



**ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА
И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ**

Труды международной конференции

Том I

МОСКВА 2000

Российская академия наук
Институт вычислительной математики

**ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА
И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ**

Труды международной конференции,
посвященной 75-летию академика Г. И. Марчука
и 20-летию Института вычислительной математики

Под редакцией
академика В.П. Дымникова

Том I

Москва, 19–22 июня 2000 г.

УДК 519.6

*Издание поддержано
грантом РФФИ №00-01-1023*

Вычислительная математика и математическое моделирование: Труды международной конференции. Том I/ Под ред. В.П. Дымникова. — М.: Институт вычислительной математики РАН, 2000. — 256 с.

Настоящий сборник содержит тексты докладов, представленных на юбилейной конференции "Вычислительная математика и математическое моделирование", посвященной 75-летию академика Г.И. Марчука и 20-летию Института вычислительной математики РАН.

Тематика представленных докладов связана с научными направлениями, в которых Г.И. Марчуком были получены выдающиеся результаты. Это – методы расчета ядерных реакторов, вычислительная математика, модели и методы в задачах физики атмосферы и океана, математические модели иммунных процессов, проблемы окружающей среды, параллельные вычисления и архитектура ЭВМ. Большая часть докладов, представленных в первом томе, носит обзорный характер.

Для специалистов в области вычислительной математики и математического моделирования широкого профиля, а также студентов и аспирантов соответствующих специальностей.

This collection of works contains the reports presented to the Jubilee Conference "Numerical Mathematics and Mathematical Modeling" dedicated to the seventy fifth birthday of Academician G.I. Marchuk and to the twentieth anniversary of the Institute of Numerical Mathematics.

Themes of the reports presented are associated with the scientific directions, in which G.I. Marchuk achieved the most outstanding results: the methods for calculating nuclear reactors, numerical mathematics, models and methods in the physics of the atmosphere and ocean, mathematical models of immune processes, problems of environment protection, parallel computations and the architecture of computers. Most of reports presented in the main, the first volume of the conference proceedings, are of a review character.

The conference proceedings are certainly interesting to the specialists in numerical mathematics and mathematical modeling and also to the students and postgraduate students of related specialization.

The publication is supported by the Russian Foundation for Basic Research, project №00-01-10023

ISBN 5-201-08806-6

© Институт вычислительной математики РАН, 2000.

К 75-летию академика Г.И. Марчука

8 июня 2000 года исполняется 75 лет выдающемуся ученому и организатору науки академику РАН Гурию Ивановичу Марчуку. В этом же году исполняется 20 лет Институту вычислительной математики Российской академии наук, основателем и бессменным директором которого в течение этих лет был Гурий Иванович.

Основная научная деятельность академика Г.И. Марчука связана с шестью направлениями. В каждом из этих направлений Гурием Ивановичем получены выдающиеся результаты.

Гурий Иванович Марчук – один из основоположников создания численных методов расчета ядерных реакторов. За работы в этой области ему в 1961 году была присуждена Ленинская премия.

Широко известны результаты, полученные Гурием Ивановичем по методам построения балансных разностных схем, теории методов расщепления для нестационарных задач, теории сопряженных уравнений, методам Монте-Карло и многие другие. За цикл работ по развитию и применению методов статистического моделирования для решения многомерных задач теории переноса излучения ему в 1979 г. была присуждена Государственная премия.

Результаты, полученные Г.И. Марчуком в области численных методов решения задач прогноза погоды и общей циркуляции атмосферы, в настоящее время уже стали классическими. Он сформулировал также методы решения полных уравнений термогидродинамики океана, в основе которых лежат методы расщепления и выполнение основных законов сохранения. За цикл работ в области гидродинамических методов прогноза погоды в 1975 г. он был удостоен премии им. А.А. Фридмана

АН СССР.

Г.И. Марчук является основателем нового направления в математическом моделировании – создания математических моделей иммунного ответа на вирусные инфекции. За создание новых методов математического моделирования в 1981 году ему была присуждена золотая медаль и премия им. М.В. Келдыша.

В области математического моделирования процессов окружающей среды Г.И. Марчуком были сформулированы методы решения целого ряда оптимизационных задач, в частности задачи о допустимой области размещения промышленных предприятий. За работы в области моделирования окружающей среды ему в 1988 году была присуждена премия им. А.П. Карпинского.

Понимая, что параллельные вычисления – это будущее вычислительной техники и, следовательно, центральная проблема при построении вычислительных алгоритмов, Г.И. Марчук сделал это направление приоритетным при организации Института вычислительной математики.

Связующим звеном этих разных научных направлений являются методы расщепления и теория сопряженных уравнений. Эта методология – ключевой момент в работах Г.И. Марчука, связанных с математическим моделированием казалось бы совершенно разных объектов – ядерных реакторов, атмосферы и океана, иммунной системы живых организмов, сложных экологических систем. Поскольку сопряженные уравнения являются ключевым аппаратом также и при разработке теории и алгоритмов решения задач о чувствительности глобальных систем к внешним воздействиям и задач управления этими системами, можно смело сказать, что у этого научного направления большое будущее.

Настоящий сборник содержит тексты докладов, которые были сделаны российскими и иностранными учеными на юбилейной конференции ”Вычислительная математика и математическое моделирование”, посвященной 75-летию Г.И. Марчука и 20-летию возглавляемого им института.

Методы расчета ядерных реакторов

Ядерная энергетика и математика ¹

В. С. Владимирова, В. И. Лебедев*

Математический институт им. В.А. Стеклова РАН
*РНЦ "Курчатовский институт",
Институт вычислительной математики РАН

Дается обзор первых в нашей стране работ по теории и методам расчета ядерных реакторов, разработанных Г.И. Марчуком и его школой. Обсуждаются некоторые аспекты влияния этих методов на последующее развитие математики: новых вычислительных методов, роль и использование сопряженных уравнений как для линейных, так и нелинейных задач, применение многочленов, наименее отклоняющихся от нуля со связями, к оптимизации вычислительных алгоритмов. Мы рассматриваем линейное уравнение переноса как источник новых задач классической математической физики и вычислительной математики.

1. ВВЕДЕНИЕ

Около полувека тому назад перед нашей страной возникла проблема мирного использования энергии атома. Математикам предстояло решить новые математические задачи, описывающие процессы переноса нейтронов и тепла в веществе, выполнить невиданный до того времени объём вычислительной работы. Известно, что каждая новая важная область прикладной физики вызывает к жизни новые концепции в математике, и своими глубокими достижениями она обязана строгим математическим исследованиям этих концепций. Задачи теории переноса частиц, будучи существенно многомерными, достаточно сложными и актуальными, представляют собой достойный пример исследования с точки зрения основных проблем вычислительной математики, да и математики в целом. Своеобразие и важность этих задач повлияло и будет влиять на развитие основных концепций и методов вычислительной математики и на прогресс вычислительной техники. Вычислительные задачи по расчёту ядерных реакторов оказались даже более сложными и трудоёмкими по сравнению с аналогичными

¹Работа выполнена частично при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 00-15-96073, № 96-01-00141).

задачами по ядерному оружию, работы над которыми развернулись несколько лет ранее.

На ранних этапах исследований, когда ещё не было ЭВМ, вычислительные работы проводилась вручную на электромеханических машинах типа Mercedes. Это обстоятельство предъявляло особые требования к вычислительным методам и схемам: они должны быть достаточно экономичными и устойчивыми, по возможности простыми и точными, что, в свою очередь, требовало надлежащей изобретательности и привлечения довольно "высокой" математики.

Работа осложнялась и тем, что в то время наши вузы только начинали готовить специалистов в области атомной энергетики, в частности по теоретическим и вычислительным аспектам ядерных реакторов. Работа и обучение проводились специалистами из других областей науки и техники ("чистыми" математиками, механиками, метеорологами, геофизиками, геодезистами и т.п.), которым на ходу приходилось перестраиваться и переучиваться. Не случайно, что в это время С.Л. Соболев – первый заместитель И.В. Курчатова по Институту атомной энергии – организывает первую в Советском Союзе кафедру вычислительной математики на механико-математическом факультете МГУ.

Методы расчета ядерных систем возникли как синтез исследований многих учёных – математиков и физиков – и институтов как в теоретических, так и в прикладных аспектах. Гурий Иванович Марчук в короткий срок набирает сильный коллектив математиков, физиков и вычислителей, по крупицам кропотливо собирает лучшие и оригинальные достижения в математике², могущие найти применения в исследованиях и расчётах ядерных систем, и, не останавливаясь перед трудностями, создаёт пакет оригинальных математических методов и программ, организует серийные расчёты различных типов ядерных реакторов и защиты от излучений, ориентированных на начальном этапе на ручной счёт, а в дальнейшем – на всё более мощные ЭВМ.

Первое публичное выступление Г.И. Марчука о приближённых методах расчёта ядерных реакторов относится к июню 1955 г. на сессии Академии наук СССР по мирному использованию атомной энергии [1]. Через два года он защищает докторскую диссертацию по той же проблеме. В 1958 году он выпускает известную монографию "Численные методы расчёта ядерных реакторов" [2], а через три года – её усовершенствованный и дополненный вариант [3]. Последняя монография стала настольной книгой многих исследователей, занимающихся ядерной энергетикой как в нашей стране, так и за рубежом. Подводит итог исследованиям монография Г.И. Марчука и В.И. Лебедева "Численные методы в теории переноса нейтронов", вышедшая десять лет спустя [4] (1971 г.) и двадцать лет спустя [4] (1981 г.)

Многогрупповые расчёты ядерного реактора для первой в мире АЭС в г. Обнинске, запущенной 27 июня 1954 г., были успешно выполнены коллективом сотрудников под руководством Г.И. Марчука. За работы по методам расчёта ядерных реакторов и их применениям к разработке АЭС и ядерного подводного флота Г.И. Марчук был удостоен Ленинской премии (1961 г.).

С введением в эксплуатацию в 1964 г. Нововоронежской АЭС на реакто-

²Как говорил Н.Н. Боголюбов, "... каждая верёвочка шла в дело".

рах ВВЭР настал новый "взрослый" этап в развитии вычислительных задач. В 1973 г. под Ленинградом был введён в эксплуатацию первый энергетический блок реакторов РБМК. Физические обоснования этих реакторов с сопровождающим его комплексом физико-технических проблем, а также вычислительной работы были в основном выполнены коллективом сотрудников ИАЭ. Одним из авторов (В.И. Лебедевым) была создана первая двухгрупповая двумерная программа для расчёта регулирующих стержней, которая впоследствии широко использовалась при проектировании реакторов ВВЭР.

