических процессов – оптимальное управление ими, идентификация их математических моделей, улучшение геометрических характеристик процессов - встречаются очень часто. Наиболее общими подходами для их решения являются прямые экстремальные алгоритмы как в бесконечномерных пространствах, так и в конечномерных, полученных после конечно-разностных преобразований дифференциальных уравнений или после разложения оптимизируемых параметров по базисным функциям. В отличие от традиционного принципа максимума, динамического программирования и других методов оптимального управления, которые применимы далеко не ко всяким уравнениям в частных производных [1], в прямом подходе решение ищется на основе непосредственной минимизации цели $J(u)$.

Для прямой оптимизации распределенных и нестационарных процессов обычно используют градиентные алгоритмы [2–4]

$$u^{k+1}(\tau) = u^k(\tau) + b^k p(u^k; \tau) , \quad b^k > 0 , \quad k = 0, 1, 2, \ldots, \tag{1}$$

где $u^k(\tau)$ – искомый параметр-функция на итерации k; $p(u^k; \tau)$ – антиградиент или сопряженные, градиенты целевого функционала $J(u)$; b^k – шаг метода. Реализация алгоритма (1), особенно в процессах теплофизики, сталкивается с принципиальными трудностями, связанными с существенной нелинейностью процессов, в частности, процессов переноса тепла. Конечные изменения теплофизических параметров могут приводить к бесконечно малым изменениям в ∇J. К тому же отсутствуют обоснования сходимости бесконечномерных алгоритмов типа (1) за конечное число итераций даже для квадратичных J. Поэтому (1) нуждается в модернизации.

В качестве примера рассмотрим одномерный процесс теплопереноса, описываемый параболическим уравнением в области $(t, x) \in [t_a, t_b]\times[x_0, x_1]$

$$C\rho \frac{\partial T(t, x)}{\partial t} - \lambda \frac{\partial^2 T(t, x)}{\partial x^2} = 0 , \quad \lambda \frac{\partial T}{\partial x}\bigg|_{x_0} = q , \quad \lambda \frac{\partial T}{\partial x}\bigg|_{x_1} = u , \quad T\big|_{t_a} = T_a . \tag{2}$$

Необходимо найти на границе x_1 поток тепла $u(t)$ сводящий функционал к минимуму

$$J(u) = \int_{t_a}^{t_b} (T - T_*)^2\big|_{x_0}\, dt \to \min . \tag{3}$$

Применяя прямой подход [3], определим градиент

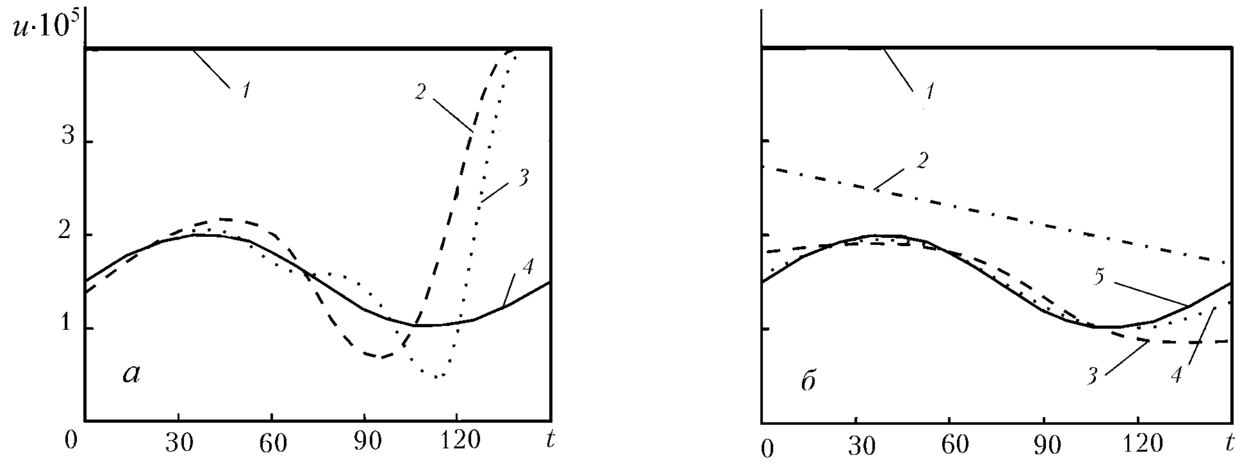
$$\nabla J(u; t) = -f(t, x) , \quad (t, x) \in (t_a, t_b) \times x_1 .$$

