

ВАРИАЦИОННЫЕ ПРИНЦИПЫ И МЕТОД РАСЩЕПЛЕНИЯ

В. В. ПЕНЕНКО

*Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН,
Новосибирск, Россия*

Application of variational principle and weak approximation is considered for construction of numerical splitting schemes and algorithms for realization of mathematical models. The joint model of atmospheric hydrodynamics, and transport and transformation of pollutants is used as an example. The schemes for direct and inverse models are discussed. A variational formulation of the model and a collection of functionals defined on the set of state functions are the background for algorithmic constructions.

Вариационные принципы в сочетании с методами расщепления и декомпозиции являются универсальным и мощным средством построения численных схем и методов для решения широкого класса задач на базе математических моделей. В таких комбинациях хорошо проявляются и взаимно усиливаются их лучшие качества.

Метод расщепления дает возможность построения простых и эффективных в реализации численных схем для сложных многомерных моделей [1–4]. В свою очередь, вариационные принципы обеспечивают согласование различных элементов модели и алгоритмов на всех этапах технологии моделирования, организацию взаимодействия между моделями и данными наблюдений, построение прямых и обратных связей в соответствии с заданными критериями и ограничениями. Ключевую роль вариационные принципы играют при организации методов обратного моделирования и в формировании различных режимов распараллеливания вычислительных процессов.

Здесь мы используем расщепление как способ построения дискретных аналогов математических моделей. В рамках вариационного принципа он естественным образом получается как конструктивное применение метода слабой аппроксимации для дискретизации по времени основного интегрального тождества, соответствующего математической модели. Идея о рассмотрении метода расщепления как метода слабой аппроксимации специального вида была предложена Н. Н. Яненко [4].

В настоящей работе рассматривается лишь один аспект технологии моделирования на базе вариационных формулировок, относящийся к построению дискретных моделей для прямых и сопряженных задач. Для конкретизации, изложение ведется на примере класса задач гидротермодинамики атмосферы и охраны окружающей среды.

1. Постановка задачи

Запишем систему уравнений модели гидротермодинамики атмосферы совместно с моделями переноса и трансформации примесей:

уравнения движения

$$\frac{\partial \pi u}{\partial t} + L(u) - f\pi v + m\pi \left\{ \frac{\partial \Phi}{\partial x} + \eta \frac{\partial \pi}{\partial x} \right\} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \pi v}{\partial t} + L(u) + f\pi u + m\pi \left\{ \frac{\partial \Phi}{\partial y} + \eta \frac{\partial \pi}{\partial y} \right\} = 0, \quad (2)$$

уравнения термодинамики

$$\frac{\partial \pi T}{\partial t} + L(T) - \frac{\pi \eta}{c_p \sigma} \{ \pi \dot{\sigma} + \sigma \dot{\pi} \} - Q_T = 0, \quad (3)$$

уравнения переноса и трансформации влаги и загрязняющих примесей

$$\frac{\partial \pi \Psi_i}{\partial t} + L(\Psi_i) + (R\bar{\Psi})_i - Q_{\Psi_i} = 0, \quad (4)$$

*Работа поддержана грантами РФФИ 00-15-98543, 01-05-65313 и 99-07-90422.
© В. В. Пененко, 2001.

уравнение гидростатики

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \sigma} + \frac{\eta \pi}{\sigma} = 0, \quad (5)$$

уравнение неразрывности

$$\frac{\partial \pi}{\partial t} + M(\pi \vec{u}) = 0, \quad (6)$$

уравнение для тенденции приземного давления

$$\frac{\partial \pi}{\partial t} + \int_0^1 \operatorname{div}_s(\pi \vec{u}) d\sigma' = 0, \quad (7)$$

уравнение для расчета вертикальной скорости

$$\chi(\dot{\sigma}) \equiv \dot{\sigma} \pi + \frac{\partial \pi}{\partial t} + \int_0^\sigma \left(\frac{\partial \pi}{\partial t} + \operatorname{div}_s(\pi \vec{u}) \right) d\sigma' = 0. \quad (8)$$

Здесь приняты следующие обозначения и определения: $L(\varphi) = M(\pi\varphi) - D(\varphi)$ — конвективно-диффузионный оператор,

$$M(\varphi) = \operatorname{div}_s(\varphi \vec{u}) + \frac{\partial \varphi \dot{\sigma}}{\partial \sigma}, \quad \operatorname{div}_s(\varphi \vec{u}) = m^2 \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\varphi u}{m} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\varphi v}{m} \right) \right\},$$

$$D(\varphi) = m^2 \operatorname{div}_s \pi \mu_\varphi \operatorname{grad}_s \varphi + \frac{\partial}{\partial \sigma} \mu_{\varphi\sigma} \frac{\partial \varphi}{\partial \sigma}, \quad \eta = \frac{RT}{\pi + p_T/\sigma},$$