В этой работе авторы не стремились дать исчерпывающий обзор всех результатов и достижений математических и вычислительных методов в теории переноса. Они попытались лишь сформулировать свою точку зрения только по тем вопросам этой необъятной области исследований, которые находились в сфере интересов и внимания школы Г.И. Марчука. Авторы хотели показать, что эта тема и на сегодняшний день далека от своего завершения и является неисчерпаемым источником новых математических идей.

2. КРАЕВЫЕ ЗАДАЧИ ТЕОРИИ ЯДЕРНЫХ РЕАКТОРОВ

В качестве математической модели ядерного реактора принимается система интегро-дифференциальных уравнений переноса нейтронов (линеаризованное уравнение Больцмана) с учётом их замедления и термализации на завершающем этапе. Нестационарное уравнение переноса для плотности нейтронов $N(x, \Omega, v, t)$ в фазовой области $G \times S^2 \times \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+$ переменных (x, Ω, v, t) имеет вид [2–4, 37]

$$\frac{dN}{dt} + v\sigma(x, v)N = \int_0^\infty \int_{S^2} W(x, \mu_0, v, v')v'N(x, \Omega', v', t)d\Omega'dv' + q \quad (2.1)$$

с граничным условием на внешней границе S среды G

$$N|_S = 0, \quad (n_x, \Omega) < 0, \quad x \in S, \quad (2.2)$$

выражающим отсутствие падающих нейтронов извне на S , и начальным условием

$$N|_{t=0} = N_0(x, \Omega, v). \quad (2.3)$$

Здесь $\frac{dN}{dt}$ – полная производная по времени от плотности нейтронов:

$$\frac{dN}{dt} = \frac{\partial N}{\partial t} + v(\Omega, \nabla)N, \quad (2.4)$$

S^2 – единичная сфера в \mathbb{R}^3 , n_x – внешняя нормаль в точке x к поверхности S , $\mu_0(\Omega, \Omega')$, q – источник нейтронов.

Уравнение (2.1) сопровождается дополнительными дифференциальными уравнениями, описывающими распространение, влияние запаздывающих нейтронов, гидродинамические эффекты и т.п. Наконец, поскольку свойства среды под воздействием излучения могут меняться, то коэффициенты уравнения будут зависеть от решения. Для простоты будем считать, что результат этих дополнительных воздействий учитывается в источнике q .

Формулы (2.1) и (2.4) показывают, что характеристиками уравнения являются при любых $x_0 \in G$, Ω и v прямые

$$x = x_0 + \Omega vt. \quad (2.5)$$

Таким образом, мы видим, что уравнение (2.1) есть своеобразное интегродифференциальное уравнение, определённое в 7-мерном фазовом пространстве переменных (x, Ω, v, t) . В полном объёме решение таких уравнений с сопровождающими их дополнительными системами уравнений не под силу даже современным ЭВМ. Поэтому, естественно, математические исследования исторически развернулись вокруг более простых, нежели (2.1), типов уравнений. Их можно разбить на две группы: стационарные и нестационарные.

Решения стационарных уравнений определяют так называемые критические состояния реактора, когда наименьшее собственное значение оператора переноса (при наличии деления) равно нулю. Опишем стационарные задачи. Пусть $\varphi = vN$ – поток нейтронов, тогда в переменных (x, Ω, v) из (2.1) получаем уравнение

$$(\Omega, \nabla)\varphi + \sigma(x, v)\varphi = \int_0^\infty \int_{S^2} W(x, \mu_0, v, v')\varphi(x, \Omega', v')d\Omega' dv' + q \quad (2.6)$$

с граничным условием (2.2) на внешней границе S среды G

$$\varphi|_S = 0, \quad (n_x, \Omega) < 0, x \in S. \quad (2.7)$$

Сопряжённая задача к задаче (2.6)–(2.7) имеет вид

$$-(\Omega, \nabla)\psi + \sigma(x, v)\psi = \int_0^\infty \int_{S^2} W(x, \mu_0, v', v)\psi(x, \Omega', v')dv' d\Omega' + p, \quad (2.6^*)$$

$$\psi|_S = 0, \quad (n_x, \Omega) > 0, x \in S. \quad (2.7^*)$$

Сопряжённая система уравнений реактора широко использовалась Г.И. Марчуком и его школой ещё на ранних стадиях построения теории и методов расчёта ядерных реакторов [2, 3, 5]. Отметим некоторые из важных её приложений.

Теория возмущений спектрального параметра λ – первого собственного значения соответствующей однородной задачи. Величина λ и его возмущение $\delta\lambda$ связаны с критической массой самоподдерживающейся цепной реакции. Полученные формулы (в абстрактной форме – это формулы типа (3.12)) играют важную роль в оценке первого собственного значения по отношению к тем или иным вариациям входных данных, необходимых для физического расчёта ядерного реактора. Эти исследования послужили основой решения важнейших обратных задач по восстановлению физических параметров моделей.

Сюда относится также разработка систем ядерной безопасности с помощью наиболее точных расчётов критических масс ядерных систем различных спектров, подкреплённых экспериментальными данными. Последние работы инициировались И.В. Курчатовым, и их выполнение было высоко оценено самим Игорем Васильевичем (январь 1960 г.).

Многогрупповые методы расчёта ядерных реакторов пришли на смену двухгрупповым, когда весь спектр нейтронов объединялся в две группы: замедляющихся и термализованных. Математически многогрупповая задача (2.1)–(2.2), соответствующая замедляющимся нейтронам, сводится к системе интегродифференциальных уравнений следующего вида:

для плотности

$$\frac{\partial N_k}{\partial t} + v_k((\Omega, \nabla)N_n + \sigma_k N_k) = \sum_i \Delta v_i \int_{S^2} W^{k,i}(x, \mu_0) v_i N_i(x, \Omega') d\Omega' + q, \quad (2.8)$$

для потока

$$\frac{1}{v_k} \frac{\partial \varphi_k}{\partial t} + (\Omega, \nabla) \varphi_k + \sigma_k \varphi_k = \sum_i \Delta v_i \int_{S^2} W^{k,i}(x, \mu_0) \varphi_i(x, \Omega') d\Omega' + q, \quad (2.9)$$

$k = 1, 2, \dots, m$, с начальными условиями вида (2.3) и граничными условиями вида (2.2), (2.7). Аналогично выписывается стационарная и сопряжённая задачи. Уравнения (2.9) можно трактовать как уравнения с малым параметром при частной производной по времени.

Многогрупповые расчёты потребовали знания необходимой информации о сечениях ядерных реакций: константах σ_k и $W_l^{k,i}$ в различных зонах реактора. (Здесь $W_l^{k,i}$, $l = 0, 1, \dots$ – коэффициенты разложения функции $\Delta v_i W^{k,i}(x, \mu_0)$ по полиномам Лежандра.)

Разработанная теория сопряжённых уравнений позволила дать точную и приближённые формулировки усреднений ядерно-физических констант по группам и по зонам через дробно-линейные функционалы. Эти работы обеспечили существенный прогресс в методах расчёта ядерных реакторов различных спектров – ”быстрых”, ”промежуточных” и ”тепловых”, позволили повысить точность расчётов, и они широко вошли в практику.

Одногрупповое уравнение переноса с изотропным рассеянием. В этом случае построена строгая математическая теория обобщённых решений и сформулированы вариационные принципы, что позволяет обосновывать численные методы решений [15, 16]. Пусть

$$L\varphi = (\Omega, \nabla)\varphi + \sigma(x)\varphi, \quad (2.10)$$

$$\varphi_0 = S\varphi = \frac{1}{4\pi} \int_{S^2} \varphi(x, \Omega') d\Omega'. \quad (2.11)$$

Тогда одногрупповое уравнение (2.6) примет вид

$$L\varphi = \beta(x)S\varphi + q. \quad (2.12)$$

Любая прямая вида $x = x_0 + \Omega\xi$, $x_0 \in G$ является характеристикой этого уравнения, вдоль которой уравнение принимает вид

$$\frac{d\varphi}{d\xi} + \sigma(x)\varphi = \beta(x)S\varphi + q. \quad (2.13)$$

Если ввести функцию

$$u(x, \Omega) = \frac{1}{2}[\varphi(x, \Omega) + \varphi(x, -\Omega)], \quad (2.14)$$

то при $\sigma(x) \neq 0$ и $q(x, \Omega) = q(x, -\Omega)$ она будет удовлетворять уравнению в самосопряжённой форме [16]

$$-[l(x)(\Omega, \nabla)]^2 u + u = c(x)Su + \frac{q}{\sigma} \quad (2.15)$$

с краевым условием на S :

$$u - l(\Omega, \nabla)u|_S = 0, \quad (2.16)$$

где $l(x) = \sigma^{-1}(x)$, $c(x) = \beta(x)/\sigma(x) \leq 1$. Краевая задача (2.15)–(2.16) вдоль характеристики $x_0 + \Omega\xi$ примет вид

$$-\left(l\frac{d}{d\xi}\right)^2 u + u = c(x)Su + \frac{q}{\sigma}, \quad (2.17)$$

$$u - l\frac{du}{d\xi}\Big|_{\xi=\xi_1} = 0, x_1 = x_0 + \Omega\xi_1 \in S, (n_{x_1}, \Omega) < 0, \quad (2.18)$$

$$u + l\frac{du}{d\xi}\Big|_{\xi=\xi_2} = 0, x_2 = x_0 + \Omega\xi_2 \in S, (n_{x_2}, \Omega) > 0. \quad (2.19)$$

Если ввести скалярные произведения по формулам

$$\langle u, v \rangle = \int_G \int_{S^2} \sigma u v dxd\Omega,$$

$$[u, v] = \int_S \int_{S^2} |(\Omega, n)| u v d\Omega ds + \langle l(\Omega, \nabla)u, (\Omega, \nabla)v \rangle + \langle u, v \rangle \quad (2.20)$$

и норму

$$[u] = [u, u]^{1/2},$$

то функция u , реализующая минимум функционала

$$G(v) = [v]^2 - \langle cSv, v \rangle - 2 \langle v, q/\sigma \rangle, \quad (2.21)$$

будет решением задачи (2.15)–(2.16) [16].

