

А. В. Албу, А. Ф. Албу, В. И. Зубов, Вычисление градиента функционала в одной задаче оптимального управления сложной динамической системой, *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, 2011, том 51, номер 5, 814–833

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением http://www.mathnet.ru/rus/agreement

Параметры загрузки: IP: 109.254.254.29 19 января 2021 г., 08:01:49



ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, 2011, том 51, № 5, с. 814—833

УДК 519.626

ВЫЧИСЛЕНИЕ ГРАДИЕНТА ФУНКЦИОНАЛА В ОДНОЙ ЗАДАЧЕ ОПТИМАЛЬНОГО УПРАВЛЕНИЯ СЛОЖНОЙ ДИНАМИЧЕСКОЙ СИСТЕМОЙ¹⁾

© 2011 г. А. В. Албу, А. Ф. Албу, В. И. Зубов

(119333 Москва, ул. Вавилова, 40, ВЦ РАН) e-mail: zubov@ccas.ru Поступила в редакцию 17.11.2010 г.

Рассматривается задача вычисления точного значения градиента целевого функционала дискретного варианта задачи оптимального управления процессом кристаллизации металла в литейном деле. В отличие от предыдущих работ рассматривается случай, когда исследуемый объект имеет сложную геометрическую форму. Используемая математическая модель для описания процесса кристаллизации вещества представляет собой трехмерную двухфазную начально-краевую задачу типа Стефана. Формулы, позволяющие получить точное значение градиента функционала, выводятся с помощью методологии быстрого автоматического дифференцирования. Библ. 6. Фиг. 4.

Ключевые слова: уравнение теплопроводности, кристаллизация металла, задача Стефана, оптимальное управление, метод быстрого автоматического дифференцирования, сопряженная задача оптимального управления.

введение

Сложные управляемые системы являются объектом повышенного внимания ученых всего мира, и им посвящено большое число публикаций. Каждая из них вносит вклад в общую теорию оптимального управления сложными системами.

При решении задач оптимального управления сложными системами часто используются численные методы оптимизации. Наиболее популярными среди них являются градиентные методы минимизации функционала. Для реализации градиентных методов необходимо уметь определять значение функционала в произвольной точке и значение его градиента в этой же точке. При этом крайне важно использовать точное значение градиента функционала. Одним из подходов, позволяющих определять точное значение градиента целевого функционала, является обобщенная методология быстрого автоматического дифференцирования (БАД-методология, см. [1]). Эта методология возникла как естественное обобщение и развитие методов, разработанных в нелинейном программировании.

Суть обобщенной БАД-методологии в следующем. Любая задача оптимального управления состоит в оптимизации некоторого целевого функционала, зависящего от управлений и фазовых переменных. Управления и фазовые переменные связаны между собой некоторыми соотношениями (например, при заданных управлениях фазовые переменные определяются как решение некоторой краевой задачи для системы уравнений с частными производными). Первый шаг обобщенной БАД-методологии состоит в дискретизации функционала и связей, в результате чего целевому функционалу ставится в соответствие функция конечного числа переменных, а связям — система алгебраических уравнений. В результате приходим к задаче оптимизации функции многих переменных, причем эти переменные связаны системой алгебраических равенств. Второй шаг заключается в нахождении градиента дискретной целевой функции при наличии связей. Методология быстрого автоматического дифференцирования предлагает канонические формулы, позволяющие точно вычислять градиент целевой функции в этом случае.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Федерального агентства по науке и инновациям (грант № 02.740.11.0194) и по программе поддержки ведущих научных школ (код проекта НШ-4096.1010.1).



Фиг. 1.

В настоящей работе рассматривается задача вычисления точного значения градиента целевого функционала дискретного варианта задачи оптимального управления процессом кристаллизации металла в литейном деле. В отличие от работы [2], здесь рассматривается случай, когда исследуемый объект имеет сложную геометрическую форму. Физическая постановка исследуемой задачи подробно описана в [3]–[5].

Рассматриваемый объект сложной геометрической формы потребовал усложнения алгоритма, разработанного для расчета объекта простейшей формы — параллелепипеда (см. [2]). Во-первых, на стыке разных частей объекта возникают новые элементарные ячейки сложной конфигурации, с которыми не приходилось встречаться ранее. Это привело к модернизации алгоритма учета теплового баланса в системе. Во-вторых, новая геометрия объекта потребовала усовершенствования алгоритма расчета уровня жидкого алюминия в ванне-охладителе. Наконец, для новой геометрии объекта пришлось изменить алгоритм расчета притока тепла к объекту за счет теплового излучения печи и поверхности жидкого алюминия. Это связано с тем, что теперь некоторые части поверхности объекта стали затеняться другими ее частями. Описанию всех перечисленных изменений и посвящена настоящая работа.

1. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Изготовление металлического образца начинается с того, что в рабочую полость литейной формы с определенной конфигурацией внешней границы и определенной конфигурацией рабочей полости (фиг. 1a, б) заливают жидкий металл (заштрихованная область на фиг. 1a, б – литейная форма, внутренняя незаштрихованная область – рабочая область с жидким металлом). Литейная форма подогрета до заданной температуры $T_{\rm form}$, а залитый в нее металл – до температуры $T_{\rm met}$. Процесс остывания первоначально расплавленного металла происходит в специальной установке (фиг. 2). Ее верхняя часть представляет собой плавильную печь, а нижняя часть является охладителем (большая емкость, заполненная жидким алюминием при температу-



Фиг. 2.

ре, немного превышающей температуру плавления алюминия). С одной стороны, объект медленно погружается в жидкую среду (жидкий алюминий), имеющую низкую температуру, благодаря чему происходит кристаллизация металла. С другой стороны, объект получает тепло от стенок плавильной печи, что не позволяет процессу кристаллизации протекать слишком быстро.

Процесс остывания металла (в области \mathfrak{D}_m) и литейной формы (в области \mathfrak{D}_f) описывается следующим уравнением:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K \frac{\partial T}{\partial z} \right), \quad (x, y, z) \in Q.$$
(1.1)

Здесь x, y, z – декартовы координаты точки пространства; t – время; Q – область с кусочно-гладкой границей Г; T(x, y, z, t) – температура вещества в точке с координатами (x, y, z) в момент времени t. Функция теплосодержания H(T(x, y, z, t)) определяется соотношениями

$$H(T(x, y, z, t)) = \begin{cases} H_1(T), & (x, y, z) \in \mathfrak{D}_m, \\ H_2(T), & (x, y, z) \in \mathfrak{D}_f, \end{cases}$$
$$H_1(T) = \begin{cases} \rho_S c_S T, & T < T_1, \\ \frac{\rho_S c_S (T_2 - T_1) + \rho_S \gamma}{T_2 - T_1} T - \frac{\rho_S \gamma T_1}{T_2 - T_1}, & T_1 \le T < T_2, \\ \rho_L c_L (T - T_2) + \rho_S c_S T_2 + \rho_S \gamma, & T \ge T_2, \end{cases}$$
$$H_2(T) = \rho_{\Phi} c_{\Phi} T,$$

где γ – удельная теплота плавления. Коэффициенты ρ, *C*, *K* (плотность вещества, его теплоемкость и коэффициент теплопроводности) – разные для материала металла и для материала формы. Они имеют вид

$$K(T) = \begin{cases} K_1(T), & (x, y, z) \in \mathcal{D}_m, \\ K_2(T), & (x, y, z) \in \mathcal{D}_f, \end{cases}$$

0

$$K_{1}(T) = \begin{cases} k_{s}, \quad T < T_{1}, \\ \frac{k_{L} - k_{s}}{T_{2} - T_{1}}T + \frac{k_{s}T_{2} - k_{L}T_{1}}{T_{2} - T_{1}}, \quad T_{1} \le T < T_{2}, \\ k_{L}, \quad T \ge T_{2}, \end{cases} \quad K_{2}(T) = \begin{cases} k_{\Phi_{1}}, \quad T \le T_{3}, \\ k_{\Phi_{2}}, \quad T_{3} < T, \\ k_{\Phi_{2}}, \quad T_{3} < T, \end{cases}$$

$$\rho(T) = \begin{cases} \rho_1(T), & (x, y, z) \in \mathfrak{D}_m, \\ \rho_{\Phi}, & (x, y, z) \in \mathfrak{D}_f, \end{cases} \quad \rho_1(T) = \begin{cases} \rho_s, & T < T_1, \\ \frac{\rho_L - \rho_s}{T_2 - T_1}T + \frac{\rho_s T_2 - \rho_L T_1}{T_2 - T_1}, & T_1 \le T < T_2, \end{cases}$$

$$C(T) = \begin{cases} C_1(T), & (x, y, z) \in \mathfrak{D}_m, \\ c_{\Phi}, & (x, y, z) \in \mathfrak{D}_f, \end{cases} \quad C_1(T) = \begin{cases} c_S, & T < T_1, \\ \frac{c_L - c_S}{T_2 - T_1}T + \frac{c_S T_2 - c_L T_1}{T_2 - T_1}, & T_1 \le T < T_2, \\ c_L, & T \ge T_2. \end{cases}$$

Встречающиеся в этих формулах константы c_S , c_L , c_{Φ} , ρ_S , ρ_L , ρ_{Φ} , k_S , k_L , k_{Φ_1} , k_{Φ_2} , T_1 , T_2 , T_3 считаются заранее известными (индексы *L* и *S* указывают на принадлежность величины жидкой или твердой фазе соответственно). Указанные термодинамические коэффициенты претерпевают разрыв на границе металл—форма. Требуется, чтобы на этой границе выполнялись два условия: условие непрерывности температуры и условие непрерывности потока тепла. В рассматриваемых в работе режимах металл может присутствовать одновременно в двух фазах: твердой и жидкой. Область, отделяющая фазы, определяется узким интервалом температур [T_1 , T_2], и в этой области коэффициенты ρ , *C*, *K* изменяются очень быстро.

На границе Γ области Q задаются условия теплообмена с внешней средой. Эти условия зависят от рассматриваемой точки поверхности и времени. Однако все условия теплообмена можно записать в общем виде:

$$\tilde{\alpha} T + \tilde{\beta} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = \tilde{\gamma}, \qquad (1.2)$$

где $\tilde{\alpha}$, $\tilde{\beta}$, $\tilde{\gamma}$ – известные функции координат (*x*, *y*, *z*) точки поверхности Γ и температуры T(x, y, z, t), а под $\partial T/\partial \mathbf{n} = T_{\mathbf{n}}$ понимается производная от температуры T по направлению внешней нормали **n** к поверхности Γ .

Решение прямой задачи состоит в определении функции T(x, y, z, t), удовлетворяющей уравнению (1.1) в рассматриваемой области Q, условиям (1.2) на внешней границе Γ области Q и условиям непрерывности температуры и теплового потока на границе металл—форма.

Задача оптимального управления состоит в выборе такого режима остывания металла в плавильной печи, при котором фронт кристаллизации был бы близким к плоскости, ортогональной вертикальной оси объекта, и двигался бы по заданному закону.

В качестве управляющей функции *u*(*t*) выбрана зависимость от времени перемещения литейной формы в плавильной печи, а в качестве целевого функционала — функционал

$$I(u) = \frac{1}{t_2 - t_1} \int_{t_1 S(z_*(t))}^{t_2} \left[\sum_{j \in I} Z_{pl}(z, y, t) - z_*(t) \right]^2 dx dy dt.$$
(1.3)

Здесь t_1 — момент времени, при котором зарождается фронт кристаллизации; t_2 — момент времени, при котором наступает полное затвердевание металла; $(x, y, Z_{pl}(x, y, t))$ — реальные координаты поверхности раздела фаз в момент времени t; $(x, y, z_*(t))$ — желаемые координаты поверхности раздела фаз в момент времени t; $S(z_*(t))$ — та часть поперечного сечения литейной формы плоскостью $z = z_*(t)$, которая заполнена металлом; T_{pl} — температура кристаллизации металла.

Функционал (1.3) является средним по времени среднеквадратичным отклонением реальной поверхности раздела фаз от желаемой поверхности раздела фаз. Как показали проведенные ранее исследования, он обеспечивает близкую к желаемой скорость перемещения поверхности раздела фаз и некоторое выпрямление этой поверхности (см. [5]).

Для того чтобы получить значение градиента целевого функционала с помощью БАД-методологии, необходимо в первую очередь осуществить дискретизацию прямой задачи и функционала.

