УДК 666.92:517.9

В. А. ВОЗНЕСЕНСКИЙ, Т. В. ЛЯШЕНКО, В. П. ГАВРИЛЮК
Одесская государственная академия строительства и архитектуры

НЕКОТОРЫЕ ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ КОМПЬЮТЕРНОГО СТРОИТЕЛЬНОГО МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

Рассмотрены некоторые особенности методологии обратных задач математического моделирования. Выделены типы обратных задач, которые могут формулироваться в компьютерном строительном материаловедении. Отмечается, что эта методология может расширить возможности и интенсифицировать развитие компьютерного материаловедения. С этих позиций проанализированы результаты компромиссной оптимизации технологии газосиликата с помощью итерационного случайного сканирования многофакторных полей свойств. На каждой итерации многократно решаются прямые задачи расчета по моделям значений критериев качества; на базе этих оценок решается обратная задача. Решения неустойчивы – малым изменениям критериев оптимальности в области компромисса соответствуют большие диапазоны изменения некоторых из девяти рецептурно-технологических факторов. На последней итерации инженерный результат получен с использованием регуляризации, основанной на гипотезе линейности локальных полей свойств в области компромисса.

обратная задача, газосиликат, физико-механические свойства, поиск компромисса, рецептурно-технологические факторы, регуляризация

Введение. Диалектическую связь двух философских категорий – "причины" и "следствия", в математике вообще и в математическом моделировании, в частности, отражают два класса задач – прямые и обратные [1-2].

В прямых задачах известны причины и необходимо определить следствие; например, рассчитать (методами математической физики) температурное поле, возникающее от известного источника тепла в конструкции заданной конфигурации из материала с известными теплофизическими свойствами.

В обратных задачах известно следствие и необходимо установить его причины; например, измерена температура в **N** точках конструкции, и необходимо определить теплофизические свойства материала и/или положение и параметры источника тепла. И методически, и математически обратные задачи значительно сложнее прямых; они, как правило, некорректны. В таких задачах нарушается хотя бы один из трех признаков корректности: условие существования, единственность решения и его устойчивость по отношению к малым вариациям данных.

Для того, чтобы решить некорректную задачу, в ее постановку необходимо ввести дополнительные условия, превращающие задачу в условно-корректную. Условия должны выбираться на основе априорных сведений или гипотез о свойствах решения, таким образом, чтобы его существование было обеспечено, в выделяемом этими условиями достаточно узком множестве допустимых решений.

Для того чтобы найти наиболее близкое к неизвестному "истинному" решению задачи устойчивое приближенное решение, используется регуляризация. Это принцип отбора допустимых решений на основе того или иного критерия отбора (например, метод наименьших квадратов рассматривают как простую форму регуляризации в задачах аппроксимации). Исследованием методов регуляризации занимаются математики, специалисты по обратным и некорректным задачам.

С развитием компьютерных технологий область приложений, в которых ставятся и решаются обратные и некорректные задачи, охватила практически все научные дисциплины. Наиболее обширны и плодотворны результаты, полученные, в частности, в дистанционном зондировании, астро- и геофизике, промышленной и медицинской томографии. В электронной научной библиотеке немало публикаций близких к компьютерному строительному материаловедению: обратные задачи тепло-обмена и диффузии, оценки характеристик анизотропного материала, обработки результатов измерений, моделирования и оптимизации.

Цель данной работы — первичная типизация ряда обратных задач компьютерного строительного материаловедения и анализ ситуации, возникающей на последних этапах компромиссной оптимизации, реализуемой итерационным случайным сканированием многофакторных рецептурно-технологических (РТ) полей свойств материала.

Первичная типизация некоторых обратных задач компьютерного строительного материаловедения. В прямых задачах требуется рассчитать по математической модели F(**X**) результат **Y** воздействия k факторов **X**.