Теперь сформулируем основные спектральные задачи для одногруппового уравнения, считая, что источник Q имеет вид

$$q = \sigma\nu\Sigma_f S\varphi. \quad (2.22)$$

При краевом условии (2.7) требуется найти первое собственное значение λ_1 уравнения

$$-L\varphi + \beta(x)S\varphi + \nu\Sigma_f S\varphi = \lambda\varphi. \quad (2.23)$$

При критическом состоянии $\lambda_1 = 0$. Для условно-критических задач требуется найти такое k_{ef} , чтобы

$$-L\varphi + \beta(x)S\varphi + \frac{1}{k_{ef}}\nu\Sigma\varphi = 0. \quad (2.24)$$

Простейшей системой одногруппового уравнения переноса с запаздывающими нейтронами является система уравнений

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + L\varphi = \beta(x)S\varphi + \lambda C + (1 - \bar{\beta})\nu\Sigma_f S\varphi, \quad (2.25)$$

$$\frac{dC}{dt} = -\lambda C + \bar{\beta}\nu\Sigma_f S\varphi,$$

где $C = C(x, t)$, $\lambda > 0$. Этим уравнениям соответствует уравнение на собственные значения

$$-L\varphi + \beta(x)S\varphi + \lambda C + (1 - \bar{\beta})\nu\Sigma_f S\varphi = \frac{1}{v}\gamma\varphi, \quad (2.26)$$

$$-\lambda C + \bar{\beta}\nu\Sigma_f S\varphi = \gamma C.$$

Исключая из этих уравнений C , получим обобщенную задачу на собственные значения для пучка операторов. Задачи (2.23), (2.24), (2.26) рассматриваются при краевом условии (2.7). Спектр задачи (2.26), (2.7) имеет следующую структуру на плоскости комплексного переменного γ : он состоит из дискретного спектра, среди которого имеется простое ведущее вещественное собственное значение и подпоследовательность, имеющая предельной точкой величину $\gamma = -\lambda$, а вся полуплоскость $\text{Re}\gamma \leq -C_0$ для некоторого $C_0 > 0$ является точками непрерывного спектра [40].

Даже на сегодня при наличии высокопроизводительных ЭВМ задачи для сформулированных выше уравнений остаются сложными для серийных "инженерных" расчётов. Их заменяют упрощёнными моделями, простейшей из которых является так называемое *диффузионное приближение*, в котором аппроксимация для нулевого момента $\varphi_0 = S\varphi$, применительно, например, к краевой задаче (2.12), (2.7), находится как решение краевой задачи для диффузионного уравнения

$$-\text{div}D\nabla\varphi_0 + \alpha(x)\varphi_0 = q_0, \quad (2.27)$$

$$\varphi_0 + 2D \frac{\partial \varphi_0}{\partial n} \Big|_S = 0, \quad (2.28)$$

где $D = 1/3\sigma(x)$, $\alpha(x) = \sigma(x) - \beta(x)$, $q_0 = Sq$.

Проблема защиты от излучений. Развитие ядерной энергетики поставило вопрос о расчётах излучений, выходящих из реактора. В этом случае необходимо было решать неоднородную задачу переноса нейтронного и γ -излучения, источником которых в основном является активная зона реактора, т.е. зона деления ядер и зона поглощения нейтронов неделяющимися ядрами с последующим испусканием нейтронов или γ -квантов. Требовалось вычислить серию линейных функционалов

$$I_p(\varphi_k) = \langle \varphi_k, p \rangle \quad (2.29)$$

от решений φ_k неоднородной задачи (2.6)-(2.7) при $q = q_k$, представляющую собой скалярное произведение функции измерения p поля излучения и решения φ_k . С помощью решения ψ_p сопряжённой задачи (2.6*) – (2.7*)³ удалось получить [5] новую формулу для функционалов

$$I_p(\varphi_k) = \langle q_k, \psi_p \rangle, k = 1, 2, \dots, m, \quad (2.30)$$

как скалярное произведение источника излучения q_k и решения ψ_p и его вариации

$$\delta I_p(\varphi_k) = - \langle (\delta L)\varphi_k, \psi_p \rangle, k = 1, 2, \dots, m \quad (2.31)$$

(в абстрактной форме – это формулы (3.7) и (3.10)). Эти формулы позволили по-другому сформулировать проблему защиты от излучений на основе функции ценности нейтронов ψ_p , а также поставить ряд важных оптимизационных задач. В самом деле, при таком подходе достаточно один раз определить функцию ψ_p , как решение сопряжённого уравнения, а затем вычислять $I_p(\varphi_k)$ непосредственно по формуле (2.30), не решая задачу (2.6)-(2.7).

*

* *

Математическая теория ядерных реакторов позволила расширить класс канонических уравнений классической математической физики. К трём типам основных уравнений:

$$\epsilon \frac{\partial \varphi}{\partial t} = a^2 \Delta \varphi + V(x)\varphi + f(x, t) \quad (2.32)$$

– уравнение теплопроводности (при $\epsilon = 1$), уравнение Шрёдингера (при $\epsilon = i$) (параболический тип),

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = a^2 \Delta \varphi + b(x)\varphi + f(x, t) \quad (2.33)$$

– волновое уравнение (гиперболический тип), и

$$-\Delta \varphi + \sigma(x)\varphi = f(x) \quad (2.34)$$

– уравнение Пуассона (эллиптический тип) – следует прибавить четвёртый тип уравнений – односкоростное уравнение переноса с изотропным рассеянием

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + (\Omega, \nabla)\varphi + \sigma(x)\varphi = \frac{\lambda}{4\pi} \beta(x) \int_{S^2} \varphi(x, \Omega') d\Omega' + f(x, t, \Omega) \quad (2.35)$$

в области $G \times (0, T) \times S^2$ фазового пространства $\mathbb{R}^4 \times S^2$ переменных (x, t, Ω) . Типичное граничное условие для уравнения (2.35) в выпуклой области G с границей S есть (ср.(2.2))

$$\varphi|_S = 0, \quad (\Omega, n_x) < 0, x \in S. \quad (2.36)$$

³Эта функция называется функцией ценности нейтронов.

Уравнение (2.35) наследует черты как параболического уравнения (2.32), так и гиперболического уравнения (2.33), а соответствующее стационарное уравнение

$$(\Omega, \nabla)\varphi + \sigma(x)\varphi = \frac{\lambda}{4\pi}\beta(x) \int_{S^2} \varphi(x, \Omega')d\Omega' + f(x, \Omega) \quad (2.37)$$

– черты эллиптического уравнения (2.34). Отметим, что задача на собственные значения для однородного уравнения (2.37) с граничным условием (2.36) эквивалентна интегральному уравнению Пайерлса [4, 37]

$$\varphi_0(x) = \lambda \int_G \beta(y) \exp\left(-\int_y^x \sigma(s)ds\right) \frac{\varphi_0(y)}{|x-y|^2} dy \quad (2.38)$$

относительно средней плотности $\varphi_0 = S\varphi$. В (2.38)

$$\int_y^x \sigma(s)ds = \int_0^1 \sigma[ty + (1-t)x]dt.$$

Как видно из (2.38), ядро интегрального уравнения Пайерлса имеет полярную особенность вида $|x-y|^{-2}$ на диагонали $x=y$, в то время как функция Грина для уравнения Лапласа имеет слабополярную особенность вида $|x-y|^{-1}$. Это обстоятельство существенно затрудняет применение численных методов непосредственно к уравнению (2.38).

Особенности решения уравнения переноса. Для повышения точности методов расчёта сферическисимметричных задач были исследованы особенности производных решения стационарного уравнения переноса (2.37)

$$\mu \frac{\partial \varphi}{\partial r} + \frac{1-\mu^2}{r} \frac{\partial \varphi}{\partial \mu} + \sigma(r)\varphi = Q(r) \quad (2.39)$$

с граничным условием (2.36)

$$\varphi(\mu, R) = 0, \quad -1 \leq \mu \leq 0 \quad (2.40)$$

как в окрестности раздела $r=r_0$ двух сред, так и в окрестности характеристики $r_0^2 - r^2(1-\mu^2) = 0$, проходящей через границу раздела $r=r_0$ двух сред.

В результате получена следующая картина. В области $r < r_0$, $|\mu| \leq 1$:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial r} = -\frac{rM(r_0)}{\sqrt{r_0^2 - r^2(1-\mu^2)}} + O(|\ln |\mu||), \quad (2.41)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \mu} = \frac{r^2 \mu M(r_0)}{\sqrt{r_0^2 - r^2(1-\mu^2)}} + O(1); \quad (2.42)$$

в области $r > r_0$, $\mu < \sqrt{1 - (r_0/r)^2}$:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial r} = O(|\ln |\mu||), \quad (2.43)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \mu} = O(1); \quad (2.44)$$

в области $r > r_0, \mu > \sqrt{1 - (r_0/r)^2}$:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial r} = -\frac{2rM(r_0)}{\sqrt{r_0^2 - r^2(1 - \mu^2)}} + O(|\ln |\mu||), \quad (2.45)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \mu} = \frac{2r^2\mu M(r_0)}{\sqrt{r_0^2 - r^2(1 - \mu^2)}} + O(1), \quad (2.46)$$

здесь $M(r_0) = \varphi(r_0, 0)[\alpha](r_0) - [Q](r_0), [f](r_0) = f(r_0 + 0) - f(r_0 - 0)$.

Из формул (2.41)–(2.46) следует для средней плотности $\varphi_0(r)$ такая асимптотика:

$$\varphi_0(r) \sim \frac{1}{2}M(r_0) \ln |r - r_0| + O(1), \quad r \rightarrow r_0. \quad (2.47)$$

Эти результаты были получены в 1952 и опубликованы в [17] (1968). Подробности см. Т.А. Гермогенова [39]. Формула (2.47) другим методом была получена Н.А. Дмитриевым в 1949 году.

Подробная теория односкоростного уравнения переноса развита в монографии В.С. Владимирова [16], а относящиеся к нему численные методы – в статье [15].

3. МЕТОД СОПРЯЖЁННЫХ УРАВНЕНИЙ

Сперва кратко изложим абстрактный метод сопряжённых уравнений в линейном случае, следуя конкретной схеме, которая использовалась Г.И. Марчук и его учениками в теории ядерных реакторов[2-5].

Пусть \mathcal{H} – вещественное или комплексное гильбертово пространство со скалярным произведением $\langle \varphi, \psi \rangle$ и нормой $\|\varphi\| = \langle \varphi, \varphi \rangle^{1/2}$. Пусть задан линейный оператор L с областью определения⁴ $\mathcal{D}(L)$, плотной в \mathcal{H} . Рассмотрим неоднородное уравнение

$$L\varphi = q, \quad \varphi \in \mathcal{D}(L) \quad (3.1)$$

с правой частью $q \in \mathcal{H}$.