2. ДИСКРЕТНЫЙ ВАРИАНТ ЗАДАЧИ ОПТИМАЛЬНОГО УПРАВЛЕНИЯ

Исследуемый объект аппроксимируется телом, которое состоит из конечного числа параллелепипедов. Это тело образно помещается в некоторый вспомогательный параллелепипед, размеры которого совпадают с габаритами исследуемого объекта.

Для удобства дальнейшего рассмотрения введем систему координат, связанную с движущейся литейной формой (см. фиг. 2). Ось *Oz* направим вертикально вверх, ось *Ox* расположим в горизонтальной плоскости и направим слева направо, а ось *Oy* выберем так, чтобы система координат *Oxyz* была бы правой. Начало *O* этой системы координат совместим с левой, ближайшей к нам вершиной вспомогательного параллелепипеда, расположенной на его дне.

Временная сетка определяется соотношениями $\{t^j\}, j = \overline{0, J}$, с шагами $\tau^j = t^j - t^{j-1}, j = \overline{1, J}$.

Вводятся две пространственные разностные сетки (в общем случае неравномерные): основная сетка $\{x_n\}, n = \overline{0, N}, \{y_i\}, i = \overline{0, I}, \{z_l\}, l = \overline{0, L}$, с шагами $h_n^x = x_{n+1} - x_n, n = \overline{0, N-1}$, $h_i^y = y_{i+1} - y_i, i = \overline{0, I-1}$, $h_i^z = z_{l+1} - z_l, l = \overline{0, L-1}$, и вспомогательная сетка

$$\tilde{x}_0 = x_0, \quad \tilde{x}_n = x_{n-1} + h_{n-1}^x/2, \quad n = \overline{1, N}, \quad \tilde{x}_{N+1} = x_N,$$

$$\tilde{y}_0 = y_0, \quad \tilde{y}_i = y_{i-1} + h_{i-1}^y/2, \quad i = \overline{1, I}, \quad \tilde{y}_{I+1} = y_I,$$

$$\tilde{z}_0 = z_0, \quad \tilde{z}_I = z_{I-1} + h_{I-1}^z/2, \quad I = \overline{1, L}, \quad \tilde{z}_{L+1} = z_L.$$

Основная сетка построена таким образом, что все внешние поверхности аппроксимирующего тела, а также все границы металл—форма являются одной из координатных поверхностей этой сетки. При этом каждый из M параллелепипедов, объединение которых аппроксимирует исследуемый объект, будет содержать такие точки основной сетки (x_n , y_i , z_i), для которых

$$n^*(m) \le n \le N^*(m), \quad i^*(m) \le i \le I^*(m), \quad l^*(m) \le l \le L^*(m), \quad m = 1, M.$$

(Для объекта, изображенного на фиг. 1, M = 5.)

Поверхности вспомогательной сетки параллельны поверхностям основной сетки, и узлы этой сетки расположены на серединах отрезков, соединяющих узлы основной сетки.

Плоскости $x = \tilde{x}_n$, $y = \tilde{y}_i$, $z = \tilde{z}_l$ делят объект на так называемые элементарные ячейки. Элементарной ячейке будем приписывать индексы (n, i, l), если вершина этой ячейки, ближайшая к началу координат, совпадает с узловой точкой $(\tilde{x}_n, \tilde{y}_i, \tilde{z}_l)$. Обозначим через V_{nil} объем такой элементарной ячейки, а ее внешнюю поверхность – через S_{nil} .

ВЫЧИСЛЕНИЕ ГРАДИЕНТА ФУНКЦИОНАЛА В ОДНОЙ ЗАДАЧЕ



Фиг. 3.

Будем считать, что в рамках одной элементарной ячейки температура среды не зависит от пространственных координат, а зависит только от времени. Обозначим эту температуру через $T_{nil}(t)$.

Любая элементарная ячейка либо полностью заполнена только одной средой (металл или литейная форма), либо одна ее часть заполнена одной средой, а другая ее часть – другой средой. Обозначим через V_{nil}^1 часть объема V_{nil} элементарной ячейки, которая заполнена металлом, а через V_{nil}^2 – часть объема V_{nil} , которая заполнена материалом формы. Аналогично, S_{nil}^1 – часть внешней поверхности S_{nil} элементарной ячейки, которая прилегает к объему V_{nil}^1 , а S_{nil}^2 – часть внешней поверхности S_{nil} , которая прилегает к объему V_{nil}^2 .

В том случае, когда рассматриваемый объект параллелепипед, все элементарные ячейки (см. [2]) также имеют форму параллелепипеда. Если же рассматривается объект сложной геометрической формы, то на стыке разных частей объекта возникают новые элементарные ячейки сложной конфигурации, с которыми не приходилось встречаться ранее. Они имеют вид, представленный на фиг. 3. Ячейки такого вида всегда выходят на внешнюю границу литейной формы,

и в этом случае усложняется конфигурация поверхности S_{nil}^2 .

Численное решение прямой задачи основывается на использовании уравнения теплового баланса. Для ячейки с индексами (*n*, *i*, *l*) это уравнение имеет вид

$$\begin{bmatrix} V_{nil}^{1}H_{1}(T_{nil}^{j+1}) + V_{nil}^{2}H_{2}(T_{nil}^{j+1}) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} V_{nil}^{1}H_{1}(T_{nil}^{j}) + V_{nil}^{2}H_{2}(T_{nil}^{j}) \end{bmatrix} = \\ = \int_{t^{j}}^{t^{j+1}} \left[\iint_{S_{nil}^{1}} K_{1}(\tilde{T}_{nil}(t))(\tilde{T}_{n}(t))_{nil}ds + \iint_{S_{nil}^{2}} K_{2}(\tilde{T}_{nil}(t))(\tilde{T}_{n}(t))_{nil}ds \right] dt.$$
(2.1)

Здесь $T_{nil}^{j} = T_{nil}(t^{j})$, а под $K_{1}(\tilde{T}_{nil}(t))(\tilde{T}_{n}(t))_{nil}$ и $K_{2}(\tilde{T}_{nil}(t))(\tilde{T}_{n}(t))_{nil}$ понимается плотность теплового потока через поверхность ячейки для металла и формы соответственно.

Пусть $M_{nil} = V_{nil}^1/V_{nil}$ — объемная доля металла в элементарной ячейке с индексами (n, i, l), а $\Phi_{nil} = V_{nil}^2/V_{nil}$ — объемная доля формы в этой элементарной ячейке. Обозначим через $E_{nil}^j = M_{nil}H_1(T_{nil}^j) + \Phi_{nil}H_2(T_{nil}^j)$ так называемую "суммарную плотность теплосодержания" в ячейке с индексами (n, i, l) в момент времени t^j . Учитывая соотношения, определяющие $H_1(T)$ и $H_2(T)$, получаем выражение для функции $E_{nil}^j(T_{nil}^j)$:

$$E_{nil}^{j}(T_{nil}^{j}) = \begin{cases} a_{nil}T_{nil}^{j}, & T_{nil}^{j} < T_{1}, \\ b_{nil}^{1}T_{nil}^{j} - b_{nil}^{2}, & T_{1} \le T_{nil}^{j} < T_{2}, \\ d_{nil}^{1}T_{nil}^{j} + d_{nil}^{2}, & T_{nil}^{j} \ge T_{2}, \end{cases}$$

820 где

$$a_{nil} = M_{nil}\rho_{s}c_{s} + \Phi_{nil}\rho_{\Phi}c_{\Phi},$$

$$b_{nil}^{1} = M_{nil}[\rho_{s}c_{s} + \rho_{s}\gamma/(T_{2} - T_{1})] + \Phi_{nil}\rho_{\Phi}c_{\Phi}, \quad b_{nil}^{2} = M_{nil}\rho_{s}\gamma T_{1}/(T_{2} - T_{1}),$$

$$d_{nil}^{1} = M_{nil}\rho_{L}c_{L} + \Phi_{nil}\rho_{\Phi}c_{\Phi}, \quad d_{nil}^{2} = M_{nil}[\rho_{s}\gamma + (\rho_{s}c_{s} - \rho_{L}c_{L})T_{2}].$$

Определим температуру T_{nil}^{j} как функцию, обратную к функции $E_{nil}^{j}(T_{nil}^{j})$, т.е. $T_{nil}^{j} = \beta(E_{nil}^{j})$. Функции $K_{1}(T_{nil}^{j})$ и $K_{2}(T_{nil}^{j})$ также можно выразить через теплосодержание E_{nil}^{j} (см. [3]). Обозначим эти функции в виде $\Omega_{1}(E_{nil}^{j}) \equiv K_{1}(T_{nil}^{j})$ и $\Omega_{2}(E_{nil}^{j}) \equiv K_{2}(T_{nil}^{j})$.

Если в равенстве (2.1) перейти от переменной $T_{nil}(t)$ к переменной $E_{nil}(t)$, то получим

$$V_{nil}(E_{nil}^{j+1} - E_{nil}^{j}) = \int_{t^{j}}^{t^{j+1}} \left[\iint_{S_{nil}^{1}} A_{1}(E_{nil}(t)) ds + \iint_{S_{nil}^{2}} A_{2}(E_{nil}(t)) ds \right] dt, \qquad (2.2)$$

где

$$A_1(E_{nil}(t)) = \Omega_1(\tilde{E}_{nil}(t))\beta_n(\tilde{E}_{nil}(t)), \quad A_2(E_{nil}(t)) = \Omega_2(\tilde{E}_{nil}(t))\beta_n(\tilde{E}_{nil}(t))$$

Для более компактной записи временной дискретизации соотношения (2.2) введем обозначения

$$\begin{split} \tilde{\Lambda}_{x}E &= \iint_{S_{nil}^{1x+} \cup S_{nil}^{1x-}} A_{1}(E)ds + \iint_{S_{nil}^{2x+} \cup S_{nil}^{2x-}} A_{2}(E)ds + \iint_{S_{nil}^{2xd}} A_{2}(E)ds, \\ \tilde{\Lambda}_{y}E &= \iint_{S_{nil}^{1y+} \cup S_{nil}^{1y-}} A_{1}(E)ds + \iint_{S_{nil}^{2y+} \cup S_{nil}^{2y-}} A_{2}(E)ds + \iint_{S_{nil}^{2yd}} A_{2}(E)ds, \\ \tilde{\Lambda}_{z}E &= \iint_{S_{nil}^{1z+} \cup S_{nil}^{1z-}} A_{1}(E)ds + \iint_{S_{nil}^{2z+} \cup S_{nil}^{2z-}} A_{2}(E)ds + \iint_{S_{nil}^{2zd}} A_{2}(E)ds. \end{split}$$

Здесь через S_{nil}^{1x+} обозначена часть поверхности S_{nil}^{1} , которая принадлежит плоскости $x = \tilde{x}_{n+1}$, через S_{nil}^{1x-} – часть поверхности S_{nil}^{1} , принадлежащая плоскости $x = \tilde{x}_{n}$. Аналогично определяются поверхности S_{nil}^{1y+} , ..., S_{nil}^{1z-} , S_{nil}^{2x+} , ..., S_{nil}^{2z-} . Поверхности S_{nil}^{2xd} , S_{nil}^{2yd} и S_{nil}^{2zd} – это дополнительные поверхности, которые возникают в ячейках сложной конфигурации (см. фиг. 3). Так, например, S_{nil}^{2xd} – это часть поверхности S_{nil}^{2} , которая принадлежит плоскости $x = x_n$. В тех случаях, когда какие-нибудь из дополнительных поверхностей отсутствуют, полагаем, что их площадь равна нулю.