где $f(t, x)$ – решение сопряженной задачи

$$C\rho \frac{\partial f}{\partial t} + \lambda \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = 0 , \quad \lambda \frac{\partial f}{\partial x}\bigg|_{x_0} = 2(T - T_*) , \quad \lambda \frac{\partial f}{\partial x}\bigg|_{x_1} = 0 , \quad f\big|_{t_b} = 0 .$$

Рисунок, *а* иллюстрирует неудачную попытку решения задачи (2), (3) бесконечномерным алгоритмом (1) с направлением спуска P, выбранным по методу сопряженных градиентов Полака–Рибьера. Приблизительно равномерное по времени отклонение потока тепла $u^0(t)$ от оптимального $u_*(t)$ дает существенно неравномерное по t (в частности – на 7 порядков) значение градиента и, как следствие, неравномерную сходимость к u_*.

Донецкий национальный университет; э-почта: tvk@dongu.donetsk.ua. Поступила 05.02.2002, в окончательной редакции – 03.09.2002.



Оптимизация теплового потока: *а* – метод сопряженных градиентов и L-BFGS (*1* – u^0; *2* - u^{10}; *3* – u^{37}; *4* – u_*); *б* – метод (4) на основе сопряженных градиентов (*1* – u^0; *2* – φ; *3* – u^{20}; *4* - u^{50}; *5* – $u^{75} = u_*$). *u*, Дж/(м^2·с); *t*, с

Такая же "неудачная" кривая была получена при разложении функции $u(t) = \sum_{i=1}^{n-1} u_i \mathrm{B}_i(t)$ через B-сплайны нулевого порядка (кусочно-постоянные функции) с носителями, равными шагу $\Delta t = (t_b - t_a)/n$ аналогично [5]. Здесь конечномерное управление $u \in R^{n-1}$ ($n = 100$), отыскивалось квазиньютоновским методом с экономной памятью L-BFGS [6, 7], где обратная матрица Гессе представлялась пятью парами векторов из R^{n-1}.

Заменим алгоритм (1) в задаче (2), (3) следующим:

$$u^{k+1}(t) = u^k(t) - b^k \alpha^k(t)\, p\,(u^k; t)\,, \quad b^k > 0\,, \quad k = 0, 1, 2, \ldots, \tag{4}$$

где функция $\alpha(t)$ регулирует сходимость $u^k \to u_*$ согласно необходимому условию оптимальности [3] в форме

$$\nabla J\,(u^k; t) \to 0 \tag{5}$$

равномерно по t, при $u^k \to u_*$.

Алгоритм (4) с реализацией условия (5) позволяет решать бесконечномерные задачи оптимизации за конечное число итераций без преобразований управлений к конечномерным векторам, как это часто делается [2, 4, 5].

Проблемы практической реализации метода (4) заключаются в выборе функций $\alpha^k(t)$ для удовлетворения условия (5). Здесь мы рассмотрим один из способов приблизительной реализации (5) на начальных итерациях.

Введем понятие шаблонных приближений. Пусть первое приближение $u^1(t)$ является некоторой заранее известной функцией $\varphi(t)$ (шаблонная функция), градиент которой $\nabla J(\varphi; t)$ удовлетворяет условию (5) для $k = 1$ (т. е. равномерно убывает после первой итерации). При этом из (4) можем найти

$$\alpha^0(t) = \left| \frac{\varphi(t) - u^0(t)}{\nabla J\,(u^0; t)} \right|, \quad \nabla J\,(u^0; t) \neq 0 \ \forall t\,, \quad t \in (t_a, t_b)\,.$$

На следующих итерациях параметр $\alpha(t)$ не меняется. В данном методе от исследователя потребуется сделать несколько пробных первых итераций для подбора подходящей шаблонной функции $\varphi(t)$, удовлетворяющей (5).