Сопряжённый оператор L^* к оператору L вводится на основе равенства

$$\langle L\varphi, \psi \rangle = \langle \varphi, L^*\psi \rangle, \quad \varphi \in \mathcal{D}(L), \psi \in \mathcal{D}(L^*). \quad (3.2)$$

Равенство (3.2) нужно понимать следующим образом. Пусть элемент $\psi \in \mathcal{H}$ таков, что форма $\varphi \in \langle L\varphi, \psi \rangle$ определяет линейный непрерывный функционал в \mathcal{H} . Тогда по теореме Рисса существует (и единственный) элемент $g \in \mathcal{H}$ такой, что

$$\langle L\varphi, \psi \rangle = \langle \varphi, g \rangle, \quad \varphi \in \mathcal{H}. \quad (3.3)$$

⁴Как в линейном, так и в нелинейном случае это может быть дифференциальный, интегральный, интегро-дифференциальный или даже псевдодифференциальный оператор, заданный в области G фазовых переменных $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ с граничными условиями, включёнными в определение области $\mathcal{D}(L)$. В качестве \mathcal{H} может быть $\mathcal{L}_2(G)$.

Элемент g назовём значением сопряжённого оператора L^* на элементе ψ , $L^*\psi = g$, а элемент ψ отнесём к области определения $\mathcal{D}(L^*)$ оператора L^* , так что равенство (3.3) есть не что иное, как равенство (3.2).

Оператор L называется *замкнутым*, если его график $\{(\varphi, L\varphi), \varphi \in \mathcal{D}(L)\}$ замкнут в $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$, т.е. из $\varphi_k \rightarrow \varphi$ и $L\varphi_k \rightarrow \psi$, $k \rightarrow \infty$ в \mathcal{H} следует, что $\varphi \in \mathcal{D}(L)$ и $L\varphi = \psi$.

Замыканием \bar{L} оператора L называется наименьшее замкнутое расширение L .

Оператор L^ замкнут. Оператор L допускает замыкание тогда и только тогда, когда $\mathcal{D}(L^*)$ плотна в \mathcal{H} . Если $\mathcal{D}(L^*)$ плотна в \mathcal{H} , то справедливы равенства*

$$\bar{L} = L^{**}, \quad \bar{L}^* = L^*. \quad (3.4)$$

Рассмотрим задачу о вычислении линейного функционала от решения φ уравнения (3.1)

$$I_p(\varphi) = \langle \varphi, p \rangle, \quad p \in \mathcal{H}. \quad (3.5)$$

Для этого введём неоднородное уравнение, сопряжённое к уравнению (3.1)

$$L^*\psi_p = p, \quad \psi_p \in \mathcal{D}(L^*). \quad (3.6)$$

Предположим, что его решение ψ_p существует и единственно в классе $\mathcal{D}(L^*)$; ψ называется *сопряжённой* функцией. Из (3.6), (3.5) и (3.2) для искомого функционала $I_p(\varphi)$ немедленно следует равенство

$$I_p(\varphi) = \langle \varphi, \psi_p \rangle. \quad (3.7)$$

Предположим теперь, что оператор L обладает (обобщённым) решением φ из \mathcal{H} уравнения

$$L\varphi = \delta(X - X_0), \quad (3.8)$$

где $\delta(X - X_0)$ – дельта-функция Дирака, сосредоточенная в точке X_0 . Пусть это решение непрерывно в окрестности точки X_0 . Тогда формула (3.7) принимает вид

$$I_p(\varphi) = \psi_p(X_0). \quad (3.9)$$

Аналогичные рассуждения применимы и для теории возмущений.

Если оператор L возмущён оператором δL , то возмущение функционала $I_p(\varphi)$ выражается через сопряжённую функцию ψ_p формулой

$$\delta I_p(\varphi) = - \langle \psi_p, (\delta L)\varphi \rangle. \quad (3.10)$$

Возмущение $\delta\lambda$ первого собственного значения⁵ λ также выражается через сопряжённую собственную функцию ψ ,

$$L^*\psi = \lambda\psi, \quad \psi \in \mathcal{D}(L^*). \quad (3.11)$$

⁵В случае ядерного реактора оно положительное и простое.

Оно равно

$$\delta\lambda = \frac{\langle (\delta L)\varphi, \psi \rangle}{\langle \varphi, \psi \rangle}. \quad (3.12)$$

Изложим абстрактный подход к методу сопряжённых уравнений в нелинейном случае, следуя работам Г.И. Марчука и его учеников (см. [6–10]) и М.М. Вайнберга ([38]) с учётом нового (однозначного) определения сопряжённого оператора, представленного в работе [18] В.С. Владимирова и Г.И. Марчука.

Пусть \mathcal{D} – линейное множество, плотное в гильбертовом пространстве \mathcal{H} , и каждому элементу $\varphi \in \mathcal{D}$ соответствует множество линейных операторов в \mathcal{H} ,

$$\{\psi \rightarrow A_\varphi \psi, \quad \psi \in \mathcal{D}(A_\varphi)\} \quad (3.13)$$

с областью определения $\mathcal{D}(A_\varphi)$, содержащей \mathcal{D} . Пусть, далее, $\mathcal{D}(A_\varphi^*)$ также содержит \mathcal{D} , так что $\mathcal{D}(A_\varphi)$ и $\mathcal{D}(A_\varphi^*)$ плотны в \mathcal{H} . Введём (нелинейные) операторы

$$\varphi \rightarrow A_\varphi^* \varphi = A_\varphi^* \psi|_{\psi=\varphi}, \quad \varphi \in \mathcal{D}, \quad (3.14)$$

с областью определения \mathcal{D} .

Определение 1 [18]. Назовём множества линейных операторов $\{A_\varphi, \varphi \in \mathcal{D}\}$ и $\{B_\varphi, \varphi \in \mathcal{D}\}$ эквивалентными, $A_\varphi \sim B_\varphi$, если выполнено равенство

$$A_\varphi^* \varphi = B_\varphi^* \varphi, \quad \varphi \in \mathcal{D}. \quad (3.15)$$

Введённая эквивалентность обладает свойствами: *рефлексивности* $A_\varphi \sim A_\varphi$, *симметричности* $B_\varphi \sim A_\varphi$, если $A_\varphi \sim B_\varphi$, *транзитивности* $A_\varphi \sim C_\varphi$, если $A_\varphi \sim B_\varphi$ и $B_\varphi \sim C_\varphi$. Поэтому множества линейных операторов вида (4.1) распадаются на непересекающиеся классы эквивалентности.

Пример 1. Множества линейных операторов

$$\{\psi \rightarrow \varphi' \psi, \varphi \in \mathcal{D}\}, \quad \{\psi \rightarrow -(\varphi \psi)', \varphi \in \mathcal{D}\}, \quad \{\psi \rightarrow -\frac{\varphi}{2} \psi', \varphi \in \mathcal{D}\}$$

эквивалентны,

$$\varphi' \psi \sim -(\varphi \psi)' \sim -\frac{\varphi}{2} \psi'.$$

Пусть $L(\varphi)$ – (нелинейный) оператор с линейной областью определения $\mathcal{D}(L)$, плотной в \mathcal{H} . По аналогии с линейным случаем определим сопряжённый оператор L_φ^* к оператору $L(\varphi)$.

Определение 2 [18]. *Сопряжённым* оператором L_φ^* к оператору $L(\varphi)$ назовём класс эквивалентности линейных операторов $\{\psi \rightarrow L_\varphi^* \psi, \varphi \in \mathcal{D}(L)\}$ таких, что область определения $\mathcal{D}(L_\varphi^*)$ оператора L_φ^* содержит $\mathcal{D}(L)$ и выполнено равенство (ср.(3.2))

$$\langle L(\varphi), \psi \rangle = \langle \varphi, L_\varphi^* \psi \rangle, \quad \psi \in \mathcal{D}(L_\varphi^*), \varphi \in \mathcal{D}(L). \quad (3.16)$$

Из этого определения вытекают такие утверждения.

Если L – линейный оператор, то класс эквивалентности сопряжённого оператора к L состоит из единственного оператора L^ , который не зависит от φ .*

Сопряжённый оператор L_φ^* к оператору $L(\varphi)$ единственный (в том смысле, что единственный класс эквивалентности $\{L_\varphi^*, \varphi \in \mathcal{D}(L)\}$).

Необходимым условием существования сопряжённого оператора L_φ^* к оператору $L(\varphi)$ является его представление

$$L(\varphi) = (L_\varphi^*)^* \varphi, \quad \varphi \in \mathcal{D}(L), \quad (3.17)$$

т.е. оператор $L(\varphi)$ есть суперпозиция (нелинейного) оператора $\varphi \rightarrow L_\varphi^{**} \varphi$ и линейного оператора $\psi \rightarrow L_\varphi^{**} \psi$ при каждом $\varphi \in \mathcal{D}(L)$.

С другой стороны, если оператор $L(\varphi)$ допускает представление

$$L(\varphi) = A(\varphi)\varphi, \quad \varphi \in \mathcal{D}(L), \quad (3.18)$$

где $\varphi \rightarrow A(\varphi)$ – (нелинейный) оператор с линейной областью определения $\mathcal{D}(L)$, плотной в \mathcal{H} , и при каждом $\varphi \in \mathcal{D}(L)$ $\psi \rightarrow A(\varphi)\psi$ есть линейный оператор, причём области определения $\mathcal{D}(A(\varphi))$ и $\mathcal{D}(A^*(\varphi))$ содержат $\mathcal{D}(L)$. Тогда сопряжённый оператор L_φ^* существует и эквивалентен оператору $A^*(\varphi)$, так что

$$L_\varphi^* \sim A^*(\varphi). \quad (3.19)$$

Итак, мы получили следующую теорему.

Теорема [18]. Для того чтобы для оператора $L(\varphi)$ существовал сопряжённый оператор L_φ^* , необходимо и достаточно, чтобы он допускал представление (3.18); при этом справедливо равенство (3.19).

В работах [6–10, 38] были введены различные определения сопряжённых операторов $L^*(\varphi)$ для нелинейного оператора $L(\varphi)$. Среди них отметим следующее

$$A_0^*(\varphi), \quad \text{где } A_0(\varphi) = \int_0^1 L'(t\varphi) dt, \quad \varphi \in \mathcal{D}(L) \quad (3.20)$$

при условии, что оператор $L(\varphi)$ дифференцируем по Гато и $L(0) = 0$. В силу представления [38]

$$L(\varphi) = \int_0^1 L'(t\varphi)t\varphi dt = A_0(\varphi)\varphi, \quad \varphi \in \mathcal{D}(L),$$

оператор $L(\varphi)$ имеет вид (3.18) и поэтому, по доказанному (см.(3.19)), это определение выделяет единственного представителя $A_0^*(\varphi)$ из класса эквивалентности сопряжённых операторов $\{L_\varphi^*, \varphi \in \mathcal{D}(L)\}$, так что

$$L_\varphi^* \sim A_0^*(\varphi). \quad (3.21)$$

Пример 2 (ср. с примером 1). Для $L(\varphi) = \varphi\varphi'$ формулы (3.19) и (3.20) дают

$$L_\varphi^* \psi = -\frac{\varphi}{2} \psi'.$$

Пример 3. Если $L(\varphi) = \varphi^k (\partial^\alpha \varphi)^m$, то

$$L_\varphi^* = \frac{k}{k+m} \varphi^{k-1} (\partial^\alpha)^m + \frac{m}{k+m} (-1)^{|\alpha|} \partial^\alpha [\varphi^k (\partial^\alpha \varphi)^{m-1}].$$

Важный для приложений достаточно широкий класс нелинейных операторов вида (3.18) был рассмотрен в работах [11–13]

$$L(\varphi) = \sum_{|\alpha| \leq m} A_\alpha(x, \varphi) \partial^\alpha \varphi(x), \quad (3.22)$$

где $\varphi \rightarrow A_\alpha(x, \varphi)$ – (нелинейные) операторы с общей линейной областью определения $\mathcal{D}(L)$, плотной в \mathcal{H} .