Для дискретизации по времени уравнения (2.2) использовалась схема Писмена–Рекфорда (см. [3])

$$V_{nil}(E_{nil}^{j+1} - E_{nil}^{j}) = \frac{2\tau}{3}\tilde{\Lambda}_{x}E_{nil}^{j+1/3} + \frac{\tau}{3}\tilde{\Lambda}_{x}E_{nil}^{j+2/3} + \frac{\tau}{3}\tilde{\Lambda}_{y}E_{nil}^{j} + + \frac{2\tau}{3}\tilde{\Lambda}_{y}E_{nil}^{j+2/3} + \frac{\tau}{3}\tilde{\Lambda}_{z}E_{nil}^{j} + \frac{\tau}{3}\tilde{\Lambda}_{z}E_{nil}^{j+1/3} + \frac{\tau}{3}\tilde{\Lambda}_{z}E_{nil}^{j+1},$$

$$j = \overline{0, J-1}, \quad n = \overline{n^{*}(m), N^{*}(m)}, \quad i = \overline{i^{*}(m), I^{*}(m)}, \quad l = \overline{l^{*}(m), L^{*}(m)}, \quad m = \overline{1, M}.$$

Здесь

$$E_{nil}^{j+1/3} = E_{nil}(t^j + \tau/3), \quad E_{nil}^{j+2/3} = E_{nil}(t^j + 2\tau/3)$$

В левую часть последнего равенства добавим и вычтем из нее значения $V_{nil}E_{nil}^{j+1/3}$ и $V_{nil}E_{nil}^{j+2/3}$. Затем разобьем это равенство на три (проводим расщепление по направлениям *x*, *y* и *z*); тем самым формулируем три подзадачи:

х-направление

$$V_{nil}(E_{nil}^{j+1/3} - E_{nil}^{j}) = \frac{\tau}{3}\tilde{\Lambda}_{x}E_{nil}^{j+1/3} + \frac{\tau}{3}\tilde{\Lambda}_{y}E_{nil}^{j} + \frac{\tau}{3}\tilde{\Lambda}_{z}E_{nil}^{j};$$

у-направление

$$V_{nil}(E_{nil}^{j+2/3} - E_{nil}^{j+1/3}) = \frac{\tau}{3}\tilde{\Lambda}_y E_{nil}^{j+2/3} + \frac{\tau}{3}\tilde{\Lambda}_x E_{nil}^{j+1/3} + \frac{\tau}{3}\tilde{\Lambda}_z E_{nil}^{j+1/3};$$

z-направление

$$V_{nil}(E_{nil}^{j+1}-E_{nil}^{j+2/3}) = \frac{\tau}{3}\tilde{\Lambda}_z E_{nil}^{j+1} + \frac{\tau}{3}\tilde{\Lambda}_x E_{nil}^{j+2/3} + \frac{\tau}{3}\tilde{\Lambda}_y E_{nil}^{j+2/3}.$$

Здесь $j = \overline{0, J-1}$, $n = \overline{n^*(m), N^*(m)}$, $i = \overline{i^*(m), I^*(m)}$, $l = \overline{i^*(m), L^*(m)}$, $m = \overline{1, M}$.

Коэффициенты теплопроводности $\Omega_1(\tilde{E}_{nil}^j)$ и $\Omega_2(\tilde{E}_{nil}^j)$ на тех поверхностях элементарной ячейки, которые не выходят на внешнюю границу области, аппроксимируются следующим образом:

$$\begin{split} \Omega_{1}(\tilde{E}_{nil}^{j})\Big|_{S_{nil}^{1x+}} &= \frac{\Omega_{1}(E_{nil}^{j}) + \Omega_{1}(E_{n+1,il}^{j})}{2} \equiv R_{n}^{j}, \quad \Omega_{1}(\tilde{E}_{nil}^{j})\Big|_{S_{nil}^{1x-}} &= \frac{\Omega_{1}(E_{n-1,il}^{j}) + \Omega_{1}(E_{nil}^{j})}{2} \equiv R_{n-1}^{j}, \\ \Omega_{1}(\tilde{E}_{nil}^{j})\Big|_{S_{nil}^{1y+}} &= \frac{\Omega_{1}(E_{nil}^{j}) + \Omega_{1}(E_{n,i+1,l}^{j})}{2} \equiv \hat{R}_{i}^{j}, \quad \Omega_{1}(\tilde{E}_{nil}^{j})\Big|_{S_{nil}^{1y-}} &= \frac{\Omega_{1}(E_{nil}^{j}) + \Omega_{1}(E_{n,i-1,l}^{j})}{2} \equiv \hat{R}_{n-1}^{j}. \end{split}$$

Подобным образом определяются величины \tilde{R}_{l}^{j} и \tilde{R}_{l-1}^{j} для поверхностей S_{nil}^{1z+} и S_{nil}^{1z-} и аналогичные обозначения используются для функции $\Omega_2(\tilde{E}_{nil}^{j})$, а именно B_n^{j} , B_{n-1}^{j} , \hat{B}_{l}^{j} , \hat{B}_{l-1}^{j} , \tilde{B}_{l}^{j} , \tilde{B}_{l-1}^{j} .

Граничные условия (1.2), которые задаются на внешней границе Г объекта, перепишем в общем виде:

$$K(T)T_n|_{\Gamma} = (r(T)T + q(t))|_{\Gamma}.$$

Так как

$$K(T) = \begin{cases} K_1(T), & (x, y, z) \in S_{nil}^1 \\ K_2(T), & (x, y, z) \in S_{nil}^2 \end{cases} = \begin{cases} \Omega_1(E), & (x, y, z) \in S_{nil}^1, \\ \Omega_2(E), & (x, y, z) \in S_{nil}^2, \end{cases}$$

то последнее выражение записывается в виде двух равенств:

$$\Omega_{1}(E)\beta_{\mathbf{n}}(E)|_{\Gamma} = (r_{1}(\beta(E))\beta(E) + q_{1}(t))|_{\Gamma}, \quad (x, y, z) \in S_{nil}^{1},$$
(2.3)

$$\Omega_2(E)\beta_{\mathbf{n}}(E)|_{\Gamma} = (r_2(\beta(E))\beta(E) + q_2(t))|_{\Gamma}, \quad (x, y, z) \in S_{nil}^2.$$
(2.4)

Производные $\beta_n(E)$ по направлению внешней нормали, которые входят в выражения указанных выше трех подзадач, аппроксимируются по формуле $\beta_n(E) = (\nabla \beta, \mathbf{n})$. Так, например

$$\beta_{\mathbf{n}}(\tilde{E}_{nil}^{j})\Big|_{S_{nil}^{2x+}} = \frac{\beta_{n+1,il}^{j} - \beta_{nil}^{j}}{h_{n}^{x}}, \quad n = \overline{n^{*}(m), N^{*}(m) - 1},$$

$$\beta_{\mathbf{n}}(\tilde{E}_{nil}^{j})\Big|_{S_{nil}^{2x-}} = -\frac{\beta_{nil}^{j} - \beta_{n-1,il}^{j}}{h_{n-1}^{x}}, \quad n = \overline{n^{*}(m) + 1, N^{*}(m)},$$

$$j = \overline{0, J - 1}; \quad i = \overline{i^{*}(m), I^{*}(m)}, \quad l = \overline{l^{*}(m), L^{*}(m)}, \quad m = \overline{1, M},$$

$$E_{nil}^{j}).$$

где $\beta_{nil}^{j} = \beta(E_{nil}^{j}).$

Рассматриваемый нами объект симметричен относительно вертикальной оси и расположен симметрично относительно оси печи. Поэтому дальнейшее описание алгоритма ради простоты изложения приведем для четверти объекта. При n = 0 и при i = 0 в качестве краевых условий будем использовать условия симметрии. Введем также функцию $L^{**}(n, i)$. Ее значения равны числу всех принадлежащих объекту ячеек, первый пространственный индекс которых равен n, а второй равен i.

С учетом введенных обозначений пространственная аппроксимация первой подзадачи внутри рассматриваемой области может быть записана в виде

$$\begin{split} E_{nil}^{j+1/3} - E_{nil}^{j} &= w_{nil}^{j+1} \bigg[S_{nil}^{1x+} R_{n}^{j+1/3} \frac{\beta_{n+1,il}^{j+1/3} - \beta_{nil}^{j+1/3}}{h_{n}^{x}} - S_{nil}^{1x-} R_{n-1}^{j+1/3} \frac{\beta_{nil}^{j+1/3} - \beta_{n-1,il}^{j+1/3}}{h_{n-1}^{x}} + \\ &+ S_{nil}^{2x+} B_{n}^{j+1/3} \frac{\beta_{n+1,il}^{j+1/3} - \beta_{nil}^{j+1/3}}{h_{n}^{x}} - S_{nil}^{2x-} B_{n-1}^{j+1/3} \frac{\beta_{nil}^{j+1/3} - \beta_{n-1,il}^{j+1/3}}{h_{n-1}^{x}} + S_{nil}^{2xd} (r_{2}(\beta_{nil}^{j+1/3})\beta_{nil}^{j+1/3} + q_{2}^{j+1/3}) \Big|_{S_{nil}^{2xd}} \bigg] + \\ &+ w_{nil}^{j+1} \bigg[S_{nil}^{1y+} \hat{R}_{i}^{j} \frac{\beta_{n,i+1,l}^{j} - \beta_{nil}^{j}}{h_{n-1}^{y}} - S_{nil}^{1y-} \hat{R}_{n-1}^{j} \frac{\beta_{nil}^{j} - \beta_{n,i-1,l}^{j}}{h_{i-1}^{y}} + \\ &+ S_{nil}^{2y+} \hat{B}_{i}^{j} \frac{\beta_{n,i+1,l}^{j} - \beta_{nil}^{j}}{h_{i}^{y}} - S_{nil}^{2y-} \hat{B}_{l-1}^{j} \frac{\beta_{nil}^{j} - \beta_{n,i-1,l}^{j}}{h_{i-1}^{y}} + \\ &+ S_{nil}^{2x+} \hat{B}_{i}^{j} \frac{\beta_{n,i+1,l}^{j} - \beta_{nil}^{j}}{h_{i}^{y}} - S_{nil}^{2y-} \hat{B}_{l-1}^{j} \frac{\beta_{nil}^{j} - \beta_{n,i-1,l}^{j}}{h_{i-1}^{y}} + \\ &+ S_{nil}^{2x+} \hat{B}_{i}^{j} \frac{\beta_{n,i+1,l}^{j} - \beta_{nil}^{j}}{h_{i}^{y}} - S_{nil}^{2y-} \hat{B}_{nil}^{j} - S_{nil}^{1z-} \hat{R}_{nil}^{j} - S_{nil}^{2xd}} + \\ &+ S_{nil}^{2x+} \hat{B}_{i}^{j} \frac{\beta_{n,i+1,l}^{j} - \beta_{nil}^{j}}{h_{i}^{y}}} - S_{nil}^{2y-} \hat{B}_{nil}^{j} - S_{nil}^{1z-} \hat{B}_{nil}^{j} - S_{nil}^{1z-} \hat{B}_{nil}^{j} + S_{nil}^{2xd}} + \\ &+ S_{nil}^{2x+} \hat{B}_{i}^{j} \frac{\beta_{n,i+1,l}^{j} - \beta_{nil}^{j}}{h_{i}^{y}} - S_{nil}^{2z-} \hat{B}_{nil}^{j} - S_{nil}^{1z-} \hat{B}_{nil}^{j} - S_{nil}^{1z-} \hat{B}_{nil}^{j} + S_{nil}^{2zd}} + \\ &+ S_{nil}^{2z+} \hat{B}_{i}^{j} \frac{\beta_{n,i+1,1}^{j} - \beta_{nil}^{j}}{h_{i}^{z}} - S_{nil}^{2z-} \hat{B}_{l-1}^{j} \frac{\beta_{nil}^{j} - \beta_{ni,l-1}^{j}}{h_{i-1}^{z}} + \\ &+ S_{nil}^{2z+} \hat{B}_{i}^{j} \frac{\beta_{ni,l+1,1}^{j} - \beta_{nil}^{j}}{h_{i}^{j}} - S_{nil}^{2z-} \hat{B}_{l-1}^{j} \frac{\beta_{nil}^{j} - \beta_{nil}^{j}}{h_{i-1}^{z}} + \\ &+ S_{nil}^{2z+} \hat{B}_{i}^{j} \frac{\beta_{ni,l+1,1}^{j} - \beta_{nil}^{j}}{h_{i}^{z}} - S_{nil}^{2z-} \hat{B}_{l-1}^{j} \frac{\beta_{nil}^{j} - \beta_{ni,l-1}^{j}}{h_{i-1}^{z}}} + \\ &+ S_{nil}^{2z+} \hat{B}_{i}^{j} \frac{\beta_{ni}^{j} - S_{nil}^{2z+} \hat{B}_{i-1}^{j}} \hat{B}$$

где $w_{nil}^{j+1} = \tau^{j+1}/(3V_{nil}).$

Последнее соотношение справедливо для тех ячеек области, боковые грани которых не выходят на внешнюю границу области Q. Для тех ячеек, у которых какая-нибудь из поверхностей S_{nil}^{1x+} , S_{nil}^{1x-} , ..., S_{nil}^{1z-} выходит на внешнюю границу области, соответствующее слагаемое в уравнении теплового баланса должно аппроксимироваться с учетом краевых условий. Например, при n = 0 второе и четвертое слагаемые из первой квадратной скобки последнего равенства равны нулю. Аналогично аппроксимируются и последние две подзадачи.