На входе известны значения всех (учитываемых данной конкретной моделью) компонентов вектора **X** (временные и пространственные координаты, энергетические потенциалы, ..., уровни **РТ**-факторов) в известных границах их существования и/или варьирования. Модель может иметь любой генезис и структуру, а ее погрешность при расчете **Y** внутри рассматриваемой k-мерной области должна удовлетворять исследователя. В строительном материаловедении в настоящее время используется относительно узкая гамма моделей [3-5]. Для описания процессов (тепломассоперенос, гидратация, коррозия...) — это, как правило, дифференциальные уравнения, обыкновенные или в частных производных, с известными коэффициентами и граничными (начальными) условиями. Однако основную массу моделей в строительном материаловедении представляют алгебраические модели. Это могут быть результаты решения дифференциальных уравнений, описания тех или иных гипотез и априорных построений или формы, выбранные из веера конкурирующих моделей по принципам минимума погрешности, простоты, традиций. Однако во всех случаях остается требование определенности коэффициентов и, строго говоря, полноты информации, необходимой для однозначного решения данной прямой задачи.

В табл. 1 фрагментарно приведены условия определенности (неопределенности) факторов **X**, математической модели F(**X**) и отклика **Y** (результата в виде числа, функции, поля...) для прямой и обратных задач.

Класс обратных задач условно разделен на три подкласса (с весьма размытыми границами). При этом следует подчеркнуть, что решение обратной задачи специальными математическими методами (аналитическими или численными) тем успешнее (быстрее, точнее, устойчивее...), чем обширнее информация о моделируемом объекте. Эта информация собирается, как правило (особенно в наукоемких работах), с использованием методологии математической теории эксперимента и включает

Таблица 1 — Неопределенность составляющих прямой и обратных задач

Задача	Уровни факторов **X**	Математическая модель F(**X**)	Отклик Y
Прямая	Известны (заданы в известных границах существования – варьирования)	Известны структура, коэффициенты, граничные условия, погрешности	***Неизвестен***, рассчитывается по модели
Обратная, подкласс *A* (идентификация, восстановление зависимостей)	Известны (включая границы существования – варьирования, погрешности)	***Неизвестны*** структура, коэффициенты, граничные условия, погрешности	Известны уровни и погрешности
Обратная, подкласс *B* (коэффициентная, граничная)	Известны (включая границы существования – варьирования, погрешности)	Известна структура, ***неизвестны*** коэффициенты, граничные условия, погрешности	Известны уровни и погрешности
Обратная, подкласс *C*	***Неизвестны***	Известны структура, коэффициенты, граничные условия, погрешности	Известны уровни и погрешности

результаты измерений отклика **Y** при разных векторах факторов **X**, оценки погрешностей, характеристики возможных одно- и многофакторных функций Y(**X**) в исследуемой области.

Если структура модели неизвестна (а, следовательно, неизвестны и ее параметры), то это обратная задача, решение которой достаточно полно разработано и широко используется в конкретных областях науки и техники — задача идентификации, или восстановление зависимости **Y** от **X**. Следует обратить внимание на две возникшие в последние годы ситуации. Первая — при восстановлении однофакторных зависимостей, когда специальные программы (в частности, *Curve Expert*) предлагают веер из нескольких десятков конкурирующих моделей, расположенных по убыванию детерминированности. При выборе одной из них приоритетны точность и простота формы (нередко влияют корпоративные традиции). Необходимо, однако, оценить характер изменения кривой вблизи экспериментальных границ **Y**, даже если модель не предназначена для прогнозирования. Вторая ситуация — при восстановлении k-факторных зависимостей, когда принципы выбора модели реализуются в "неэлегантной" полиномиальной форме, где коэффициенты равны частным производным неизвестной функции F(**X**) вблизи некоторой точки, а точность достигается за счет повышения степени полинома. Следует отметить, что за увеличение числа факторов k исследователь платит интенсивно возрастающим числом N взаимоотличающихся опытов (что нынче весьма болезненно воспринимается в строительном материаловедении). Для линейных моделей (к сожалению, в отраслевой науке, как правило, бесполезных) минимум N = k +1, а для наиболее распространенных квадратичных — минимум N = 0.5(k+1)(k+2)... [5, табл. III.25].