На рисунке, *б* показано решение задачи (2) и (3) с принципиально новым результатом равномерной сходимости к $u_*(t)$. Для реализации (5) было выбрано $\varphi = (0.8 + 0.0033t)u^0$.

В таблице приведены характеристики сходимости всех четырех исследуемых алгоритмов. Везде для поиска шага b^k был использован наиболее эффективный в настоящее время алгоритм одномерной минимизации, основанный на условии Вульфа с кубической интерполяцией [6]. Сходимость исследуемых алгоритмов считалась законченной при относительном изменении функционала и управления менее 10^{-10}. В таблице последняя итерация каждого метода соответствует такой точности.

Из результатов расчетов видно, что новые методы на основе алгоритма (4) минимизируют функционал J на 5–6 порядков лучше традиционных методов. Они также позволяют подойти к оптимальному решению u_* на 3 порядка ближе. Необходимо заметить, что традиционные методы существенно уменьшают функционал J (в расчетах на 5 порядков), однако при этом они не сходятся к точному решению. Это означает, что если алгоритмы оптимизации не обеспечивают равномерной сходимости, как это может делать алгоритм (4), то судить о качестве оптимизации по уменьшению целевого функционала нельзя. К сожалению, большинство публикуемых тестов ограничивается именно этой неудовлетворительной оценкой.

Таким образом, для оптимизации физических процессов можно рекомендовать алгоритм (4), демонстрирующий хорошую сходимость в пространстве управлений.

Обозначения

u – оптимизируемый параметр, входящий в уравнения процесса; τ – пространственно-временная переменная; x – пространственная переменная; t – время; J – целевой функционал задачи оптимизации; p – направление спуска; b – параметр длины шага спуска; k – номер итерации; ∇J – градиент целевого функционала (линейный функционал); C, ρ и λ – теплоемкость, плотность и теплопроводность соответственно, T и T_* – температура и оптимальная температура процесса; q – поток тепла; f – сопряженная переменная (линейный функционал); α – параметр регулирования направления минимизации; u^0 и u_* – начальное приближение и оптимальное значение искомого параметра; u^1, u^{10}, u^{20}, u^{37}, u^{50}, u^{75}, u^k – члены итераций; φ – шаблонное приближение к минимуму; Δt – шаг конечно-разностной сетки; n – количество ячеек сетки; R^{n-1} – конечномерное евклидово пространство оптимизируемых параметров размерности n–1; B – B-сплайн (Base spline). Индексы: 0 и 1 – левая и правая границы одномерного процесса; a и b – начало и конец времени процесса.

Литература

1. **Егоров А. И.** Оптимальное управление тепловыми и диффузионными процессами. М., 1978.
2. **Алифанов О. М., Артюхин Е. А., Румянцев С. В.** Экстремальные методы решения некорректных задач и их приложения к обратным задачам теплообмена. М., 1988.
3. **Толстых В. К.** Прямой экстремальный подход для оптимизации систем с распределенными параметрами. Донецк, 1997.
4. **Черноусько Ф. Л., Баничук И. В.** Вариационные задачи механики и управления. М., 1973.
5. **Hoppe R. H. W. and S. I. Petrova.** Applications of the Newton interior-point method for Maxwell's equations. Proc. 16th IMACS World Congress on Sc. Computat., Appl. Math. and Simulat. Ed. M. Deville and R. Owens, Lausanne-Switzerland, 2000. CD ROM ISBN 3-9522075-1-9.
6. **Nocedal J. and S. J Wright.** Numerical Optimization. N. Y., 1999.
7. **Kelly C. T.** Iterative Methods for Optimization. Philadelphia, 1999.