В соответствии с БАД-методологией (см. [1]), все уравнения, которые аппроксимируют прямую задачу, должны быть записаны в специальной (канонической) форме, вид которой приведем ниже.

Введем следующие обозначения. Для всех $i = \overline{0, I^*(m)}, l = \overline{0, L^*(m)}, m = \overline{1, M}$, обозначим $(N^*(m) + 2)$ -мерные векторы $(m = \overline{1, M})$ через (X_m) и (X_f) :

$$(X_m)_{0il}^j = -(r_1(\beta_{0il}^j)\beta_{0il}^j + q_1^j)\Big|_{S_{0il}^{1,r-}},$$

$$\begin{aligned} (X_m)_{nil}^j &= R_{n-1}^j \frac{\beta_{nil}' - \beta_{n-1,il}'}{h_{n-1}^x}, \quad n = \overline{1, N^*(m)}, \\ (X_m)_{N^*(m)+1,il}^j &= (r_1(\beta_{N^*(m)il}^j)\beta_{N^*(m)il}^j + q_1^j) \Big|_{S_{N^*(m)il}^{1x+}}, \\ (X_f)_{0il}^j &= -(r_2(\beta_{0il}^j)\beta_{0il}^j + q_2^j) \Big|_{S_{nil}^{2x-}}, \end{aligned}$$

$$\begin{split} (X_f)_{nil}^j &= B_{n-1}^j \frac{\beta_{nil}^j - \beta_{n-1,il}^j}{h_{n-1}^x}, \quad n = \overline{1, N^*(m)}, \\ (X_f)_{N^*(m)+1,il}^j &= (r_2(\beta_{N^*(m)il}^j)\beta_{N^*(m)il}^j + q_2^j) \Big|_{S_{N^*(m)il}^{2x+}}, \\ (X_d)_{nil}^j &= (r_2(\beta_{nil}^j)\beta_{nil}^j + q_2^j) \Big|_{S_{nil}^{2xd}}, \quad n = \overline{0, N^*(m)+1}. \end{split}$$

Для всех $n = \overline{0, N^*(m)}$, $l = \overline{0, L^*(m)}$, $m = \overline{1, M}$, обозначим ($I^*(m) + 2$)-мерные векторы ($m = \overline{1, M}$) через (Y_m) и (Y_f):

$$\begin{split} (Y_m)_{n0l}^j &= -(r_1(\beta_{n0l}^j)\beta_{n0l}^j + q_1^j)\Big|_{S_{n0l}^{1y-}},\\ (Y_m)_{nil}^j &= \hat{R}_{i-1}^j \frac{\beta_{nil}^j - \beta_{n,i-1,l}^j}{h_{i-1}^y}, \quad i = \overline{1, I^*(m)},\\ (Y_m)_{n,I^*(m)+1,l}^j &= (r_1(\beta_{nI^*(m)l}^j)\beta_{nI^*(m)l}^j + q_1^j)\Big|_{S_{nI^*(m)l}^{1y+}},\\ (Y_f)_{n0l}^j &= -(r_2(\beta_{n0l}^j)\beta_{n0l}^j + q_2^j)\Big|_{S_{n0l}^{2y-}},\\ (Y_f)_{nil}^j &= \hat{B}_{i-1}^j \frac{\beta_{nil}^j - \beta_{n,i-1,l}^j}{h_{i-1}^y}, \quad i = \overline{1, I^*(m)},\\ (Y_f)_{n,I^*(m)+1,l}^j &= (r_2(\beta_{nI^*(m)l}^j)\beta_{nI^*(m)l}^j + q_2^j)\Big|_{S_{nl^*(m)l}^{2y+}},\\ (Y_d)_{nil}^j &= (r_2(\beta_{nil}^j)\beta_{nil}^j + q_2^j)\Big|_{S_{nil}^{2yd}}, \quad i = \overline{0, I^*(m)+1} \end{split}$$

Для всех $n = \overline{0, N^*(m)}$, $i = \overline{0, I^*(m)}$, $m = \overline{1, M}$, обозначим ($L^*(m) + 2$)-мерные векторы ($m = \overline{1, M}$) через (Z_m) и (Z_f):

$$\begin{split} &(Z_m)_{ni0}^{j} = -(r_1(\beta_{ni0}^{j})\beta_{ni0}^{j} + q_1^{j})\Big|_{S_{ni0}^{1z-}},\\ &(Z_m)_{nil}^{j} = \tilde{R}_{l-1}^{j}\frac{\beta_{nil}^{j} - \beta_{ni,l-1}^{j}}{h_{l-1}^{z}}, \quad l = \overline{1, L^*(m)},\\ &(Z_m)_{ni, L^*(m)+1}^{j} = (r_1(\beta_{niL^*(m)}^{j})\beta_{niL^*(m)}^{j} + q_1^{j})\Big|_{S_{niL^*(m)}^{1z+}},\\ &(Z_f)_{ni0}^{j} = -(r_2(\beta_{ni0}^{j})\beta_{ni0}^{j} + q_2^{j})\Big|_{S_{ni0}^{2z-}},\\ &(Z_f)_{nil}^{j} = \tilde{B}_{l-1}^{j}\frac{\beta_{nil}^{j} - \beta_{ni,l-1}^{j}}{h_{l-1}^{z}}, \quad l = \overline{1, L^*(m)},\\ &(Z_f)_{ni, L^*(m)+1}^{j} = (r_2(\beta_{niL^*(m)}^{j})\beta_{niL^*(m)}^{j} + q_2^{j})\Big|_{S_{nil}^{2z+}},\\ &(Z_d)_{nil}^{j} = (r_2(\beta_{nil}^{j})\beta_{nil}^{j} + q_2^{j})\Big|_{S_{nil}^{2zd}}, \quad l = \overline{0, L^*(m)+1}. \end{split}$$

В этих формулах и во всех последующих нижние индексы *m* и *f* указывают на принадлежность величины металлу или форме соответственно. Индекс *d* указывает на то, что выражение с правой стороны соответствующего равенства вычисляется в центре дополнительной поверхности для ячеек со сложной конфигурацией.

С учетом введенных обозначений аппроксимация указанных выше трех подзадач может быть записана для всех $j = \overline{0, J - 1}$ в следующем виде:

х-направление

$$\begin{split} E_{nil}^{j+1/3} &= E_{nil}^{j} + w_{nil}^{j+1} [S_{nil}^{1x+}(X_m)_{n+1,il}^{j+1/3} - S_{nil}^{1x-}(X_m)_{nil}^{j+1/3} + \\ &+ S_{nil}^{2x+}(X_f)_{n+1,il}^{j+1/3} - S_{nil}^{2x-}(X_f)_{nil}^{j+1/3} + S_{nil}^{2xd}(X_d)_{nil}^{j+1/3}] + \\ &+ w_{nil}^{j+1} [S_{nil}^{1y+}(Y_m)_{n,i+1,l}^{j} - S_{nil}^{1y-}(Y_m)_{nil}^{j} + S_{nil}^{2y+}(Y_f)_{n,i+1,l}^{j} - S_{nil}^{2y-}(Y_f)_{nil}^{j} + S_{nil}^{2yd}(Y_d)_{nil}^{j}] + \\ &+ w_{nil}^{j+1} [S_{nil}^{1z+}(Z_m)_{n,i+1,l}^{j} - S_{nil}^{1z-}(Z_m)_{nil}^{j} + S_{nil}^{2z+}(Z_f)_{n,i+1,l}^{j} - S_{nil}^{2z-}(Z_f)_{nil}^{j} + S_{nil}^{2zd}(Z_d)_{nil}^{j}], \\ &n = \overline{0, N^*(m)}, \quad i = \overline{0, I^*(m)}, \quad l = \overline{0, L^*(m)}, \quad m = \overline{1, M}; \end{split}$$

у-направление

$$\begin{split} E_{nil}^{j+2/3} &= E_{nil}^{j+1/3} + w_{nil}^{j+1} [S_{nil}^{1y+}(Y_m)_{n,i+1,l}^{j+2/3} - S_{nil}^{1y-}(Y_m)_{nil}^{j+2/3} + \\ &+ S_{nil}^{2y+}(Y_f)_{n,i+1,l}^{j+2/3} - S_{nil}^{2y-}(Y_f)_{nil}^{j+2/3} + S_{nil}^{2yd}(Y_d)_{nil}^{j+2/3}] + \\ &+ w_{nil}^{j+1} [S_{nil}^{1x+}(X_m)_{n+1,il}^{j+1/3} - S_{nil}^{1x-}(X_m)_{nil}^{j+1/3} + S_{nil}^{2x+}(X_f)_{n+1,il}^{j+1/3} - S_{nil}^{2x-}(X_f)_{nil}^{j+1/3} + S_{nil}^{2xd}(X_d)_{nil}^{j+1/3}] + \\ &+ w_{nil}^{j+1} [S_{nil}^{1z+}(Z_m)_{ni,l+1}^{j+1/3} - S_{nil}^{1z-}(Z_m)_{nil}^{j+1/3} + S_{nil}^{2z+}(Z_f)_{ni,l+1}^{j+1/3} - S_{nil}^{2z-}(Z_f)_{nil}^{j+1/3} + S_{nil}^{2zd}(Z_d)_{nil}^{j+1/3}], \\ &n = \overline{0, N^*(m)}, \quad i = \overline{0, I^*(m)}, \quad l = \overline{0, L^*(m)}, \quad m = \overline{1, M}; \end{split}$$

z-направление

$$\begin{split} E_{nil}^{j+1} &= E_{nil}^{j+2/3} + w_{nil}^{j+1} [S_{nil}^{1z+}(Z_m)_{ni,l+1}^{j+1} - S_{nil}^{1z-}(Z_m)_{nil}^{j+1} + \\ &+ S_{nil}^{2z+}(Z_f)_{ni,l+1}^{j+1} - S_{nil}^{2z-}(Z_f)_{nil}^{j+1} + S_{nil}^{2zd}(Z_d)_{nil}^{j+1}] + \\ &+ w_{nil}^{j+1} [S_{nil}^{1x+}(X_m)_{n+1,il}^{j+2/3} - S_{nil}^{1x-}(X_m)_{nil}^{j+2/3} + S_{nil}^{2x+}(X_f)_{n+1,il}^{j+2/3} - S_{nil}^{2x-}(X_f)_{nil}^{j+2/3} + S_{nil}^{2xd}(X_d)_{nil}^{j+2/3}] + \\ &+ w_{nil}^{j+1} [S_{nil}^{1y+}(Y_m)_{n,i+1,l}^{j+2/3} - S_{nil}^{1y-}(Y_m)_{nil}^{j+2/3} + S_{nil}^{2y+}(Y_f)_{n,i+1,l}^{j+2/3} - S_{nil}^{2y-}(Y_f)_{nil}^{j+2/3} + S_{nil}^{2yd}(Y_d)_{nil}^{j+2/3}], \\ &n = \overline{0, N^*(m)}, i = \overline{0, I^*(m)}, l = \overline{0, L^*(m)}, m = \overline{1, M}. \end{split}$$

Введем далее следующие двумерные векторы:

$$S_{nil}^{x+} = \begin{bmatrix} S_{nil}^{1x+} \\ S_{nil}^{2x+} \end{bmatrix}, \quad S_{nil}^{x-} = \begin{bmatrix} S_{nil}^{1x-} \\ S_{nil}^{2x-} \end{bmatrix}, \quad S_{nil}^{y+} = \begin{bmatrix} S_{nil}^{1y+} \\ S_{nil}^{2y+} \end{bmatrix},$$
$$S_{nil}^{y-} = \begin{bmatrix} S_{nil}^{1y-} \\ S_{nil}^{2y-} \end{bmatrix}, \quad S_{nil}^{z+} = \begin{bmatrix} S_{nil}^{1z+} \\ S_{nil}^{2z+} \end{bmatrix}, \quad S_{nil}^{z-} = \begin{bmatrix} S_{nil}^{1z-} \\ S_{nil}^{2z-} \\ S_{nil}^{2z-} \end{bmatrix},$$