Во втором подклассе обратных задач (*B*, табл. 1) форма модели F(**X**) задается, исходя из фундаментальных законов естествознания, обобщения накопленных опытных фактов и гипотез о моделируемом объекте. Если модель записана в алгебраической форме, то задача подкласса B сводится к определению неизвестных коэффициентов. Здесь, вообще говоря, успех зависит в основном от интеллектуального и материального уровней экспериментатора.

Когда модели F(**X**) имеют форму дифференциального уравнения, то это, как правило, обратные задачи математической физики. Задача является "коэффициентной", если нужно определить неизвестные константы, характеризующие среду, в которой происходит процесс: плотность, модуль упругости, вязкость, теплопроводность... Задача относится к "граничным", если главным результатом ее решения являются граничные и начальные условия дифференциального уравнения. Это дает возможность локализировать трещины и другие дефекты при неразрушающем контроле, проводить промышленную томографию, визуализировать структуру...

В обратных задач подкласса C требуется определить **X**, соответствующие известным **Y** (табл. 1). С точки зрения линейной алгебры — это, в частности, означает нахождение нормального псевдорешения системы линейных алгебраических уравнений с прямоугольными, вырожденными или плохо обусловленными матрицами. Математические методы, в том числе, алгоритмы регуляризации, и компьютерное обеспечение решения задач *C*, в которых модель имеет форму дифференциального или интегрального уравнения, весьма сложны. Однако их разработка является бурно развивающимся научным направлением. В компьютерном строительном материаловедении к этому подклассу задач относятся, в частности, определение РТ-параметров, обеспечивающих требуемые уровни свойств материала (допустимых решений), поиск решений, оптимальных по одному или нескольким критериям качества материала (компромиссно оптимальных).

Компромиссная оптимизация технологии газосиликата итерационным случайным сканированием полей свойств как обратная задача. Необходимость использования методологии обратных, некорректных задач возникает очень часто. Достаточно акцентировать внимание на том, что определение по опытным данным коэффициентов ЭС-моделей — это обратные задачи подклассов *A* и *B*, но описанные другой терминологией.

Однако в компьютерном строительном материаловедении возникают и другие задачи, при решении которых и при интерпретации результатов могут быть полезны разнообразные элементы методологии обратных задач.

Такой подход потребовался при поиске компромиссных оптимальных РТ-решений для газосиликата, выполненном [6] с помощью итерационного случайного сканирования РТ-полей пяти свойств. Поля описаны нелинейными ЭС-моделями с 9 факторами (растекаемость растворной смеси, $X_1 = 27 \pm 4$, см; влажность песка при помоле с известью, $X_2 = 5 \pm 3\%$; удельная поверхность песка, $X_3 = 250 \pm 100$, м^2/кг; изотермическая выдержка в автоклаве, $X_4 = 8 \pm 4$, час; рабочее давление пара в автоклаве, $X_5 = 1.0 \pm 0.2$, МПа; расход алюминиевой пудры, $X_6 = 0.07 \pm 0.03\%$; активность смеси, $X_7 = 17 \pm 3\%$; температура воды затворения, $X_8 = 35 \pm 10^{\circ}$С; расход цемента, $X_9 = 10 \pm 10\%$).

При выполнении нормативов по плотности (γ, кг/м^3) марки D800 и по прочности на сжатие (R_c, МПа) класса B5 за три итерации удалось повысить прочность на изгиб до R_b=2.54-2.58 МПа и предельную деформативность до ε = 1.04-1.11 мм/м, а коэффициент теплопроводности снизить до λ =160-161 мВт/м/К. При этом пошаговое продвижение к индивидуальным оптимумам составило 69-75% диапазона допустимых значений (RAV – *Range of Admissible Values*) для газобетона D800 и B5. На каждой из трех итераций генерировалось по 10000 случайных РТ-ситуаций в нормализованных переменных $x_i \leq |1|$ (i = 1, ..., 9) и рассчитывались по ЭС-моделям (прямая задача!) значения критериев качества газосиликата γ, R_c, R_b, ε и λ.