$\vec{\Psi} \equiv \{\Psi_i, i = \overline{1, 1+n}\} \equiv \{q, C_\alpha, \alpha = \overline{1, n}, n \geq 1\}$, $\vec{u} = (u, v, \dot{\sigma})$ — вектор скорости в системе координат x, y, σ ; $\dot{\sigma} = d\sigma/dt$, $\sigma = (p - p_T)/(p_s - p_T)$, $\pi = p_s - p_T$, $\vec{\varphi} = (u, v, \dot{\sigma}, T, \Phi, \vec{\Psi}, \chi, \pi) \equiv \{\varphi_i, i = \overline{1, n+8}\}$ — вектор-функция состояния, T — температура, Φ — геопотенциал, q — удельная влажность, C_α — концентрации загрязняющих примесей, n — число различных субстанций: p, p_T, p_s — давление, давление на верхней границе воздушной массы и на поверхности Земли; $\mu_\varphi = (\mu_{\varphi x}, \mu_{\varphi y}, \mu_{\varphi\sigma})$ — коэффициенты турбулентного обмена для субстанции φ в направлении координат x, y, σ соответственно, R — универсальная газовая постоянная, c_p — теплоемкость при постоянном давлении, m — масштабный коэффициент карты, σ — координата, следящая за рельефом поверхности Земли.

Математическая модель определена в области $D_t = D \times [0, \bar{t}]$, где D — область изменения пространственных координат $\vec{x} = (x, y, \sigma), (0, \bar{t})$ — интервал изменения времени. Граничные условия для функции состояния $\vec{\varphi}$ определяются физическим содержанием модели и конкретной постановкой задачи. По горизонтальным координатам для задач на ограниченной территории обычно принимаются условия выхода процессов на их фоновые значения. В глобальных моделях используются условия периодичности. По вертикали принимаются условия

$$\dot{\sigma} = 0 \quad \text{при} \quad \sigma = 0 \quad \text{и} \quad \sigma = 1 \quad (9)$$

и условия выхода на фоновые значения функций состояния либо потоков соответствующих субстанций на верхней границе. На нижней границе воздушных масс задаются условия взаимодействия атмосферы и примесей с подстилающей поверхностью в рамках моделей пограничного и приземного слоев.

Для построения дискретных аналогов моделей и алгоритмов решения задач на их основе будем использовать вариационные принципы. С этой целью определим вариационную формулировку модели. Сначала введем скалярное произведение

$$(\vec{\varphi}_1, \vec{\varphi}_2) = \int_{D_t} \sum_{i=1}^{n+7} \alpha_{\varphi i} (\vec{\varphi}_{1i} \cdot \vec{\varphi}_{2i}) dD dt + \alpha_n \int_{S_t} \pi_1 \pi_2 ds dt, \quad (10)$$

где $\vec{\varphi}_1, \vec{\varphi}_2 \in Q(D_t)$ — функции состояния, $dD = dS d\sigma$, $dS = dx dy / m^2$, $S_t = S \times [0, \bar{t}]$, S — нижняя граница области D , α_φ — размерные коэффициенты.

Для удобства изложения воспользуемся операторной формой представления модели и запишем ее в виде:

$$B \frac{\partial \vec{\varphi}}{\partial t} + G(\vec{\varphi}, \vec{Y}) = 0, \quad (11)$$

где $G(\vec{\varphi}, \vec{Y})$ — “пространственный” оператор модели, B — диагональная матрица, $\vec{Y} \in R(D_t)$ — вектор параметров, источников и входных данных модели, $R(D_t)$ — область их допустимых значений.

С учетом сделанных обозначений основное интегральное тождество для вариационной формулировки модели построим, следуя [2], в виде

$$I(\vec{\varphi}, \vec{Y}, \vec{\varphi}^*) \equiv \left(B \frac{\partial \vec{\varphi}}{\partial t} + G(\vec{\varphi}, \vec{Y}), \vec{\varphi}^* \right) = 0, \tag{12}$$

$$\vec{\varphi} \in Q(D_t), \quad \vec{\varphi}^* \in Q^*(D_t), \quad \vec{Y} \in R(D_t),$$

где $\vec{\varphi}^* \in Q^*(D_t)$ — вектор функция такой же структуры, как и $\vec{\varphi}$, с достаточно гладкими компонентами, а $Q^*(D_t)$ — пространство функций, сопряженных по отношению к пространству функций состояния $Q(D_t)$.