где $n = \overline{0, N^*(m)}$, $i = \overline{0, I^*(m)}$, $l = \overline{0, L^*(m)}$, $m = \overline{1, M}$,

$$(X_{mf})_{nil}^{j} = \begin{bmatrix} (X_{m})_{nil}^{j} \\ (X_{f})_{nil}^{j} \end{bmatrix}, \quad n = \overline{0, N^{*}(m) + 1}, \quad i = \overline{0, I^{*}(m)}, \quad l = \overline{0, L^{*}(m)}, \quad m = \overline{1, M},$$

$$(Y_{mf})_{nil}^{j} = \begin{bmatrix} (Y_{m})_{nil}^{j} \\ (Y_{f})_{nil}^{j} \end{bmatrix}, \quad n = \overline{0, N^{*}(m)}, \quad i = \overline{0, I^{*}(m) + 1}, \quad l = \overline{0, L^{*}(m)}, \quad m = \overline{1, M},$$

$$(Z_{mf})_{nil}^{j} = \begin{bmatrix} (Z_{m})_{nil}^{j} \\ (Z_{f})_{nil}^{j} \end{bmatrix}, \quad n = \overline{0, N^{*}(m)}, \quad i = \overline{0, I^{*}(m)}, \quad l = \overline{0, L^{*}(m) + 1}, \quad m = \overline{1, M}.$$

Отметим, что справедливы равенства $S_{nil}^{x+} = S_{n+1,il}^{x-}$, $n = \overline{0, N^*(m) - 1}$, $S_{nil}^{y+} = S_{n,i+1,l}^{y-}$, $i = \overline{0, I^*(m) - 1}$, $S_{nil}^{z+} = S_{n,i+1,l}^{z-}$, $i = \overline{0, I^*(m) - 1}$, $S_{nil}^{z+} = S_{n,i+1,l}^{z-}$, $i = \overline{0, I^*(m) - 1}$, $S_{nil}^{z+} = S_{n,i+1,l}^{z-}$, $i = \overline{0, I^*(m) - 1}$, $S_{nil}^{z+} = S_{n,i+1,l}^{z-}$, $i = \overline{0, I^*(m) - 1}$, $S_{nil}^{z+} = S_{n,i+1,l}^{z-}$, $i = \overline{0, I^*(m) - 1}$, $S_{nil}^{z+} = S_{n,i+1,l}^{z-}$, $i = \overline{0, I^*(m) - 1}$, $S_{nil}^{z+} = S_{n,i+1,l}^{z-}$, $i = \overline{0, I^*(m) - 1}$, $S_{nil}^{z+} = S_{n,i+1,l}^{z-}$, $i = \overline{0, I^*(m) - 1}$, $S_{nil}^{z+} = S_{n,i+1,l}^{z-}$, $i = \overline{0, I^*(m) - 1}$, $S_{nil}^{z+} = S_{n,i+1,l}^{z-}$, $i = \overline{0, I^*(m) - 1}$, $S_{nil}^{z+} = S_{n,i+1,l}^{z-}$, $i = \overline{0, I^*(m) - 1}$, $S_{nil}^{z+} = S_{n,i+1,l}^{z-}$, $i = \overline{0, I^*(m) - 1}$, $S_{nil}^{z+} = S_{ni,l+1,l}^{z-}$, $i = \overline{0, I^*(m) - 1}$, $S_{nil}^{z+} = S_{ni,l+1,l}^{z-}$, $i = \overline{0, I^*(m) - 1}$, $S_{nil}^{z+} = S_{ni,l+1,l}^{z-}$, $i = \overline{0, I^*(m) - 1}$, $S_{nil}^{z+} = S_{ni,l+1,l}^{z-}$, $i = \overline{0, I^*(m) - 1}$, $S_{nil}^{z+} = S_{ni,l+1,l}^{z-}$, $i = \overline{0, I^*(m) - 1}$, $S_{nil}^{z+} = S_{ni,l+1,l}^{z-}$, $i = \overline{0, I^*(m) - 1}$, $S_{nil}^{z+} = S_{ni,l+1,l}^{z-}$, $i = \overline{0, I^*(m) - 1}$, $S_{nil}^{z+} = S_{ni,l+1,l}^{z-}$, $i = \overline{0, I^*(m) - 1}$, $S_{nil}^{z+} = S_{ni,l+1,l}^{z-}$, $i = \overline{0, I^*(m) - 1}$, $S_{nil}^{z+} = S_{ni,l+1,l}^{z-}$, $i = \overline{0, I^*(m) - 1}$, $S_{nil}^{z+} = S_{ni,l+1,l}^{z-}$, $i = \overline{0, I^*(m) - 1}$, $S_{nil}^{z+} = S_{ni,l+1,l}^{z-}$, $S_{nil}^{z+} = S_{ni,l+1,l}^{z-}$, $S_{nil}^{z+} = S_{ni,l+1,l}^{z-}$, $S_{nil}^{z+} = S_{ni,l+1,l+1}^{z-}$, $S_{nil}^{z+} = S_{ni,l+1,l+1}^{z-}$, $S_{nil}^{z+} = S_{ni,l+1,l+1}^{z-}$, $S_{ni,l+1,l+1}^{z-}$, $S_{ni,l+1,l+1}^{z-}$, $S_{ni,l+1,l+1}^{z-}$, $S_{ni,l+1,l+1}^{z-}$, $S_{ni,l+1,l+1}^{z-}$, $S_{ni,l+1,l+1}^{z-}$, $S_{ni,l+1,l+1,l+1}^{z-}$, $S_{ni,l+1,l+1,l+1}^{z-}$, $S_{ni,l+1,l+1,l+1}^{z-}$, $S_{ni,l+1,l+1,l+1}^{z-}$, $S_{ni,l+1,l+1,l+1,l+1}^{z-}$, $S_{ni,l+1,l+1,l+1,l+1}^{$

Введем также обозначения для следующих скалярных произведений (для всех $m = \overline{1, M}$):

$$\begin{split} \tilde{X}_{nil}^{j} &= (S_{nil}^{x-}, (X_{mf})_{nil}^{j}), \quad n = \overline{0, N^{*}(m)}, \quad \tilde{X}_{N^{*}(m)+1, il}^{j} = (S_{N^{*}(m)il}^{x+}, (X_{mf})_{N^{*}(m)+1, il}^{j}), \\ &i = \overline{0, I^{*}(m)}, \quad l = \overline{0, L^{*}(m)}; \\ \tilde{Y}_{nil}^{j} &= (S_{nil}^{y-}, (Y_{mf})_{nil}^{j}), \quad i = \overline{0, I^{*}(m)}, \quad \tilde{Y}_{n, I^{*}(m)+1, l}^{j} = (S_{I^{I^{*}(m)l}}^{y+}, (Y_{mf})_{n, I^{*}(m)+1, l}^{j}), \\ &n = \overline{0, N^{*}(m)}, \quad l = \overline{0, L^{*}(m)}; \\ \tilde{Z}_{nil}^{j} &= (S_{nil}^{z-}, (Z_{mf})_{nil}^{j}), \quad l = \overline{0, L^{*}(m)}, \quad \tilde{Z}_{ni, L^{*}(m)+1}^{j} = (S_{niL^{*}(m)}^{z+}, (Z_{mf})_{ni, L^{*}(m)+1}^{j}), \\ &n = \overline{0, N^{*}(m)}, \quad i = \overline{0, I^{*}(m)}. \end{split}$$

Отметим, что \tilde{X}_{nil}^{j} для всех $n = \overline{1, N^{*}(m)}$ является функцией двух переменных: E_{nil}^{j} и $E_{n-1,il}^{j}$; $\tilde{X}_{0il}^{j} - \phi$ ункция одной переменной E_{0il}^{j} , а $\tilde{X}_{N^{*}(m)+1,il}^{j} - \phi$ ункция одной переменной $E_{N^{*}(m)il}^{j}$. Аналогичные замечания справедливы и для \tilde{Y}_{nil}^{j} и \tilde{Z}_{nil}^{j} .

С помощью введенных обозначений последние три подзадачи записываются в компактном виде ($j = \overline{0, J-1}$):

х-направление

$$E_{nil}^{j+1/3} = E_{nil}^{j} + w_{nil}^{j+1} (\tilde{X}_{n+1,il}^{j+1/3} - \tilde{X}_{nil}^{j+1/3} + S_{nil}^{2xd} (X_d)_{nil}^{j+1/3}) + w_{nil}^{j+1} (\tilde{Y}_{n,i+1,l}^{j} - \tilde{Y}_{nil}^{j} + S_{nil}^{2yd} (Y_d)_{nil}^{j}) + w_{nil}^{j+1} (\tilde{Z}_{ni,l+1}^{j} - \tilde{Z}_{nil}^{j} + S_{nil}^{2zd} (Z_d)_{nil}^{j});$$

$$(2.5)$$

у-направление

$$E_{nil}^{j+2/3} = E_{nil}^{j+1/3} + w_{nil}^{j+1} (\tilde{Y}_{n,i+1,l}^{j+2/3} - \tilde{Y}_{nil}^{j+2/3} + S_{nil}^{2yd} (Y_d)_{nil}^{j+2/3}) + w_{nil}^{j+1} (\tilde{X}_{n+1,il}^{j+1/3} - \tilde{X}_{nil}^{j+1/3} + S_{nil}^{2xd} (X_d)_{nil}^{j+1/3}) + w_{nil}^{j+1} (\tilde{Z}_{ni,l+1}^{j+1/3} - \tilde{Z}_{nil}^{j+1/3} + S_{nil}^{2zd} (Z_d)_{nil}^{j+1/3});$$

$$(2.6)$$

z-направление

$$E_{nil}^{j+1} = E_{nil}^{j+2/3} + w_{nil}^{j+1} (\tilde{Z}_{ni,l+1}^{j+1} - \tilde{Z}_{nil}^{j+1} + S_{nil}^{2zd} (Z_d)_{nil}^{j+1}) + w_{nil}^{j+1} (\tilde{X}_{n+1,il}^{j+2/3} - \tilde{X}_{nil}^{j+2/3} + S_{nil}^{2xd} (X_d)_{nil}^{j+2/3}) + w_{nil}^{j+1} (\tilde{Y}_{n,i+1,l}^{j+2/3} - \tilde{Y}_{nil}^{j+2/3} + S_{nil}^{2yd} (Y_d)_{nil}^{j+2/3}).$$

$$(2.7)$$

Здесь $n = \overline{0, N^*(m)}$, $i = \overline{0, I^*(m)}$, $l = \overline{0, L^*(m)}$, $m = \overline{1, M}$.

В [2] подробно описаны краевые условия (2.3), (2.4) и указано, каким образом получаются выражения для функций $r_1(\beta(E)), q_1(t), r_2(\beta(E))$ и $q_2(t)$ в случае объекта-параллелепипеда. Алгоритм получения этих функций в том случае, когда рассматриваемый объект состоит из набора параллелепипедов, усложняется двумя факторами.

Во-первых, уровень жидкого алюминия U_{al} в ванне-охладителе рассчитывается по другим формулам. Пусть Lx_i – длина *i*-й ступени объекта вдоль оси Ox, Ly_i – ширина *i*-й ступени объекта вдоль оси Oz, $i = \overline{1, 5}$. Тогда если в момент времени $t = t^j$ объект не достиг уровня алюминия, то

$$U_{\rm al} = Z_{\rm al},$$

где $Z_{\rm al} = Z_{\rm Sou} - H_{\rm air}$.