На первой итерации сканировались полные поля свойств и из 10000 вариантов сразу удалялись все комбинации РТ-факторов, которые не обеспечивали нормативов (численное решение обратной задачи!). Далее локальное поле активно сжималось (продолжение численного решения обратной задачи!) за счет пошагового компромиссного приближения его границ к индивидуальным оптимумам R_b, ε и λ. Когда в диапазоне компромисса остается лишь несколько точек, итерация прекращается. Уменьшенное на несколько порядков множество решений $\{x_1, ..., x_9\}$ является базовым для следующей итерации. Для "компенсации" промежутков между случайными точками эта область несколько расширяется (по каждому x_i). В расширенной гиперпризме вновь генерируется 10000 РТ-вариантов и проводится следующая итерация.

На рис. 1 показаны результаты третьей итерации, на которой к трем компромиссно оптимизируемым критериям качества газосиликата добавлены два минимизируемых критерия энергоемкости технологии – время изотермической выдержки в автоклаве τ (8±4 час, входит в ЭС-модели как x_4) и давление пара p (1±0.2 МПа, x_5 в моделях). Итерация финальная – остается лишь 1.7-5% от RAV для R_b, ε и λ, что не превышает погрешностей и измерения, и моделирования.

Однако для ответа на инженерный вопрос о значениях 9 факторов, обеспечивающих такие уровни критериев, нужно решить еще одну задачу. Ее следует признать некорректной, поскольку решение неустойчиво – "малым" изменениям R_b, ε и λ (левая часть столбчатой диаграммы на рис. 1) соответствуют "большие" колебания x_i (превышение не менее, чем вдвое, а для других нормативов D и B – на порядок). Однако, если пойти на некоторую погрешность и допустить гипотезу линейности полей в диапазонах компромисса, процедура регуляризации может быть сведена к вычислению средних x_i в диапазонах компромисса (рис. 1). Для них проводится контрольный расчет окончательных компромиссных значений R_b, ε и λ (приведены на рис. 1). Погрешность попадания в диапазоны компромисса не превышает 0.2% от RAV.