Обозначая

$$A(x, \varphi) = \sum_{|\alpha| \leq m} A_\alpha(x, \varphi) \partial^\alpha,$$

представим оператор (3.22) в виде (3.18)

$$L(\varphi) = A(x, \varphi)\varphi.$$

В этом случае при каждом $\varphi \in \mathcal{D}(L)$ сопряжённый (по Лагранжу) оператор имеет вид

$$\tilde{A}(x, \varphi)\psi = \sum_{|\alpha| \leq m} (-1)^{|\alpha|} \partial^\alpha [A_\alpha(x, \varphi)\psi], \quad \varphi \in \mathcal{D}(L), \psi \in \mathcal{D}(A^*(\varphi)). \quad (3.23)$$

Были построены законы сохранения для уравнения

$$A(\varphi)\varphi = 0, \quad \varphi \in \mathcal{D}(L), \quad (3.24)$$

с использованием решений ψ ассоциированного уравнения

$$\tilde{A}(x, \varphi)\psi = 0, \quad \psi \in \mathcal{D}(A^*(\varphi)), \quad (3.25)$$

где φ есть решение уравнения (3.24).

Сохраняющиеся токи $J_\nu(\varphi, \psi; x)$, $\nu = 1, 2, \dots, n$, для системы (3.24) при $m \geq 1$ имеют вид

$$J_\nu(\varphi, \psi; x) = \sum_{q+k=0}^{m-1} \sum_{\nu_i, \lambda_j} (-1)^k \partial_{\nu_1} \dots \partial_{\nu_k} [A_{\nu\nu_1 \dots \nu_k \lambda_1 \dots \lambda_q}(x, \varphi) \psi \partial_{\lambda_1} \dots \partial_{\lambda_q} \varphi], \quad (3.26)$$

где ψ – решения уравнений (3.25).

Пример 4. Пусть $m = 1$. Уравнения (3.24) и (3.25) принимают вид

$$A_0(x, \varphi)\varphi + \sum_{\nu=1}^n A_\nu(x, \varphi) \frac{\partial \varphi}{\partial x_\nu} = 0,$$

$$A_0(x, \varphi)\psi - \sum_{\nu=1}^n \frac{\partial}{\partial x_\nu} [A_\nu(x, \varphi)\psi] = 0,$$

а токи (3.26) –

$$J_\nu(\varphi, \psi; x) = A_\nu(x, \varphi)\psi\varphi, \quad \nu = 1, 2, \dots, n. \quad (3.27)$$

Оператор $\tilde{A}(x, \varphi)$ формально совпадает с представителем класса сопряжённых операторов $\{A^*(x, \varphi), \varphi \in \mathcal{D}(L)\}$. Ввиду неоднозначности оператор $\tilde{A}(x, \varphi)$ был назван в [10–12] ассоциированным с оператором $A(x, \varphi)$, а не сопряжённым к оператору $L(\varphi)$.

В работах [10–12] рассматривалась система уравнений вида (3.24), в которой $A_\alpha, \varphi(x)$ и $\psi(x)$ предполагались $q \times s$ -, $s \times r$ - и $r \times q$ -матрицами-функциями. В этом случае формула (3.26) даёт $r \times r$ - матрицу законов сохранения.

Определение 3 [18]. Оператор $L(\varphi), \varphi \in \mathcal{D}(L)$ вида (3.18) называется *симметричным (существенно-самосопряжённым, сопряжённым)*, если в классе эквивалентности сопряжённых к нему операторов существует симметричный (существенно-самосопряжённый, самосопряжённый соответственно) оператор.

Пример 5. Оператор

$$\partial^\alpha \{ [A(x, \varphi) \partial^\alpha] \varphi \}, \quad \varphi \in \mathcal{C}^{2|\alpha|}(\bar{G})$$

симметричный, если функция $A(x, \varphi)$ вещественная и непрерывная в $\bar{G} \times \mathbb{C}$, G – ограниченная область в \mathbb{R}^n .

Пример 6. Интегральный оператор

$$\int_G K(\varphi(x), \varphi(y); x, y) \varphi(y) dy$$

самосопряжённый в $\mathcal{L}_2(G)$, если G – ограниченная область и K – эрмитово ограниченное ядро

$$K(X, Y; x, y) = \bar{K}(Y, X; y, x), \quad |K(X, Y; x, y)| \leq M.$$

Пример 7 [10]. Оператор

$$L(\varphi) = \sin \varphi = \frac{\sin \varphi}{\varphi} \varphi$$

самосопряжённый, поскольку при каждом $\varphi \in \mathcal{L}_2(a, b)$ оператор $\psi \rightarrow \frac{\sin \varphi}{\varphi} \psi$ самосопряжённый в $\mathcal{L}_2(a, b)$.

Пример 8. Уравнение Хартри-Фока для z -электронной волновой функции ψ имеет вид [44]

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = H(x, \psi) \psi, \quad \psi(x) = \psi_1(x_1) \psi_2(x_2) \dots \psi_z(x_z),$$

где $H(x, \psi)$ – нелинейный оператор в $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^{3z})$,

$$H(x, \psi) = \sum_{k=1}^z \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_k - \frac{ze^2}{|x_k|} + e^2 \sum_{j \neq k} \int \frac{|\psi_j(x_j)|^2}{|x_k - x_j|} dx_j \right].$$

Если $\psi_k, k = 1, 2, \dots, z$ ограничены в \mathbb{R}^3 , то оператор $H(x, \psi)$ – существенно-самосопряжённый, в силу критерия Като, $\bar{H}(\psi, x) = H^*(\psi, x)$.

Идея использования сопряжённых уравнений оказалась весьма плодотворной не только в линейной теории и практике переноса нейтронов и излучения (ценность нейтронов, законы сохранения, теория возмущений и т.д.), но и во многих других прикладных разделах математической физики: физике атмосферы и океана, механике сплошной среды, квантовой механике, интегрируемым системам, охране окружающей среды, математических задачах иммунологии, оптимальном управлении, усвоении и обработке данных, включая и нелинейные задачи. Существенный вклад в эту проблематику был внесён Г.И. Марчуком и его учениками (см. [6–10]).

4. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ ДЛЯ СТАЦИОНАРНЫХ НЕОДНОРОДНЫХ УРАВНЕНИЙ ПЕРЕНОСА

Несмотря на впечатляющие достижения за последние 50 лет в численных методах, сделавших возможным проектирование, пуск и работу АЭС, полномасштабная проблема нахождения решений нестационарного уравнения (2.1) представляется и на сегодняшний день, в силу её многомерности, далеко не решенной задачей, требующей разработки новых, более совершенных вычислительных алгоритмов и создание на качественно новом уровне вычислительной техники. Практический успех разработок был обусловлен тем, что достаточно точно давали необходимые решения упрощенные модели уравнения (2.1). Мы коснёмся достаточно фрагментарно лишь некоторых вопросов, отсылая для более подробного ознакомления с библиографией по затронутым темам к монографиям [4, 37]. Мы рассмотрим лишь детерминированные методы, оставляя в стороне методы Монте-Карло. Для простоты изложения ограничимся рассмотрением одногрупповых уравнений, записанных в виде (2.12), (2.13), (2.15), (2.17).

Для численного решения краевой задачи (2.27)–(2.29) в одномерном случае (пусть для шара $|x| = r < R$) используется

Метод факторизации [14]. Рассмотрим классическую краевую задачу типа Штурма-Лиувилля для функции $m(r) = r\varphi_0(r)$

$$-(Dm')' + \alpha m = q(r), \quad 0 < r < R, \quad (4.1)$$

$$m(0) = 0, \quad m(R) + hm'(R) = 0, \quad (4.2)$$

где $D > 0$, $\alpha \geq 0$ и $h \geq 0$.

Факторизуя оператор

$$-(Dm')' + \alpha m = -\left(\frac{d}{dx} + g/D\right)\left(D\frac{d}{dx} - g\right)m, \quad (4.3)$$

получим уравнение Риккати

$$g' + g^2/D = \alpha \quad (4.4)$$

для вспомогательной функции g , а уравнение (4.1) распадётся на два линейных уравнения первого порядка

$$m_1' + g/Dm_1 = q(r), \quad (4.5)$$

$$Dm' - gm = -m_1(r). \quad (4.6)$$

Чтобы удовлетворить граничным условиям (4.2), положим

$$g(0) = 0, \quad m_1(0) = 0, \quad m(R) = \frac{hm_1(R)}{D(R) + hg(R)}. \quad (4.7)$$

Уравнение Риккати (4.4) при начальном условии $g(0) = 0$ имеет положительное решение на $(0, R]$. Поэтому уравнение (4.5) при условии $m_1(0) = 0$ устойчиво численно интегрируется от точки $r = 0$ до точки $r = R$, а уравнение (4.6) при условии (4.7) ($m(R)$ известно) устойчиво численно интегрируется от точки $r = R$ до точки $r = 0$. Таким образом решение неустойчивой краевой задачи (4.1), (4.2) свелось к решению трёх устойчивых задач Коши: для уравнения Риккати (4.4) и для двух линейных уравнений (4.5) и (4.6) при начальных условиях (4.7).

Этим методом в течение 1953–1955 гг. было вручную рассчитано большое количество задач со сложным энергетическим спектром (и, стало быть, с большим количеством групп) в рамках усовершенствованного диффузионного приближения (Арзамас–16, расчёт РДС–37 по заданию А.Д. Сахарова).

Существуют два метода получения систем линейных алгебраических уравнений, аппроксимирующих уравнение переноса: вариационный и конечно-разностный.