Если же в момент времени $t = t^{j}$ в жидкий алюминий погружена только часть первой ступени объекта, то имеем

$$U_{\rm al} = Z_{\rm al} + \frac{L x_1 L y_1 Z_{\rm al}}{L_{\rm al} H_{\rm al} - L x_1 L y_1}$$

В том случае, когда в момент времени $t = t^{j}$ в жидкий алюминий погружена первая ступень объекта и часть второй ступени, имеем

$$U_{\rm al} = Z_{\rm al} + \frac{Lx_1Ly_1Lz_1}{L_{\rm al}H_{\rm al} - Lx_1Ly_1} + \frac{Lx_2Ly_2(Z_{\rm al} - Lz_1)}{L_{\rm al}H_{\rm al} - Lx_2Ly_2}.$$

Что касается остальных ситуаций, то формулы для величины U_{al} получаются аналогичным образом, по индукции. Так, например, если в момент времени $t = t^j$ в жидкий алюминий будут полностью погружены четыре ступени объекта и часть пятой ступени, то

$$\begin{split} U_{\rm al} &= Z_{\rm al} + \frac{Lx_1Ly_1Lz_1}{L_{\rm al}H_{\rm al} - Lx_1Ly_1} + \frac{Lx_2Ly_2Lz_2}{L_{\rm al}H_{\rm al} - Lx_2Ly_2} + \frac{Lx_3Ly_3Lz_3}{L_{\rm al}H_{\rm al} - Lx_3Ly_3} + \\ &+ \frac{Lx_4Ly_4Lz_4}{L_{\rm al}H_{\rm al} - Lx_4Ly_4} + \frac{Lx_5Ly_5(Z_{\rm al} - Lz_4)}{L_{\rm al}H_{\rm al} - Lx_5Ly_5}. \end{split}$$

Во-вторых, для новой геометрии объекта изменился алгоритм расчета притока тепла к объекту за счет теплового излучения печи и поверхности жидкого алюминия. Это связано с тем, что теперь некоторые части поверхности объекта стали затеняться другими ее частями. В этом случае меняются некоторые параметры поверхности излучения (например, высота стенки части печи, излучение от которой достигает объекта).

Рассмотрим для примера средний (третий) параллелепипед и ту его грань, которая параллельна плоскости *YOZ* и расположена ближе к той стенке печи, которая находится справа (см. фиг. 2). На фиг. 4 представлены сечения объекта и правой стенки печи, перпендикулярные выбранной грани. Отметим произвольную точку $C(x_c, y_c, z_c)$ на рассматриваемой грани. Притоку тепла от печи к выбранной точке $C(x_c, y_c, z_c)$ препятствуют два параллелепипеда, которые расположены выше рассматриваемого параллелепипеда. Проведем прямые, которые соединяют точку *C* с точками $A_1(x_1, y_c, z_1)$ и $A_2(x_2, y_c, z_2)$, расположенными на нижних ребрах этих параллелепипедов и имеющих ту же ординату y_c , что и точка *C*. Пусть $B_1(x_{Sou}, y_c, z_{Sou}^1)$ и $B_2(x_{Sou}, y_c, z_{Sou}^2) -$ точки пересечения этих прямых с правой стенкой печи. Следовательно, приток тепла к точке *C* от всех точек печи, аппликаты которых больше наименьшей из аппликат точек $B_1(x_{Sou}, y_c, z_{Sou}^1)$ и $B_2(x_{Sou}, y_c, z_{Sou}^2)$ (в данном случае z_{Sou}^2), отсутствует. Таким образом, будем считать, что высота печи H_{Sou} в этом случае равна z_{Sou}^2 .

$$z_{\text{Sou}}^{2} = x_{\text{Sou}} \frac{z_{c} - z_{2}}{x_{c} - x_{2}} + \frac{z_{2}x_{c} - z_{c}x_{2}}{x_{c} - x_{2}}.$$

Аналогичным образом определяются те части стенок печи и поверхности алюминия, от которых поток энергии излучения к рассматриваемым точкам объекта отличен от нуля.

Во всем остальном алгоритм получения выражений для функций $r_1(\beta(E)), q_1(t), r_2(\beta(E))$ и $q_2(t)$ остается таким же, как и в случае объекта-параллелепипеда (так как рассматриваемый нами объект состоит из набора параллелепипедов, грани которых параллельны координатным поверхностям).

Целевой функционал I(u) аппроксимируется, как и в [2], функцией F(u) с помощью формулы трапеций:

$$I(u) \cong F(u) = \frac{1}{2(t_2 - t_1)} \left(\tau^{j_1 + 1} f^{j_1} + \sum_{j=j_1 + 1}^{j_2 - 1} (\tau^j + \tau^{j+1}) f^j + \tau^{j_2} f^{j_2} \right).$$

ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ том 51 № 5 2011

826



Здесь j_1 – порядковый номер узла временной сетки, который соответствует моменту времени t_1 , j_2 – порядковый номер узла временной сетки, который соответствует моменту времени t_2 ,

$$f^{j} = \sum_{n=n, i=i_{1}}^{n_{2}} \sum_{i=i_{1}}^{i_{2}} (Z_{ni}^{j} - z_{*}^{j})^{2} h_{n}^{x} h_{i}^{y},$$

 n_1 , n_2 и i_1 , i_2 – порядковые номера узлов пространственной сетки вдоль осей *OX* и *OY* соответственно, которые определяют границы сечения \hat{S} (наибольшее поперечное сечение той части рассматриваемого объекта, которая заполнена металлом), т.е. mes $\hat{S} = (x_{n_2} - x_{n_1}) \times (y_{i_2} - y_{i_1})$, $Z_{ni}^j = Z_{pl}(x_n, y_i, t^j), z_*^j = z_*(t^j)$.

Величины Z_{ni}^{j} , $j = \overline{0, J-1}$, $n = \overline{n_1, n_2}$, $i = \overline{i_1, i_2}$, на каждом *j*-м временном слое определяются линейной интерполяцией по температурному полю, полученному в результате решения прямой задачи. Пусть x_n, y_i, z_l – координаты узловых точек пространственной расчетной сетки. Для каждой точки $(x_n, y_i) \in \hat{S}$, $n = \overline{n_1, n_2}$, $i = \overline{i_1, i_2}$, находим такой индекс l_* , для которого выполняется одно из условий:

либо
$$\beta(E_{ni,l_*+1}^j) \le T_{\mathrm{pl}} \le \beta(E_{nil_*}^j),$$
 либо $\beta(E_{nil_*}^j) \le T_{\mathrm{pl}} \le \beta(E_{ni,l_*+1}^j).$

Тогда

$$Z_{ni}^{j} = \frac{(z_{l_{*}+1} - z_{l_{*}})T_{pl} + (z_{l_{*}}\beta_{ni,l_{*}+1}^{j} - z_{l_{*}+1}\beta_{nil_{*}}^{j})}{\beta_{ni,l_{*}+1}^{j} - \beta_{nil_{*}}^{j}}.$$

3. СОПРЯЖЕННАЯ ЗАДАЧА

В соответствии с требованием методологии быстрого автоматического дифференцирования, каждое уравнение выбранного дискретного варианта прямой задачи (2.5)–(2.7) записано в виде

$$E_{nil}^{J} = \Psi((n, i, l, j), \Lambda_{(n, i, l, j)}, U_{(n, i, l, j)}).$$
(3.1)

В соотношении (3.1) через $\Lambda_{(n, i, l, j)}$ обозначено множество всех $E_{\alpha\beta\gamma}^{\nu}$ со всеми такими индексами α , β , γ и ν , элементы которого встречаются в правой части равенства (3.1), а через $U_{(n, i, l, j)}$ – множество всех компонент вектора управлений u^{ν} ($u^{\nu} = u(t^{\nu})$), которые встречаются в правой части этого равенства. Несмотря на то, что управление u^{j} зависит лишь от временно́го индекса j, множеству $U_{(n, i, l, j)}$ придаются также пространственные индексы n, i, l, для того чтобы подчеркнуть, что влияние этого управления разное в разных пространственных точках.

Для вычисления компонент градиента функции F(u) по компонентам вектора $\{u^{j}\}$ воспользуемся следующим соотношением, которое является обобщением аналогичного соотношения из [1]:

$$\frac{dF}{du^{j}} = \frac{\partial F}{\partial u^{j}} + \sum_{(\alpha, \beta, \gamma, \nu) \in \overline{K}_{(n, i, l, j)}} \Psi_{u^{j}}^{T}((\alpha, \beta, \gamma, \nu), \Lambda_{(\alpha, \beta, \gamma, \nu)}, U_{(\alpha, \beta, \gamma, \nu)}) p_{\alpha\beta\gamma}^{\nu},$$
(3.2)

где $p_{\alpha\beta\gamma}^{\nu}$ — сопряженные переменные (импульсы), определяемые из решения системы линейных алгебраических уравнений

$$p_{nil}^{j} = \frac{\partial F}{\partial E_{nil}^{j}} + \sum_{(\alpha, \beta, \gamma, \nu) \in \overline{Q}_{(n, i, l, j)}} \Psi_{E_{nil}^{j}}^{T} ((\alpha, \beta, \gamma, \nu), \Lambda_{(\alpha, \beta, \gamma, \nu)}, U_{(\alpha, \beta, \gamma, \nu)}) p_{\alpha\beta\gamma}^{\nu},$$

$$j = \overline{1, J}, \quad n = \overline{0, N^{*}(m)}, \quad i = \overline{0, I^{*}(m)}, \quad l = \overline{0, L^{*}(m)}, \quad m = \overline{1, M}.$$
(3.3)

Индексные множества $\overline{Q}_{(n,i,l,j)}$ и $\overline{K}_{(n,i,l,j)}$ определяются соотношениями

$$\overline{Q}_{(n,i,l,j)} = \{ (\alpha, \beta, \gamma, \nu) : E_{nil}^{j} \in \Lambda_{(\alpha, \beta, \gamma, \nu)} \},$$

$$\overline{K}_{(n,i,l,j)} = \{ (\alpha, \beta, \gamma, \nu) : u^{j} \in U_{(\alpha, \beta, \gamma, \nu)} \}.$$

Линейную алгебраическую систему уравнений (3.3) для вычисления импульсов p'_{nil} обычно называют сопряженной задачей.

Введем следующие обозначения для ряда производных, которые понадобятся для компактной записи сопряженной задачи:

$$\begin{split} (D_{x+})_{nil}^{j} &= \frac{\partial \tilde{X}_{nil}^{j}}{\partial E_{nil}^{j}}, \quad (D_{x-})_{nil}^{j} &= \frac{\partial \tilde{X}_{nil}^{j}}{\partial E_{n-1,il}^{j}}, \quad n = \overline{1, N^{*}(m)}, \\ (D_{x+})_{0il}^{j} &= \frac{\partial \tilde{X}_{0il}^{j}}{\partial E_{0il}^{j}}, \quad (D_{x-})_{0il} = 0, \\ (D_{x+})_{N^{*}(m)+1,il}^{j} &= 0, \quad (D_{x-})_{N^{*}(m)+1,il}^{j} &= \frac{\partial \tilde{X}_{N^{*}(m)+1,il}^{j}}{\partial E_{N^{*}(m)il}^{j}} \\ \forall i = \overline{0, I^{*}(m)} \quad \varkappa \quad \forall l = \overline{0, L^{*}(m)} \quad (m = \overline{1, M}); \end{split}$$

ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ том 51 № 5 2011

828

ВЫЧИСЛЕНИЕ ГРАДИЕНТА ФУНКЦИОНАЛА В ОДНОЙ ЗАДАЧЕ

$$\begin{split} (D_{y+})_{nil}^{j} &= \frac{\partial \tilde{Y}_{nil}^{j}}{\partial E_{nil}^{j}}, \quad (D_{y-})_{nil}^{j} &= \frac{\partial \tilde{Y}_{nil}^{j}}{\partial E_{n,i-1,l}^{j}}, \quad i = \overline{1, I^{*}(m)}, \\ &(D_{y+})_{n0l}^{j} &= \frac{\partial \tilde{Y}_{n0l}^{j}}{\partial E_{n0l}^{j}}, \quad (D_{y-})_{n0l}^{j} &= 0, \\ &(D_{y+})_{n,I^{*}(m)+1,l}^{j} &= 0, \quad (D_{y-})_{n,I^{*}(m)+1,l}^{j} &= \frac{\partial \tilde{Y}_{n,I^{*}(m)+1,l}^{j}}{\partial E_{nI^{*}(m)l}^{j}}, \\ &\forall n &= \overline{0, N^{*}(m)} \quad \bowtie \quad \forall l &= \overline{0, L^{*}(m)} \quad (m &= \overline{1, M}); \\ &(D_{z+})_{nil}^{j} &= \frac{\partial \tilde{Z}_{nil}^{j}}{\partial E_{nil}^{j}}, \quad (D_{z-})_{nil}^{j} &= \frac{\partial \tilde{Z}_{nil}^{j}}{\partial E_{ni,l-1}^{j}}, \quad l &= \overline{1, L^{*}(m)}, \\ &(D_{z+})_{ni0}^{j} &= \frac{\partial \tilde{Z}_{ni0}^{j}}{\partial E_{ni0}^{j}}, \quad (D_{z-})_{ni0}^{j} &= 0, \\ &(D_{z+})_{ni,L^{*}(m)+1}^{j} &= 0, \quad (D_{z-})_{ni,L^{*}(m)+1}^{j} &= \frac{\partial \tilde{Z}_{ni,L^{*}(m)+1}^{j}}{\partial E_{nil}^{j}}, \\ &\forall n &= \overline{0, N^{*}(m)} \quad \bowtie \quad \forall i &= \overline{0, I^{*}(m)} \quad (m &= \overline{1, M}); \\ &(D_{xd})_{nil}^{i} &= \frac{\partial (X_{d})_{nil}^{j}}{\partial E_{nil}^{j}}, \quad (D_{yd})_{nil}^{j} &= \frac{\partial (Y_{d})_{nil}^{j}}{\partial E_{nil}^{j}}, \quad (D_{zd})_{nil}^{j} &= \frac{\partial (Z_{d})_{nil}^{j}}{\partial E_{nil}^{j}}, \\ &\forall n &= \overline{0, N^{*}(m)}, \quad \forall i &= \overline{0, I^{*}(m)}, \quad \forall l &= \overline{0, L^{*}(m)}, \quad m &= \overline{1, M}. \end{split}$$

Применение методологии быстрого автоматического дифференцирования приводит к следующим системам уравнений для определения импульсов.