Структуру функционала $I(\vec{\varphi}, \vec{Y}, \vec{\varphi}^*)$ сформируем, исходя из определения скалярного произведения (10) так, чтобы при специальном задании функции $\vec{\varphi}^*$ из (12) можно было бы получить уравнение баланса энергии системы и другие балансные соотношения. Нормировочные коэффициенты α_φ выберем из соотношения энергетического баланса. Исходя из этих предпосылок, получается вариационная формулировка модели (1)–(9).

$$I(\vec{\varphi}, \vec{Y}, \vec{\varphi}^*) = \sum_{i=1}^{4+n} \alpha_{\varphi_i} (\Lambda \varphi_i, \varphi_i^*) + \int_{D_t} \left\{ \pi f(uv^* - vu^*) + \sum_{k=1}^{1+n} \alpha_{\varphi_k} (R\vec{\Psi})_k \Psi_k^* - \right. \tag{13}$$

$$- \sum_{i=1}^{4+n} \alpha_{\varphi_i} Q_{\varphi_i} \varphi_i^* + \pi(\vec{u}^* \text{grad } \Phi - \vec{u} \text{grad } \Phi^*) + (\Phi^* - \Phi \frac{\partial \sigma T^*}{\partial \sigma}) \frac{\partial \pi}{\partial t} +$$

$$+ \eta \left[\frac{1}{\sigma} (\dot{\sigma}^* - \dot{\sigma} T^*) + m[(u^* - u T^*) \frac{\partial \pi}{\partial x} + (v^* - v T^*) \frac{\partial \pi}{\partial y}] + \alpha_\chi \chi \chi^* \right\} dDdt +$$

$$+ \int_{S_t} [(\Phi_S T^* + \pi^*) \frac{\partial \pi}{\partial t} + \pi^* \int_0^1 \text{div}_s \pi \vec{u} d\sigma'] dSdt + \int_{\Omega_t} \pi \Phi^* u_n d\Omega dt = 0,$$

где

$$(\Lambda \varphi_i, \varphi_i^*) = \left\{ \int_{D_t} \left\{ 0.5(\varphi^* \tilde{M}(\pi\varphi) - \varphi \tilde{M}(\pi\varphi^*)) + \pi \mu_\varphi \text{grad } \varphi \text{grad } \varphi^* \right\} dDdt + \right. \tag{14}$$

$$+ 0.5 \int_D \pi \varphi \varphi^* | \vec{l}_0 | dD + \int_{\Omega_t} (0.5 \varphi u_n - \mu_{\varphi n} \frac{\partial \varphi}{\partial n}) \pi \varphi^* d\Omega dt \left. \right\}, \quad i = \overline{1, 4+n},$$

$$\tilde{M}(\varphi) \equiv \frac{\partial \varphi}{\partial t} + M(\varphi), \quad d\Omega = \{dx d\sigma/m, dy d\sigma/m, dS\}, \quad \Omega_t = \Omega \times [0, \bar{t}],$$

Ω — граница области D , u_n — нормальная составляющая вектора скорости к границе Ω . Граничные и начальные условия для функции состояния учитываются в тождестве (13), (14) через интегралы по границам области D_t и при $t = 0$. Условия для сопряженных функций являются следствием этого тождества и конкретной постановки задачи. Свойства энергетического баланса хорошо видно на примере формы (14) при подстановке $\varphi_i^* = \varphi_i$.

Для решения многих задач экологии и климата требуются оценки обобщенных характеристик изучаемых процессов, определенных на множестве функций состояния. Их можно всегда записать в виде функционала

$$\Phi_k(\vec{\varphi}) = \int_{D_t} F_k(\vec{\varphi}(\vec{x}, t)) \chi_k(\vec{x}, t) dDdt, \quad k = \overline{0, K}, \quad K \geq 1. \tag{15}$$

где $F_k(\vec{\varphi})$ — функции, подлежащие оценке, $\chi_k(\vec{x}, t) \geq 0$ — весовые функции, а $\chi_k(\vec{x}, t) dDdt$ — порождаемые ими меры Радона или Дирака в области D_t .