Вариационные методы. В вариационном методе, который можно трактовать как обобщенный метод Галеркина, приближённое решение ищут в виде

$$\sum_{k=0}^n a_k g_k(x) h_k(\Omega). \quad (4.8)$$

Если в (4.8) $h_k(\Omega)$ – заданные сферические функции, то получают метод сферических гармоник, или P_n -приближения – систему дифференциальных по пространственным переменным уравнений. Для уравнения (2.15) и нечётных n обоснование метода было впервые получено в [16]; в этом случае он превращается в метод Ритца, решение которого минимизируют квадратичный функционал (2.21).

При заданных $g_k(x)$ получаем систему вырожденных интегральных уравнений, а при заданных $g_k(x)$, $h_k(x)$ – методы конечных элементов; для уравнения (2.16) решения полученных уравнений минимизируют на соответствующих подпространствах квадратичный функционал (2.21) [4].

Конечно-разностные методы. Конечно-разностные аппроксимации многомерных уравнений переноса претерпели непростую историю. На первых этапах их развития не учитывалась специфика решений, гладкость у которых наблюдается лишь вдоль характеристик, а возможные разрывы в решении по другим направлениям (возникающие в многозонных задачах с плоскими границами) также распространяются вдоль характеристик.

Впервые разностный метод характеристик, учитывающий упомянутую специфику решений, был предложен в [15] для решения задач в сферической геометрии (рис. 1) и в [15] доказана его сходимость.

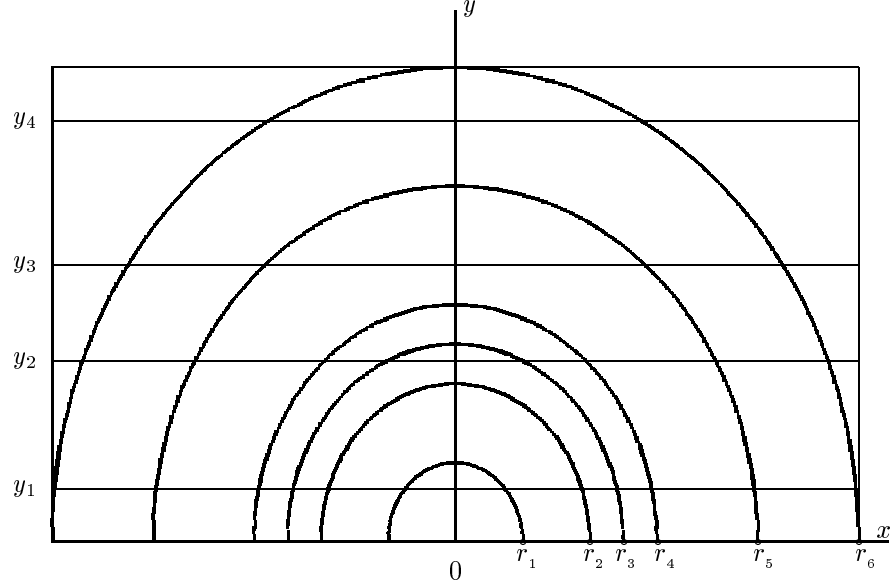


Рис. 1. Метод характеристик

По-видимому, только те разностные схемы способны удовлетворительно аппроксимировать уравнение переноса, в которых заложены идеи метода характеристик. Среди таких схем достойны внимания разностные уравнения с повышенной локальной аппроксимацией, что позволяет существенно сократить порядок решаемых уравнений. Приведём пример подобной аппроксимации для уравнения (2.17). Для этого рассмотрим три точки ξ_1, ξ_2, ξ_3 , лежащие на характеристике $x(\xi) = x_0 + \Omega\xi$ в области G . Пусть $\xi_3 - \xi_2 = \xi_2 - \xi_1 = h > 0$, а функция $l(x)$ при $\xi_1 \leq \xi \leq \xi_3$ постоянна. Пусть

$$\delta^2 \vartheta_2 = \vartheta_1 - 2\vartheta_2 + \vartheta_3, \quad \omega \vartheta_2 = \frac{5}{6}\vartheta_2 + \frac{1}{12}(\vartheta_1 + \vartheta_3)$$

разностные операторы, в которых ϑ_i есть значение функции ϑ_i в точках $x_i = x_0 + \Omega\xi_i$ характеристики. Тогда разностное уравнение

$$-l^2 \frac{\delta^2 u_2}{h^2} = \omega(-u + cSu + q/\sigma)_2 \quad (4.9)$$

при достаточно гладком вдоль характеристики решении уравнения (2.17) будет с точностью $O(h^4)$ аппроксимировать это уравнение [4].

Аппроксимации интегральных операторов. С целью существенного уменьшения числа угловых направлений в квадратурных формулах, аппроксимирующих интегральные операторы, представляющие интегрирование по единичной сфере, были разработаны методы получения квадратурных формул типа Гаусса, инвариантных относительно дискретных групп вращения [21, 22, 27, 28]. Были получены параметры таких квадратур повышенной алгебраической степени точности до 131-го порядка, инвариантных относительно группы октаэдра с инверсией. Веса этих квадратур оказались положительными и достаточно выровненными, а узлы – достаточно регулярно триангулируют поверхность еди-

ничной сферы. На рис. 2 показано расположение узлов квадратуры 131-го порядка; она содержит 5810 узлов и точно интегрирует первые 17424 сферические гармоники.

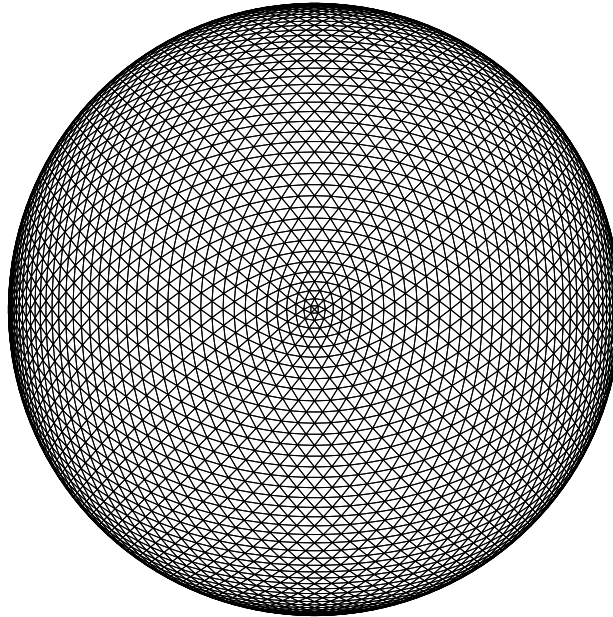


Рис. 2. Квадратура 131-го порядка для сферы

Серьёзную проблему при решении многомерных задач методом характеристик представляют разработки под эти задачи двух обоснованных методов продолжения функций: интерполяцию в расчётные точки характеристик значений правых частей Q уравнений (заданных на некоторой сетке D_n) и разнос в точки D_n для вычисления функции Q значений $\varphi(x_i, \Omega_k)$, рассчитываемых на характеристиках (рис. 1).

Итерационные методы. КР-метод. При существующем уровне вычислительной техники классические линейные итерационные методы, а также методы ускорения их неприменимы для решения многомерных задач переноса, т.к. требуют запоминания в памяти ЭВМ непомерно большого объёма информации о предыдущем приближении $\varphi^k(x, \Omega)$. Поэтому в начале 60-х годов был разработан КР-метод и методы ускорения его в подпространстве функций, зависящих только от x [4]. Метод был в 1963 г. успешно внедрён для вычисления коэффициента теплового использования в ячейках реактора со сложными тепловыделяющими элементами. Метод требует запоминания только значений $S\varphi^k$. Опишем его простейшую схему на примере использования дифференциальных уравнений (2.12) и (2.27). В нём по заданному приближению $S\varphi^k$ следующее приближение $S\varphi^{k+1}$ находят согласно реализации двух операций: операции K -

простой итерации по источнику для уравнения переноса

$$L\varphi^{k+1/2} = \beta(x)S\varphi^k + q, \quad (4.10)$$

результатом которой является образование и запоминание массива величин $S\varphi^{k+1/2}$, и операции P -решения для поправки $w^{k+1/2}$ краевой задачи для диффузионного уравнения типа (2.27)

$$-g_k \operatorname{div} D \nabla w^{k+1/2} + \sigma_1(x) w^{k+1/2} = \beta(x) S(\varphi^{k+1/2} - S\varphi^k), \quad (4.11)$$

после выполнения которой полагаем

$$S\varphi^{k+1/2} = S\varphi^{k+1} + w^{k+1/2}, \quad k = 0, \dots, N-1. \quad (4.12)$$

В формуле (4.11) g_k – ускоряющие КР-метод итерационные параметры. Значения их найдены для модельных задач [4]: $g_k = (1 + y_k)/2$, где y_k – корни многочлена Якоби $P_N^{(-1/2, 2N)}(y)$.

Чебышевский одношаговый итерационный метод является универсальным алгоритмом ускорения методов итераций. Однако для плохо обусловленных систем уравнений этот метод считался неустойчивым. Попытки применения его приводили к катастрофическому возрастанию ошибок округления. Поэтому этот метод не находил широкого применения. Впервые в исследованиях В.И. Лебедева и С.А. Финогенова [29, 30] было показано, что устойчивость метода существенно зависит от порядка употребления параметров, и предложены алгоритмы перемешивания их, обеспечивающие устойчивость счета. Для ускорения внешних и внутренних медленно сходящихся итераций в задачах на k_{ef} (2.24) и (2.27), (2.28) были созданы устойчивые бесконечно продолжаемые чебышевские методы с применением Т-последовательности [4, 25, 29], норма общего оператора перехода у которых на каждом итерационном шаге не выше единицы.

Многие оптимальные алгоритмы вычислительной математики основаны на использовании свойств экстремальных многочленов (ЭМ). В качестве ЭМ используются, как правило, многочлены Чебышева. Однако при наличии более точной информации об искомом решении задачи возникают новые постановки оптимизации методов решения, требующие разработки эффективных устойчивых методов нахождения ЭМ, коэффициенты которых подчинены нелинейным связям. Целью проведенных в [25, 26] исследований была разработка новых эффективных и устойчивых методов получения параметров экстремальных многочленов высокого порядка со связями для использования их в оптимальных методах решения задач вычислительной математики и математической физики по следующим направлениям. Исследование свойств ЭМ Золотарева, Геронимуса, ЧМБС-многочленов. Эти многочлены удовлетворяют обобщенному условию альтернанса и зависят от нескольких свободных параметров, с их помощью найдены аналитические решения новых экстремальных задач со связями. Изучение многочленов, наименее отклоняющихся от нуля в областях плоскости комплексного переменного, ограниченных лемнискатами специальных типов. Оптимизация двух- и трехчленных итерационных методов нахождения решения линейных операторных уравнений и частных задач на собственные значения. В этих

задачах предполагается, что спектр оператора может принадлежать областям специального вида, отличного от отрезка или эллипса. Определение параметров ЭМ для явных двухслойных устойчивых разностных схем 3-го и 4-го порядка точности с максимальным (по устойчивости) средним шагом для интегрирования жестких систем дифференциальных уравнений. Получение квадратурных формул типа Гаусса, точных для всех дробно-рациональных функций с фиксированным знаменателем.