3.1. Начальные условия для импульсов

Подобно тому как это было сделано в работе [2], системе уравнений для импульсов можно придать более компактный вид, если $\forall n = \overline{0, N^*(m)}$ и $\forall i = \overline{0, I^*(m)}$ ($m = \overline{1, M}$) формально положить $w_{ni,-1}^J = w_{ni,L^*(m)+1}^J = 0$ и $p_{ni,-1}^J = p_{ni,L^*(m)+1}^J = 0$.

Для того чтобы получить сопряженные переменные на последнем временно́м слое j = J, нужно $\forall n = \overline{0, N^*(m)}$ и $\forall i = \overline{0, I^*(m)}$ ($m = \overline{1, M}$) решить следующую систему линейных алгебраических уравнений относительно переменных p_{nil}^J :

$$p_{nil}^{J} = w_{ni,l-1}^{J} (D_{z+})_{nil}^{J} p_{ni,l-1}^{J} + w_{nil}^{J} [(D_{z-})_{ni,l+1}^{J} - (D_{z+})_{nil}^{J}] p_{nil}^{J} - w_{ni,l+1}^{J} (D_{z-})_{ni,l+1}^{J} p_{ni,l+1}^{J} + w_{nil}^{J} S_{nil}^{2zd} (D_{zd})_{nil}^{J} p_{nil}^{J} + \frac{\partial F}{\partial E_{nil}^{J}},$$

$$l = \overline{0, L^{**}(n, i)}, \quad m = \overline{1, M}.$$
(3.4)

Формулировку всех трех подзадач для вычисления импульсов приведем в компактном виде. Для этого заранее положим

$$\begin{split} w_{ni,-1}^{j} &= w_{ni,\,L^{*}(m)+1}^{j} = w_{-1,\,il}^{j} = w_{N^{*}(m)+1,\,il}^{j} = w_{n,\,-1,\,l}^{j} = w_{n,\,I^{*}(m)+1,\,l}^{j} = 0, \\ p_{-1,\,il}^{j} &= p_{N^{*}(m)+1,\,il}^{j} = p_{n,\,-1,\,l}^{j} = p_{n,\,I^{*}(m)+1,\,l}^{j} = p_{ni,\,-1}^{j} = p_{ni,\,L^{*}(m)+1}^{j} = 0, \\ p_{-1,\,il}^{j+1/3} &= p_{N^{*}(m)+1,\,il}^{j+1/3} = p_{n,\,-1,\,l}^{j+1/3} = p_{n,\,I^{*}(m)+1,\,l}^{j+1/3} = p_{ni,\,-1}^{j+1/3} = p_{ni,\,L^{*}(m)+1}^{j+1/3} = 0, \end{split}$$

$$p_{-1,il}^{j+2/3} = p_{N^*(m)+1,il}^{j+2/3} = p_{n,-1,l}^{j+2/3} = p_{n,I^*(m)+1,l}^{j+2/3} = p_{ni,-1}^{j+2/3} = p_{ni,L^*(m)+1}^{j+2/3} = 0,$$

$$j = \overline{1, J}, \quad n = \overline{0, N^*(m)}, \quad i = \overline{0, I^*(m)}, \quad l = \overline{0, L^*(m)}, \quad m = \overline{1, M}.$$

3.2. Первая подзадача для импульсов (у-направление)

Чтобы вычислить импульсы $p_{nil}^{j+2/3}$ на временном подслое $(j + 2/3), j = \overline{J-1, 0}$, необходимо для всех $n = \overline{0, N^*(m)}$ и для всех $l = \overline{0, L^*(m)}$ $(m = \overline{1, M})$ решить следующую линейную алгебраическую систему из $I^*(m) + 1$ уравнений:

$$p_{nil}^{j+2/3} = w_{n,i-1,l}^{j+1} (D_{y+})_{nil}^{j+2/3} p_{n,i-1,l}^{j+2/3} + w_{nil}^{j+1} [(D_{y-})_{n,i+1,l}^{j+2/3} - (D_{y+})_{nil}^{j+2/3}] p_{nil}^{j+2/3} - w_{n,i+1,l}^{j+1} (D_{y-})_{n,i+1,l}^{j+2/3} p_{n,i+1,l}^{j+2/3} + w_{nil}^{j+1} S_{nil}^{2yd} (D_{yd})_{nil}^{j+2/3} p_{nil}^{j+2/3} + \xi_{nil}^{j+2/3},$$
(3.5)

где

$$\begin{split} \xi_{nil}^{j+2/3} &= p_{nil}^{j+1} + w_{n-1,il}^{j+1} (D_{x+})_{nil}^{j+2/3} p_{n-1,il}^{j+1} + w_{nil}^{j+1} [(D_{x-})_{n+1,il}^{j+2/3} - (D_{x+})_{nil}^{j+2/3}] p_{nil}^{j+1} - \\ &- w_{nil}^{j+1} (D_{x-})_{n+1,il}^{j+2/3} p_{n+1,il}^{j+1} + w_{n,i-1,l}^{j+1} (D_{y+})_{nil}^{j+2/3} p_{n,i-1,l}^{j+1} + \\ &+ w_{nil}^{j+1} [(D_{y-})_{n,i+1,l}^{j+2/3} - (D_{y+})_{nil}^{j+2/3}] p_{nil}^{j+1} - w_{n,i+1,l}^{j+1} (D_{y-})_{n,i+1,l}^{j+2/3} p_{n,i+1,l}^{j+1} + \\ &+ w_{nil}^{j+1} S_{nd}^{2xd} (D_{xd})_{nil}^{j+2/3} p_{nil}^{j+1} + w_{nil}^{j+1} S_{nil}^{2yd} (D_{yd})_{nil}^{j+2/3} p_{nil}^{j+1} + \frac{\partial F}{\partial E_{nil}^{j+2/3}}, \\ &i = \overline{0, I^{*}(m)}, \quad m = \overline{1, M}. \end{split}$$

3.3. Вторая подзадача для импульсов (х-направление)

Чтобы вычислить сопряженные переменные $p_{nil}^{j+1/3}$ на временном подслое $(j + 1/3), j = \overline{J-1, 0}$, необходимо для всех $i = \overline{0, I^*(m)}$ и для всех $l = \overline{0, L^*(m)}$ $(m = \overline{1, M})$ решить следующую линейную алгебраическую систему из $N^*(m) + 1$ уравнений:

$$p_{nil}^{j+1/3} = w_{n-1,il}^{j+1} (D_{x+})_{nil}^{j+1/3} p_{n-1,il}^{j+1/3} + w_{nil}^{j+1} [(D_{x-})_{n+1,il}^{j+1/3} - (D_{x+})_{nil}^{j+1/3}] p_{nil}^{j+1/3} - w_{n+1,il}^{j+1} (D_{x-})_{n+1,il}^{j+1/3} p_{n+1,il}^{j+1/3} + w_{nil}^{j+1} S_{nil}^{2xd} (D_{xd})_{nil}^{j+1/3} p_{nil}^{j+1/3} + \xi_{nil}^{j+1/3},$$
(3.6)

где

$$\begin{aligned} \xi_{nil}^{j+1/3} &= p_{nil}^{j+2/3} + w_{n-1,il}^{j+1/3} (D_{x+})_{nil}^{j+1/3} p_{n-1,il}^{j+2/3} + w_{nil}^{j+1} [(D_{x-})_{n+1,il}^{j+1/3} - (D_{x+})_{nil}^{j+1/3}] p_{nil}^{j+2/3} - \\ &- w_{n+1,il}^{j+1} (D_{x-})_{n+1,il}^{j+1/3} p_{n+1,il}^{j+2/3} + w_{n+1,il}^{j+1} S_{nil}^{2xd} (D_{xd})_{nil}^{j+1/3} p_{nil}^{j+2/3} + w_{ni,l-1}^{j+1} (D_{z+})_{nil}^{j+1/3} p_{ni,l-1}^{j+2/3} + \\ &+ w_{nil}^{j+1} [(D_{z-})_{ni,l+1}^{j+1/3} - (D_{z+})_{nil}^{j+1/3}] p_{nil}^{j+2/3} - w_{ni,l+1}^{j+1} (D_{z-})_{ni,l+1}^{j+1/3} p_{ni,l+1}^{j+2/3} + w_{nil}^{j+1} S_{nil}^{2zd} (D_{zd})_{nil}^{j+1/3} p_{nil}^{j+2/3} + \frac{\partial F}{\partial E_{nil}^{j+1/3}}, \\ &n = \overline{0, N^{*}(m)}, \quad m = \overline{1, M}. \end{aligned}$$

3.4. Третья подзадача для импульсов (z-направление)

Для вычисления сопряженных переменных p_{nil}^{j} на *j*-м временном слое $j = \overline{J-1, 1}$ необходимо для всех $n = \overline{0, N^{*}(m)}$ и для всех $i = \overline{0, I^{*}(m)}$, $m = \overline{1, M}$, решить следующую линейную алгебраическую систему

$$p_{nil}^{j} = w_{ni,l-1}^{j} (D_{z+})_{nil}^{j} p_{ni,l-1}^{j} + w_{nil}^{j} ((D_{z-})_{ni,l+1}^{j} - (D_{z+})_{nil}^{j}) p_{nil}^{j} - w_{ni,l+1}^{j} (D_{z-})_{ni,l+1}^{j} p_{ni,l+1}^{j} + w_{nil}^{j} S_{nil}^{2zd} (D_{zd})_{nil}^{j} p_{nil}^{j} + \xi_{nil}^{j},$$
(3.7)

$$\begin{aligned} \xi_{nil}^{j} &= p_{nil}^{j+1/3} + w_{n,i-1,l}^{j+1}(D_{y+})_{nil}^{j} p_{n,i-1,l}^{j+1/3} + w_{nil}^{j+1} [(D_{y-})_{n,i+1,l}^{j} - (D_{y+})_{nil}^{j}] p_{nil}^{j+1/3} - \\ &- w_{n,i+1,l}^{j+1}(D_{y-})_{n,i+1,l}^{j} p_{n,i+1,l}^{j+1/3} + w_{nil}^{j+1} S_{nil}^{2yd}(D_{yd})_{nil}^{j} p_{nil}^{j+1/3} + w_{ni,l-1}^{j+1}(D_{z+}) p_{n,l-1}^{j+1/3} + \\ &+ w_{nil}^{j+1} [(D_{z-})_{ni,l+1}^{j} - (D_{z+})_{nil}^{j}] p_{nil}^{j+1/3} - w_{ni,l+1}^{j+1}(D_{z-})_{ni,l+1}^{j} p_{ni,l+1}^{j+1/3} + w_{nil}^{j+1} S_{nil}^{2zd}(D_{zd})_{nil}^{j} p_{nil}^{j+1/3} + \frac{\partial F}{\partial E_{nil}^{j}} \\ &l = \overline{0, L^{**}(n, i)}, \quad m = \overline{1, M}. \end{aligned}$$

Системы линейных алгебраических уравнений (3.4)–(3.7), как нетрудно видеть, аппроксимируют начально-краевую задачу для уравнения обратной теплопроводности.