Вариации функционалов будем оценивать с помощью вариационного принципа в предположении, что математическая модель является ограничением для функций состояния. При таком предположении введем семейство расширенных функционалов

$$\tilde{\Phi}(\vec{\varphi}) = \Phi_k(\vec{\varphi}) + [I(\vec{\varphi}, \vec{Y}, \vec{\varphi}^*)]_{D_t}, \tag{16}$$

По существу, это соотношение дает способ погружения математической модели в технологию моделирования.

Теперь можно непосредственно воспользоваться техникой вариационного исчисления для построения дискретных аналогов модели [2]. Последовательность операций состоит в следующем. Сначала строится

сумматорный аналог интегрального тождества (12)–(14) и функционалов (15), т. е. вводятся сеточные области D_t^h, S_t^h, Ω_t^h и определяются дискретные аналоги функциональных пространств $Q^h(D_t), Q^{*h}(D_t)$. Затем интегралы аппроксимируются кубатурными формулами, а подынтегральные выражения - соответствующими дискретными представлениями. При этом важно и на дискретном уровне сохранять свойства антисимметрии и симметрии по отношению к компонентам функций $\vec{\varphi}$ и $\vec{\varphi}^*$, заложенные в функционалах тождества (12) и (13). Аппроксимации функционалов (15) должны быть согласованы с аппроксимациями интегрального тождества. Окончательно, дискретные схемы получаются из условий стационарности сумматорных функционалов к вариациям компонентов функций $\vec{\varphi}^*$ и $\vec{\varphi}$ в узлах сеточной области $D_t^h \in D_t$.

Для дискретизации интегрального тождества по времени воспользуемся методом слабой аппроксимации с дробными шагами. Для удобства представления формул перепишем тождество (12), выделяя интегралы по времени

$$I(\vec{\varphi}, \vec{Y}, \vec{\varphi}^*) = \left(B \frac{\partial \vec{\varphi}}{\partial t} + G(\vec{\varphi}, \vec{Y}), \vec{\varphi}^* \right)_{D_t} = \tag{17}$$

$$= \int_0^{\bar{t}} \left\{ 0.5 \left[\left(B \frac{\partial \vec{\varphi}}{\partial t}, \vec{\varphi}^* \right)_D - \left(B \frac{\partial \vec{\varphi}^*}{\partial t}, \vec{\varphi} \right)_D \right] + a(\vec{\varphi}, \vec{Y}, \vec{\varphi}^*) \right\} dt + 0.5(B\vec{\varphi}, \vec{\varphi}^*)_D \Big|_0^{\bar{t}} = 0,$$

где $a(\vec{\varphi}, \vec{Y}, \vec{\varphi}^*) \equiv \int_D \left(G(\vec{\varphi}, \vec{Y}), \vec{\varphi}^* \right) dD$.

Следуя идее метода расщепления, используем представление

$$G(\vec{\varphi}, \vec{Y}) = \sum_{k=1}^r G_k(\vec{\varphi}, \vec{Y}), \quad r \geq 1, \tag{18}$$

и соответственно

$$a(\vec{\varphi}, \vec{Y}, \vec{\varphi}^*) = \sum_{k=1}^r a_k(\vec{\varphi}, \vec{Y}, \vec{\varphi}^*), \quad a_k(\vec{\varphi}, \vec{Y}, \vec{\varphi}^*) = \int_D (G_k(\vec{\varphi}, \vec{Y}), \vec{\varphi}^*) dD. \tag{19}$$

Необходимое требование к выбору представления (18) состоит в том, чтобы антисимметричные пары слагаемых в тождестве (13) не разрывались, т. е. чтобы сохранялось свойство энергетического баланса. При аппроксимации интегралов по пространственной области D , она, при необходимости, разбивается на подобласти. В каждой из таких подобластей аппроксимации строятся формально независимо, но, как для части единого объекта, с соблюдением указанных требований, так чтобы в совокупности получалась единая кубатурная формула по области D . При таком подходе все согласования между частями модели на подобластях происходят автоматически. В силу свойств аддитивности функционалов (12)–(17), при выборе представлений (18), (19) и их дальнейших преобразований, естественно использовать принцип распараллеливания. В этом случае можно автоматически учитывать и контролировать все параллельные ветви алгоритмов уже на уровне обобщенного описания модели.