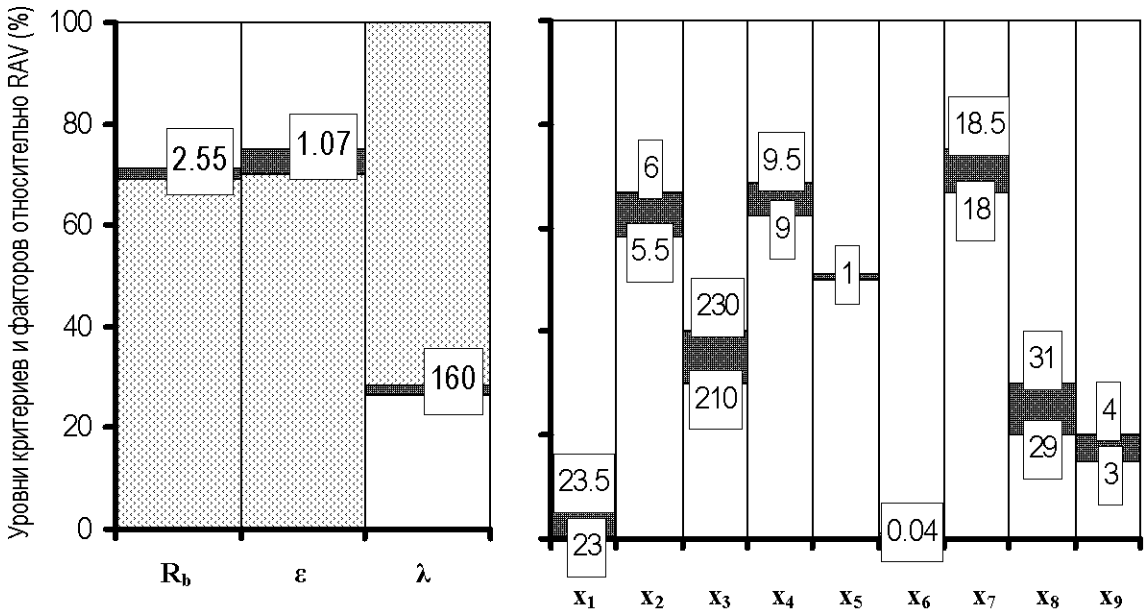

Рисунок 1 – Диапазоны компромисса для трех критериев качества и девяти РТ-факторов.

Заключение. Краткий анализ некоторых особенностей методологии обратных задач математического моделирования позволяет отметить, что эта методология может интенсифицировать развитие строительного компьютерного материаловедения. Проанализированы результаты компромиссной оптимизации технологии газосиликата методом итерационного случайного сканирования девятифакторных полей свойств. В этом численном методе последовательно на каждой итерации решаются прямые и обратные задачи. На последней итерации инженерный результат получен с использованием регуляризации, основанной на гипотезе линейности локальных полей свойств в диапазонах компромисса.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ватульян А.О. Математические модели и обратные задачи // Соросовский образовательный журнал. — 1998. — №11. — С. 143-148.
2. Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Численные методы решения обратных задач математической физики. — М: ЛКИ, 2009. — 480 с.
3. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В. ЭС-модели в компьютерном строительном материаловедении. — Одесса, Астропринт, 2006. — 116 с.
4. ЭВМ и оптимизация композиционных материалов / В.А. Вознесенский, Т.В. Ляшенко, Я. Иванов, И. Николов: — К.: Будивэльнык, 1989. — 240 с.
5. Вознесенский В. А., Ляшенко Т.В., Огарков Б.Л. Численные методы решения строительно-технологических задач на ЭВМ. — К.: Вища школа, 1989. — 328 с.
6. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Гаврилюк В.П. Компромиссная оптимизация свойств газосиликата при дискретных равномерно распределенных уровнях девяти рецептурно-технологических факторов // Вісник ДонНАБА, 2009-1(75). — Макіївка, 2009. — С. 139-146.

В. А. ВОЗНЕСЕНСЬКИЙ, Т. В. ЛЯШЕНКО, В. П. ГАВРИЛЮК

ДЕЯКІ ЗВОРОТНІ ЗАДАЧІ КОМП'ЮТЕРНОГО БУДІВЕЛЬНОГО МАТЕРІАЛОЗНАВСТВА

Одеська державна академія будівництва та архітектури

Розглянуто деякі особливості методології зворотних задач математичного моделювання. Виділено типи зворотних задач, які можуть формулюватися в комп'ютерному будівельному матеріалознавстві. Відзначено, що подана методологія може розширити можливості та інтенсифікувати розвиток комп'ютерного матеріалознавства.
З цих позицій проаналізовано результати компромісної оптимізації технології газосилікату за допомогою ітераційного випадкового сканування багатофакторних полів властивостей.
На кожній ітерації багаторазово розв'язуються прямі задачі розрахунку за моделями значень критеріїв якості; на основі цих оцінок розв'язується зворотна задача. Розв'язки нестійкі — незначним змінам критеріїв оптимальності в області компромісу відповідають великі діапазони змін деяких з дев'яти рецептурно-технологічних факторів. На останній ітерації інженерний результат отримано з використанням регуляризації, що ґрунтується на гіпотезі лінійності локальних полів властивостей в області компромісу.