Каждая из указанных выше систем (3.4)–(3.7) решается с помощью метода прогонки (см. [6]). Последовательное решение этих трех подзадач при $j = \overline{J}, \overline{0}$ позволяет получить значения сопряженных переменных в следующем порядке: p_{nil}^J , $p_{nil}^{(J-1)+2/3}$, $p_{nil}^{(J-1)+1/3}$, p_{nil}^{J-1} , ..., $p_{nil}^{1+1/3}$, p_{nil}^1 , $p_{nil}^{0+2/3}$, $p_{nil}^{0+1/3}$, $n = \overline{0, N^*(m)}$, $i = \overline{0, I^*(m)}$, $l = \overline{0, L^*(m)}$, $m = \overline{1, M}$.

Производные $(D_{x+})_{nil}^{j}$, $(D_{x-})_{nil}^{j}$, ..., а также производные целевой функции $\partial F/\partial E_{nil}^{j}$ по фазовым переменным вычисляем аналогично тому, как это показано в [2].

4. ГРАДИЕНТ ЦЕЛЕВОЙ ФУНКЦИИ ДИСКРЕТНОЙ ЗАДАЧИ ОПТИМАЛЬНОГО УПРАВЛЕНИЯ

В качестве управляющей функции u(t) поставленной задачи оптимального управления выбрана зависимость от времени перемещения литейной формы в плавильной печи, а именно аппликата нижней грани стенки печи $Z_{Sou}(t)$. Значение этого параметра входит в выражения, определяющие функции $q_1(t)$ и $q_2(t)$ в том случае, когда ячейка находится вне жидкого алюминия. Управляющая функция u(t) аппроксимируется кусочно-постоянной функцией, так что на каждом шаге по времени она имеет постоянные значения. Так, полагаем, что на интервале времени $[t^j, t^{j+1}]$ управление имеет вид $u(t) = Z_{Sou}(t^{j+1}) = Z_{Sou}^{j+1}$. Следовательно, $q_1^{j+1/3} = q_1^{j+2/3} = q_1^{j+1}$ и $q_2^{j+1/3} =$ $= q_2^{j+2/3} = q_2^{j+1}$. Согласно технике быстрого автоматического дифференцирования, компоненты градиента функции вычисляются по формуле

$$\begin{split} \frac{dF}{du^{j}} &= \frac{\partial F}{\partial u^{j}} + \sum_{m=1}^{M} \sum_{n=0}^{N^{*}(m)} \sum_{i=0}^{I^{*}(m)} \left(w_{niL^{*}(m)}^{j} \frac{\partial \tilde{Z}_{ni,L^{*}(m)+1}^{j}}{\partial u^{j}} p_{niL^{*}(m)}^{j} - w_{ni0}^{j} \frac{\partial \tilde{Z}_{ni0}^{j}}{\partial u^{j}} p_{ni0}^{j} \right) + \\ &+ \sum_{m=1}^{M} \sum_{n=0}^{N^{*}(m)} \sum_{l=0}^{L^{*}(m)} \left(w_{nI^{*}(m)l}^{j} \frac{\partial \tilde{Y}_{n,l^{*}(m)+1,l}^{(j-1)+2/3}}{\partial u^{j}} p_{nI^{*}(m)l}^{j} - w_{n0l}^{j} \frac{\partial \tilde{Y}_{n0l}^{(j-1)+2/3}}{\partial u^{j}} p_{n0l}^{j} \right) + \\ &+ \sum_{m=1}^{M} \sum_{i=0}^{I^{*}(m)} \sum_{l=0}^{L^{*}(m)} \left(w_{N^{*}(m)il}^{j} \frac{\partial \tilde{X}_{N^{*}(m)+1,l}^{(j-1)+2/3}}{\partial u^{j}} p_{N^{*}(m)il}^{j} - w_{0il}^{j} \frac{\partial \tilde{X}_{0il}^{(j-1)+2/3}}{\partial u^{j}} p_{0il}^{j} \right) + \\ &+ \sum_{m=1}^{M} \sum_{i=0}^{N^{*}(m)} \sum_{l=0}^{L^{*}(m)} w_{nil}^{j} \left(S_{nil}^{2zd} \frac{\partial (Z_{d})_{nil}^{j}}{\partial u^{j}} + S_{nil}^{2xd} \frac{\partial (X_{d})_{nil}^{(j-1)+2/3}}{\partial u^{j}} + S_{nil}^{2yd} \frac{\partial (Y_{d})_{nil}^{(j-1)+2/3}}{\partial u^{j}} \right) p_{nil}^{j} + \\ &+ \sum_{m=1}^{M} \sum_{n=0}^{N^{*}(m)} \sum_{l=0}^{L^{*}(m)} \left(w_{nI^{*}(m)l}^{j} \frac{\partial \tilde{Y}_{n,l^{*}(m)+1,l}^{j}}{\partial u^{j}} p_{nl^{*}(m)l}^{j-1)+2/3} - w_{n0l}^{j} \frac{\partial \tilde{Y}_{n0l}^{(j-1)+2/3}}{\partial u^{j}} p_{n0l}^{(j-1)+2/3} \right) + \end{split}$$

$$\begin{aligned} +\sum_{m=1}^{M}\sum_{i=0}^{l^{*}(m)}\sum_{l=0}^{l^{*}(m)} \left(w_{N^{*}(m)il}^{j} \frac{\partial \tilde{X}_{N^{*}(m)+1,il}^{(j-1)+1/3}}{\partial u^{j}} p_{n^{*}(m)il}^{(j-1)+2/3} - w_{0il}^{j} \frac{\partial \tilde{X}_{0il}^{(j-1)+1/3}}{\partial u^{j}} p_{0il}^{(j-1)+2/3} \right) + \quad (4.1) \\ +\sum_{m=1}^{M}\sum_{n=0}^{N^{*}(m)}\sum_{i=0}^{l^{*}(m)} \left(w_{nlx(m)}^{j} \frac{\partial \tilde{Z}_{ni,l}^{(j-1)+1/3}}{\partial u^{j}} p_{nlx(m)}^{(j-1)+2/3} - w_{nl0}^{j} \frac{\partial \tilde{Z}_{nl0}^{(j-1)+1/3}}{\partial u^{j}} p_{nl0}^{(j-1)+2/3} \right) + \\ +\sum_{m=1}^{M}\sum_{n=0}^{N^{*}(m)}\sum_{i=0}^{l^{*}(m)} w_{nil}^{j} \left(S_{nlil}^{2gd} \frac{\partial (Y_{d})_{nil}^{(j-1)+2/3}}{\partial u^{j}} + S_{nlil}^{2gd} \frac{\partial (X_{d})_{nil}^{(j-1)+1/3}}{\partial u^{j}} + S_{nlil}^{2gd} \frac{\partial (Z_{d})_{nil}^{(j-1)+2/3}}{\partial u^{j}} \right) + \\ +\sum_{m=1}^{M}\sum_{n=0}^{N^{*}(m)}\sum_{l=0}^{l^{*}(m)} w_{nil}^{j} \left(\frac{S_{nli}^{2gd} \frac{\partial (Y_{d})_{nil}^{(j-1)+2/3}}{\partial u^{j}} + S_{nlil}^{2gd} \frac{\partial (X_{d})_{nil}^{(j-1)+1/3}}{\partial u^{j}} - w_{0lil}^{j} \frac{\partial \tilde{X}_{0li}^{(j-1)+1/3}}{\partial u^{j}} \right) p_{nlil}^{(j-1)+2/3} + \\ +\sum_{m=1}^{M}\sum_{i=0}^{N^{*}(m)}\sum_{l=0}^{L^{*}(m)} \left(w_{N^{*}(m)il}^{j} \frac{\partial \tilde{X}_{nin}^{(j-1)+1/3}}{\partial u^{j}} p_{N^{*}(m)il}^{(j-1)+1/3} - w_{0lil}^{j} \frac{\partial \tilde{X}_{0li}^{(j-1)+1/3}}{\partial u^{j}} p_{0il}^{(j-1)+1/3} \right) + \\ +\sum_{m=1}^{M}\sum_{n=0}^{N^{*}(m)}\sum_{l=0}^{L^{*}(m)} \left(w_{nlx(m)l}^{j} \frac{\partial \tilde{X}_{ni,l}^{(j-1)+1/3}}{\partial u^{j}} p_{nli}^{(j-1)+1/3} - w_{nlil}^{j} \frac{\partial \tilde{X}_{0li}^{(j-1)+1/3}}{\partial u^{j}} p_{nlol}^{(j-1)+1/3} \right) + \\ +\sum_{m=1}^{M}\sum_{n=0}^{N^{*}(m)}\sum_{i=0}^{L^{*}(m)} \left(w_{nlx(m)l}^{j} \frac{\partial \tilde{Z}_{ni,l}^{(j-1)}}{\partial u^{j}} p_{nlix(m)l}^{(j-1)+1/3} - w_{nlil}^{j} \frac{\partial \tilde{Z}_{nlol}^{(j-1)+1/3}}{\partial u^{j}} p_{nlol}^{(j-1)+1/3} \right) + \\ +\sum_{m=1}^{M}\sum_{n=0}^{N^{*}(m)}\sum_{i=0}^{N^{*}(m)} w_{nil}^{i} \left(S_{nil}^{2gd} \frac{\partial (X_{a})_{nil}^{j}}{\partial u^{j}} p_{nilx(m)}^{(j-1)+1/3} - w_{nlil}^{j} \frac{\partial \tilde{Z}_{nlol}^{j}}{\partial u^{j}} p_{nlol}^{(j-1)+1/3} \right) + \\ +\sum_{m=1}^{M}\sum_{n=0}^{N^{*}(m)}\sum_{i=0}^{N^{*}(m)} w_{nil}^{i} \left(S_{nil}^{2gd} \frac{\partial (X_{a})_{nil}^{j}}}{\partial u^{j}} p_{nilx(m)}^{j} + S_{nil}^{2gd} \frac{\partial (Y_{a})_{nil}^{j}}{\partial u^{j}} + S_{nil}^{2gd} \frac{\partial (Z_{a})_{nil}^{j}}{\partial u^{j}} p_{nlol}^{j} \right) \right)$$

Так как функционал F(u) не зависит явно от вектора управления $\{u^{j}\}$, то все компоненты $\partial F/\partial u^{j} = 0$. Производные, которые входят в формулу (4.1), вычисляются аналогично тому, как это показано в [2].

Отметим, что значение градиента целевой функции, вычисленное по указанной выше формуле, является точным для выбранной аппроксимации задачи оптимального управления. Эта формула отличается от аналогичной формулы, указанной в [2], тем, что здесь есть дополнительные слагаемые (4-е, 8-е и 12-е).

Для практики представляют интерес еще два случая:

а) в качестве управляющей функции выбрана скорость $\tilde{u}(t)$ перемещения литейной формы в плавильной печи;

б) управляющая функция $\tilde{u}(t)$ на временном отрезке $[0, t^{J}]$ аппроксимируется кусочно-постоянной функцией с произвольным (например, небольшим) числом разбиений этого отрезка.

Системы уравнений (3.4)–(3.7) для определения значений сопряженных переменных в этих случаях не меняются, а формулы для вычисления градиента целевой функции аналогичны тем, которые указаны в [2].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. *Evtushenko Y.G.* Computation of exact gradients in distributed dynamic systems // Optimizat. Methods and Software. 1998. № 9. P. 45–75.
- 2. *Албу А.Ф., Зубов В.И.* Вычисление градиента функционала в одной задаче оптимального управления, связанной с кристаллизацией металла // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2009 Т. 49 № 1. С. 51–75.

- 3. *Албу А.Ф., Зубов В.И.* Математическое моделирование и исследование процесса кристаллизации металла в литейном деле // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2007. Т. 47. № 5. С. 882–902.
- 4. *Албу А.Ф., Зубов В.И*. Об оптимальном управлении процессом кристаллизации металла в литейном деле // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2008. Т. 48. № 5. С. 851–862.
- 5. *Албу А.В., Зубов В.И*. О выборе функционала и разностной схемы при решении задачи оптимального управления процессом кристаллизации металла // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2011. Т. 51. № 1. С. 24–38.
- 6. Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1977.