Основная идея в построении схем расщепления с помощью метода слабой аппроксимации выражается следующим соотношением:

$$\int_{t_j}^{t_{j+1}} a(\vec{\varphi}, \vec{Y}, \vec{\varphi}^*) = \int_{t_j}^{t_{j+1}} \sum_{k=1}^r a_k(\vec{\varphi}, \vec{Y}, \vec{\varphi}^*) \approx \frac{\Delta t}{2} \sum_{k=1}^r \left\{ a_k^{t_j + \frac{(2k+1)\Delta t}{4r}} + a_k^{t_{j+1} - \frac{(2k-1)\Delta t}{4r}} \right\}, \tag{20}$$

остаточный член которого имеет порядок $O(\Delta t^3)$.

Каждое слагаемое в представлении (18), (19) аппроксимируется на отдельном дробном шаге по времени. Для повышения порядка точности дробные шаги берутся симметричными относительно точки $t_{j+1/2}$. Это приводит к двуциклическим симметризованным схемам расщепления [3],[1], [2].

Окончательно, аппроксимируя производные по времени и производя дискретизацию по пространственным переменным, получим сумматорный аналог тождества (17)

$$I^h(\vec{\varphi}, \vec{Y}, \vec{\varphi}^*) = 0.5 \sum_{j=0}^J \left\{ \sum_{k=1}^{2r} \left(\left(B \frac{\partial \vec{\varphi}}{\partial t}, \vec{\varphi}^* \right) - \left(B \frac{\partial \vec{\varphi}^*}{\partial t}, \vec{\varphi} \right) \right)^{j + \frac{2k-1}{4r}} \frac{\Delta t}{2r} \right.$$

$$\left. \sum_{k=1}^r \left[a_k^{t_j + \frac{(2k+1)\Delta t}{4r}} + a_k^{t_{j+1} - \frac{(2k-1)\Delta t}{4r}} \right] \Delta t \right\}^h + 0.5(B\vec{\varphi}, \vec{\varphi}^*)^h \Big|_0^J = 0, \tag{21}$$

аппроксимирующий тождество (12) с точностью $O(\Delta t^2)$. Индекс h обозначает дискретный аналог соответствующих объектов.

Для дальнейших построений удобно переписать тождество (21) в виде:

$$\sum_{j=0}^J \left\{ \sum_{k=1}^{2r} \left(B \frac{\vec{\varphi}^{j+k/2r} - \vec{\varphi}^{j+(k-1)/2r}}{(\Delta t/2r)}, \frac{\vec{\varphi}^{*j+k/2r} + \vec{\varphi}^{*j+(k-1)/2r}}{2} \right)_{D^h} \right. \\ \left. 0.5 \sum_{k=1}^r \left[(G_k^h(\vec{\varphi}, \vec{Y}), \vec{\varphi}^*)_{D^h}^{j+\frac{(2k-1)}{4r}} + (G_k^h(\vec{\varphi}, \vec{Y}), \vec{\varphi}^*)_{D^h}^{j+1-\frac{(2k-1)}{4r}} \right] \Delta t \right\}^h = 0 \quad (22)$$

Численные схемы для модели получаются из условий стационарности сумматорного функционала $I^h(\vec{\varphi}, \vec{Y}, \vec{\varphi}^*)$ и расширенных функционалов $\tilde{\Phi}_k^h(\vec{\varphi})$ к вариациям функций $\vec{\varphi}^*$ и $\vec{\varphi}$ в узлах сетки D_t^h . Для прямой задачи эти условия выражаются с помощью операций

$$\frac{\partial}{\partial \vec{\varphi}^*} I^h(\vec{\varphi}, \vec{Y}, \vec{\varphi}^*) = 0, \quad \vec{\varphi}^* \in Q^{*h}(D_t^h), \quad (23)$$

а для сопряженных задач

$$\frac{\partial}{\partial \vec{\varphi}} \{I^h(\vec{\varphi}, \vec{Y}, \vec{\varphi}^*) + \Phi_k^h(\vec{\varphi})\} = 0, \quad \vec{\varphi} \in Q^h(D_t^h), \quad k = \overline{1, K}. \quad (24)$$

В результате этих преобразований получаются двучиклические схемы расщепления для решения основных и сопряженных задач. Эти схемы согласованы с помощью сумматорных функционалов и обладают свойством энергетической сбалансированности, заложенной в определении интегрального тождества (12).

Таким образом, вариационный принцип предоставляет удобный формализм для построения дискретных моделей с заданными свойствами и алгоритмов их реализации, согласованных на всех этапах технологии моделирования.

Список литературы

- [1] Марчук Г. И. Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1977.
- [2] Пененко В. В. Методы численного моделирования атмосферных процессов. Л.: Гидрометеоздат, 1981.
- [3] Самарский А. А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1977.
- [4] Яненко Н. Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. Новосибирск: Наука, 1967.