Параллельные вычисления. Дальнейший прогресс в численных методах решения многомерных уравнений переноса невозможен без применения мощных параллельно действующих вычислительных систем. Поэтому становятся актуальными разработки методов решения исходной сложной задачи на основе методов решения составляющих её подзадач и создание на этой основе эффективных итерационных методов. Естественно при этом каждую задачу рассматривать как некий "черный ящик", состояние которого определяется лишь входной и выходной информацией, а решение её даётся на откуп отдельной компьютерной системе.

При расчётах реакторов возникает и другая проблема. Вдали от неравномерностей нулевой момент $S\varphi$ достаточно точно определяется из диффузионного приближения (2.27) (см. рис. 5). Поэтому возникает задача корректного согласования решений уравнений переноса и диффузии нейтронов. Аналогичные проблемы возникают и в параллельных системах, если каждая из подзадач решается своими методами (вариационными или разностными, в разных геометриях).

В методе композиции [19] исследованы условия, при выполнении которых задача, составленная из подзадач, поставлена корректно. Пусть для простоты изложения каждая из двух подзадач для нахождения $u_i \in V_i$ задана вариационными уравнениями

$$a_i(u_i, v_i) = f_i(v_i), \quad \forall v_i \in V_i, \quad i = 1, 2, \quad (4.13)$$

где $a_i(u_i, v_i)$ – ограниченные эллиптические формы, определенные на элементах u_i, v_i гильбертовых пространств V_i , а $f_i(v_i)$ – ограниченные на V_i линейные функционалы. Тогда для нахождения $u = (u_1, u_2)$ из нового гильбертова пространства $\bar{V} \in V_1 \times V_2$, можно сформулировать составную задачу вида

$$a_1(u_1, v_1) + a_2(u_2, v_2) = \bar{f}_1(v_1) + \bar{f}_2(v_2), \quad \forall v = (v_1, v_2) \in \bar{V}, \quad (4.14)$$

с условиями согласования

$$\bar{U}_1 \gamma_1 u_1 = \bar{U}_2 \gamma_2 u_2, \quad (4.15)$$

$$\bar{J}_1 \delta_1 u_1 + \bar{J}_2 \delta_2 u_2 = \tau,$$

где $\gamma_i, i = 1, 2$, – операторы, называемые *операторами Дирихле*, а δ_i – соответствующие им *операторы Неймана*, определяемые по формуле Грина для $a_i(u_i, v_i)$. Исследованы условия на операторы $\bar{U}_i, J_i, i = 1, 2$, и пространство \bar{V} , при выполнении которых составная задача (4.14), (4.15) будет корректно поставлена. В

связи с этим изучены свойства граничных операторов, названных *операторами Пуанкаре-Стеклова*. Они определяются равенствами

$$S_i \delta_i u_i = \gamma_i u_i, i = 1, 2, \quad (4.16)$$

где u_i – решение однородных (при нулевом внутреннем источнике) задач (4.13), $i = 1, 2$. Области определения и значений этих операторов определяют для каждой из подзадач вид передаваемой ”внутри” и ”вне” информации.

Строение ядерного реактора имеет ячеичную структуру, которая естественным образом определяет тип подзадач – расчет поля нейтронов внутри ячеек реактора. Решения же ячеичных задач представимы через собственные функции соответствующих для каждой ячейки операторов Пуанкаре – Стеклова

$$S_i e = \lambda e, i = 1, 2, \dots \quad (4.17)$$

На основе сказанного сформулированы и исследованы на операторном уровне чебышевские итерационные методы с переменными параметрами для решения общей задачи. Эффективность подобных методов для одноклассовых задач переноса в плоской геометрии была исследована в [31, 32].

5. НЕСТАЦИОНАРНЫЕ ЗАДАЧИ, СПЕКТРАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ.

УСЛОВИЯ СПИВКИ РЕШЕНИЙ

Жёсткие системы дифференциальных уравнений и явные методы.

Рассматриваемые в едином комплексе три проблемы: методы решения жёстких систем обыкновенных дифференциальных уравнений большого порядка, разностные или вариационные методы решения задач переноса и диффузии нейтронов и методы распараллеливания для многопроцессорных ЭВМ побуждают вернуться ещё раз к исследованию эффективности явных разностных схем, которые в разбираемой ситуации допускают почти идеальное распараллеливание вычислений.

Если аппроксимировать в нестационарных уравнениях (2.1), (2.4), (2.8), (2.9), (2.25) дифференциальные по x операторы конечномерными, то мы получим систему линейных обыкновенных по t дифференциальных уравнений (нестационарные уравнения метода прямых).

Благодаря упомянутой аппроксимации, наличию малого множителя при $\frac{\partial u}{\partial t}$ в уравнениях (2.9), (2.25) и больших множителях в правых частях уравнений (2.1), (2.8) получаем на отрезке $0 \leq t \leq T$ жёсткую задачу Коши для системы дифференциальных уравнений n -го порядка вида

$$\frac{du}{dt} = Au + q, \quad u|_{t=0} = u_0, \quad (5.1)$$

где $u = (u_1, \dots, u_n)$, $u_0 = (u_{01}, \dots, u_{0n})$, $q = (q_1, \dots, q_n)$, A – $(n \times n)$ -матрица. Пусть (λ_i, φ_i) – собственные пары матрицы A , $\text{Sp}(A) = \{\lambda_i\}$, $\{\varphi_i\}$ образуют базис в пространстве R^n , а лежащая в левой полуплоскости комплексного переменного z часть спектра $\{\lambda_i\}$ принадлежит области B , содержащейся в круге K_r минимального радиуса $r > 0$ вида

$$K_r = \{z : |z + r| \leq r\}. \quad (5.2)$$

Назовём задачу (5.2) жёсткой, если

$$rT \gg 1. \quad (5.3)$$

Тогда для явных методов Эйлера с постоянным шагом h по времени последний, для устойчивого счёта, должен удовлетворять неравенству

$$h \leq cou = r^{-1}, \quad (5.4)$$

которое накладывает сильное ограничение на размер временного шага. Однако существуют явно устойчивые алгоритмы с переменными шагами τ_{k+1} вида

$$u_{k+1} = u_k + \tau_k (Au_k + q_k), \quad k = 0, 1, \dots, N-1, \quad (5.5)$$

интегрирующие жёсткую задачу Коши при затрате существенно меньшего количества шагов [23, 24]. Для них $l_N = \sum_{i=1}^N \tau_i = P'_N(0)$, где многочлен $P_N(z)$ имеет вид

$$P_N(z) = \prod_{i=1}^N (1 + \tau_i z). \quad (5.6)$$

При выполнении условий аппроксимации он удовлетворяет условию устойчивости

$$\max_{z \in B} |P_N(z)| \leq 1 \quad (5.7)$$

и является решением задачи Маркова

$$P_N(z) = \arg \sup_{R_N} (R'_N(0)), \quad (5.8)$$

где $l_N = \sup_{R_N} (R'_N(0))$ взят по всем многочленам вида (5.6), удовлетворяющим условиям (5.7). Если обозначить через $z_i, i = 1, \dots, N$, корни экстремального многочлена (5.8), то в оптимальном методе (5.5) временные шаги определяются из множества чисел: $-z_i^{-1}, i = 1, \dots, N$. В предельном случае, когда $B = [-M, 0], M \gg 1$, решением (5.8) будет многочлен Чебышева, а тогда за N шагов оптимального метода (5.5) мы продвинемся по времени на величину

$$l_N = N^2 cou. \quad (5.9)$$

Изложенный метод предполагает, что корни многочлена (5.8) действительны. Для общего случая получены другие формулы явного метода. Для простоты пусть $N = 2n$. Тогда многочлен $P_N(z)$ (5.8) можно факторизовать на квадратичные множители, получить следующие формулы интегрирования задачи (5.1):

$$\begin{aligned} y_{k+1/2} &= u_k + h_{k+1} f(u_k, t_k), \\ t_{k+1/2} &= t_k + h_{k+1}, \\ y_{k+1} &= y_{k+1/2} + h_{k+1} f(y_{k+1/2}, t_{k+1/2}), \\ t_{k+1} &= t_{k+1/2} + h_{k+1}, \\ u_{k+1} &= y_{k+1} + \gamma_{k+1} h_{k+1} (f(u_k, t_k) - f(y_{k+1/2}, t_{k+1/2})), \end{aligned} \quad (5.10)$$

$$k = 0, 1, \dots, n - 1, f(u, t) = Au + q,$$

Этот метод состоит из двух эйлеровых шагов и поправки. В нем параметры h_i, γ_i легко определяются по корням $P_N(z)$. Метод (5.10), учитывающий и комплексный спектр, был запрограммирован в программе DUMKA; в ней в зависимости от условий аппроксимации $2 \leq N \leq 2^{16} \cdot 3^6$ [23, 24]. С помощью этой программы был успешно решен ряд линейных и нелинейных многомерных задач математической физики с действительным и комплексным спектром.

Спектральные задачи. Для создания добротных методов решения (включая итерационные) стационарных и нестационарных задач переноса следует иметь информацию о расположении спектра задач (2.1), (2.8), (2.25) и их разностных аналогов. Здесь мы сталкиваемся с нетрадиционной для физики ситуацией: дискретный спектр имеет и конечные предельные точки, а непрерывный спектр заполняет массивную, вплоть до $-\infty$, часть плоскости комплексного переменного. Расположение полного спектра дискретных аналогов уравнений переноса исследовано мало. Впервые в работах [35, 36] дано полное описание спектра для плоской трёхзонной разностной модели реактора ВВЭР в диффузионном приближении с шестью группами запаздывающих нейтронов. Оригинальная технология спектрального анализа, разработанная в [42], позволила исследовать эволюцию спектрального состава нестационарных решений: выделить главное инвариантное пространство и оценить нормы проекции решения на инвариантное подпространство, дополнительное к главному. Это позволило получить хорошую асимптотику для решения нестационарных задач, удерживая в разложении в ряд Фурье решения малое количество слагаемых.