зворотна задача, газосилікат, фізико-механічні властивості, пошук компромісу, рецептурно-технологічні фактори, регуляризація

V. A. VOZNESENSKY, T. V. LYASHENKO, V. P. GAVRILIUK
SOME INVERSE PROBLEMS IN COMPUTATIONAL MATERIALS SCIENCE
Odessa State Civil Engineering and Architecture Academy

Some rwculiarities of the methodology of inverse problems in mathematical modelling have been considered. The types of inverse problems that may be formulated in computational materials science have been distinguished. It is noted that these methods could enhance the capabilities of computational materials science and to intensify its progress. In this context analysed have been the results of compromise optimisation of autoclaved aerated concrete technology with the help of iterative random scanning of multi-factor property fields. At each of iterations the forward problems of calculating the values of quality criteria are many times solved; on the base of these estimates the inverse problem is solved. The solutions are unstable — to small variations of quality criteria in the region of compromise wide variation ranges of certain from nine composition-process factors correspond. At the final iteration the engineering result has been obtained with the use of regularisation based on the hypothesis of linearity of the local property fields in the compromise region.
inverse problem, autoclaved aerated concrete, physical-mechanical properties, search for compromise, composition-process factors, regularisation

Вознесенський Віталій Анатолійович — доктор технічних наук, професор кафедри "Процеси та апарати в технології будівельних матеріалів" Одеської державної академії будівництва та архітектури, заслужений діяч науки і техніки України, дійсний член Міжнародної інженерної академії (МІА) і голова Наукової ради з комп'ютерного матеріалознавства МІА. Наукові інтереси: експериментально-статистичне моделювання і комп'ютерне будівельне матеріалознавство.
Ляшенко Тетяна Василівна — доктор технічних наук, професор кафедри прикладної та обчислювальної математики і САПР ОДАБА, член-кореспондент МІА, член Наукової ради з комп'ютерного матеріалознавства МІА. Наукові інтереси: математичне моделювання і комп'ютерні технології в дослідженнях будівельних матеріалів.
Гаврилюк Варвара Петрівна — магістр, аспірантка кафедри ПАТБМ ОДАБА. Наукові інтереси: ніздрюваті композити, комп'ютерне матеріалознавство.

Вознесенский Виталий Анатольевич — доктор технических наук, профессор кафедры "Процессы и аппараты в технологии строительных материалов" (ПАТСМ) Одесской государственной академии строительства и архитектуры (ОГАСА), заслуженный деятель науки и техники Украины, действительный член Международной инженерной академии (МИА) и председатель Научного совета по компьютерному материаловедению МИА. Научные интересы: экспериментально-статистическое моделирование и компьютерное строительное материаловедение.
Ляшенко Татьяна Васильевна — доктор технических наук, профессор кафедры прикладной и вычислительной математики и САПР ОГАСА, член-корреспондент МИА и член Научного совета по компьютерному материаловедению МИА. Научные интересы: математическое моделирование и компьютерные технологии в исследованиях строительных материалов.
Гаврилюк Варвара Петровна — магистр, аспирантка кафедры ПАТСМ ОГАСА. Научные интересы: ячеистые композиты, компьютерное материаловедение.

Voznesensky Vitalv Anatolievych — D.Sc.,Professor, professor of “Processes and Apparatuses in the Bulding Materials Technology" Chair of Odessa State Academy of Civil Engineering and Architecture, Honorary Scientist of Scvence and Engineering of Ukraine, Full Member of International Academy of Engineering and the Chair man of Scientific Council on Computer-Materials Sciences. Scientific interests: experimental-statistical modelling and computational materials science.
Lyashenko Tetyana Vasil'yvna — D.Sc., Professor, professor of the "Applied and Computer Mathematics and Computer-Aided Design Systems of" Chair of Odessa State Academy of Civil Engineering and Architecture. Corresponding Member of International Academy of Engineering and the member of the Scientific Council on Computer Materials Sciences". Scientific interests: mathematical modelling and computer technologies in researches of building materials.
Gavriliuk Varvara Petrivna — M.Sc., post-graduate student of the "Chemical Engineering in Building Materials Technology" Chair of Odessa State Civil Engineering and Architecture Academy. Scientific interests: cellular composites, computational materials science.