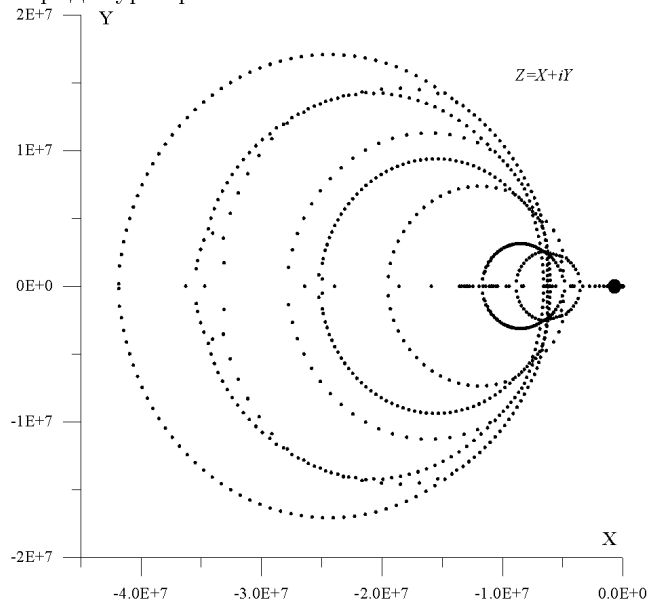


Рис. 3. Спектр двухгрупповой задачи

На рис. 3, 4 показан полный спектр плоской, критической, трёхзонной, дискретной задачи (2.26) с шестью группами запаздывающих нейтронов и во-

семью угловыми направлениями, содержащий 1986 точек. Образованные точками овалы аппроксимируют точки непрерывного спектра исходной задачи (на рис. 4 в увеличенном размере показано содержание "кляксы" на рис. 3). Разброс спектра свидетельствует, что соответствующая нестационарная задача является жёсткой с комплексным спектром.

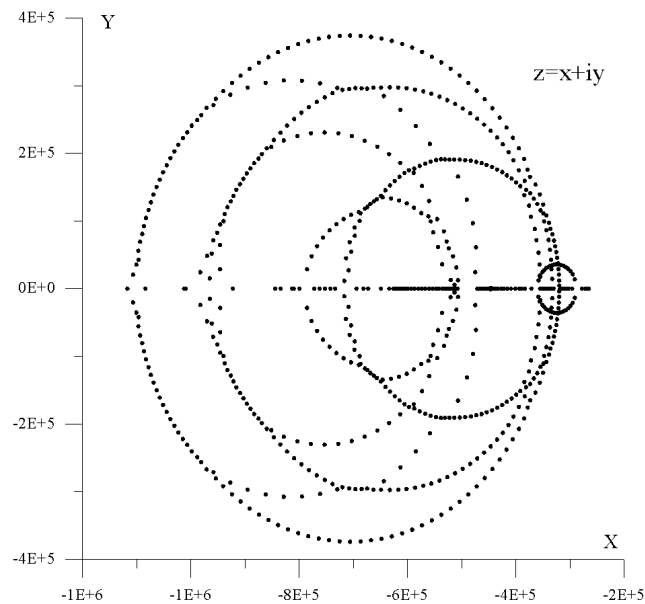


Рис. 4. Спектр внутри "кляксы"

Что считать и как сшивать? Представим нестационарные уравнения (2.1), (2.8), (2.25), записанные вдоль характеристик, в виде

$$\frac{du}{dt} = f(u, v, t), \quad (5.11)$$

где u есть N или φ , причём

$$\varphi = vN, \quad (5.12)$$

v здесь удобно рассмотреть как параметр. Определим для уравнения (5.11) задачу Коши на отрезке $[0, T]$ с начальным условием $u|_{t=0} = u_0$.

Специфика реакторных задач заключается в том, что реактор разбивается на зоны и коэффициенты уравнения в результате усреднения считаются кусочно-постоянными по x (в нелинейном случае зависящими от решения) с разрывами на границах зон. Таким образом, (5.11) – дифференциальное уравнение с разрывной правой частью. Это требует обобщения понятия решения. Так, при выполнении условий Каратеодори [43] решением его естественно считать абсолютно непрерывную функцию, являющуюся решением интегрального уравнения

$$u(t) = u_0 + \int_0^t f(u(s), v, s) ds. \quad (5.13)$$

Именно на аппроксимации этой формулы основаны численные алгоритмы нахождения решений уравнения (5.11).

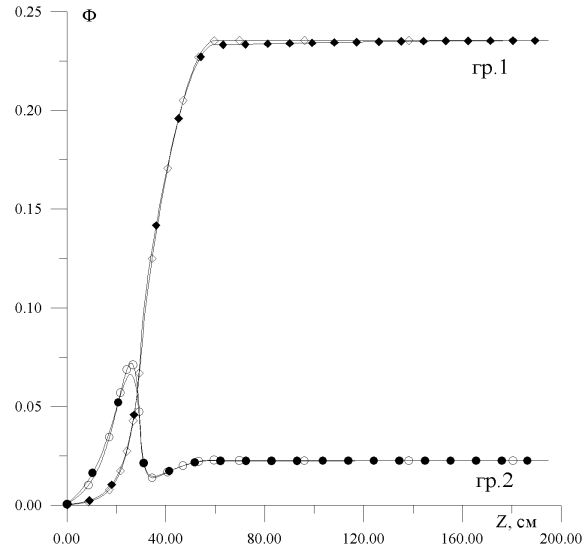


Рис. 5. Поток нейтронов в 1-2-й группах

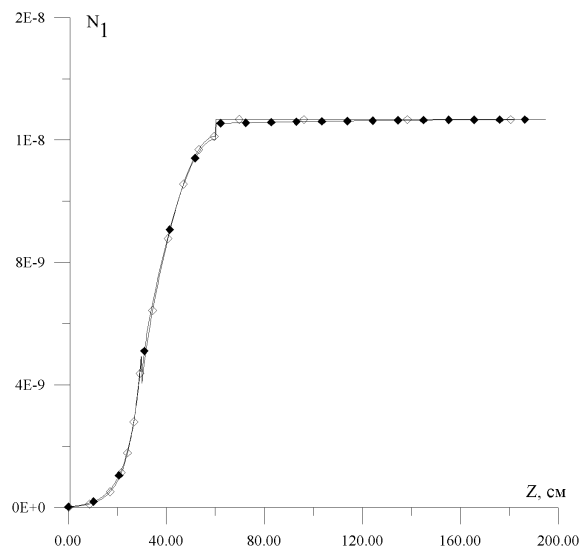


Рис. 6. Плотность нейтронов в 1-й группе

Двухгрупповая задача переноса и диффузии нейтронов

- \diamond – 1-я группа диффузии нейтронов \blacklozenge – 1-я группа переноса нейтронов
 \circ – 2-я группа диффузии нейтронов \bullet – 2-я группа переноса нейтронов

Однако довольно часто в малогрупповых уравнениях (2.8), (2.9) скорости v в каждой группе считаются кусочно-постоянными по x функциями с разрывами на границах зон. Этот эффект возникает в результате усреднения их по энергии в зонах с различными свойствами. Это приводит к тому, что если мы требуем, чтобы при переходе границы зоны была непрерывна плотность N :

$$[N] = 0, \quad (5.14)$$

(здесь $[f]$ означает скачок функции f на границе зон), то из формулы (5.12) следует, что тогда будет разрыв потока φ . А если потребуем непрерывности потока:

$$[\varphi] = 0, \quad (5.15)$$

то будет разрывна плотность N .

Аналогичные проблемы возникают при формулировке условий согласования на границах зон для $\Phi = S\varphi$ или $N_0 = SN$ в диффузионном приближении, связанных соотношением

$$\Phi = vN_0. \quad (5.16)$$

Выяснено, что условию (5.14) соответствуют условия

$$[N_0] = 0, \quad \left[D \frac{\partial N_0}{\partial n} \right] = 0, \quad (5.17)$$

а условию (5.15):

$$[\Phi] = 0, \quad \left[D \frac{\partial \Phi}{\partial n} \right] = 0, \quad (5.18)$$

здесь n – нормаль к поверхности раздела зон.

На рис. 5 показаны графики нулевых моментов первой собственной функции упомянутой ранее двухгрупповой задачи (2.25), (2.26) в кинетическом и диффузионном приближении; при условиях (5.15) и (5.18) эти функции (как и соответствующие решения задач в (5.14), (5.17)) хорошо совпадают между собой. А на рис. 6 показан соответствующий первой группе график для плотности N_0 , вычисленной по формуле (5.16).

Однако остаётся открытым вопрос: считать ли непрерывной плотность или поток? Каждый из этих вариантов даёт разные k_{ef} собственные функции и заметное различие в темпах разгона мощности реактора в аварийных режимах для задач с (2.25), когда реактивность близка к $\bar{\beta}$. Заметим, что использование вместо (5.17) условий

$$[N_0] = 0, \quad \left[vD \frac{\partial N_0}{\partial n} \right] = 0,$$

обеспечивающих симметричность эллиптического оператора в диффузионном приближении, приводит к резкому возрастанию (в приведённом примере на 3 порядка) темпа разгона мощности [33, 34].

По-видимому, целесообразно рассчитывать уравнения для плотности, являющейся предельным значением трёхмерного функционала, хотя исторически сложилась практика расчёта многогрупповых констант для потока.

ЛИТЕРАТУРА

1. Марчук Г.И. О приближённых методах расчёта ядерных реакторов // Сессия Академии наук СССР по мирному использованию атомной энергии, 1–5 июля 1955 –М.: Изд-во АН СССР, 1955. С. 371–374.
2. Марчук Г.И. Численные методы расчёта ядерных реакторов. –М.: Атомиздат, 1958.
3. Марчук Г.И. Методы расчёта ядерных реакторов. –М.: Госатомиздат, 1961.
4. Марчук Г.И., Лебедев В.И. Численные методы в теории переноса нейтронов. –М.: Атомиздат, 1971; 1981.
5. Марчук Г.И., Орлов В.В. К теории сопряжённых функций // Нейтронная физика. –М.: Госатомиздат, 1961. С. 30–45.
6. Марчук Г.И. Численное решение задач динамики атмосферы и океана. –Л.: Гидрометеоздат, 1974.
7. Marchuk G.I. Adjoint Equations and analysis of Complex Systems. –Kluwer Acad. Publ. 1995.
8. Marchuk G.I., Agoshkov V.I. Conjugate operators and algorithms of perturbation in non-linear problems // Soviet J. Numer. Anal. and Math. Modell. 1988. №1. P. 21–46; №2. P. 115–136.
9. Марчук Г.И., Агошков В.И., Шутяев В.П. Сопряжённые уравнения и методы возмущений в нелинейных задачах математической физики. –М.: Наука, 1993.
10. Марчук Г.И. О некоторых подходах к построению сопряжённых операторов в нелинейных задачах // Труды Математического ин-та им. В.А. Стеклова, 1994. Т. 203. С. 126–134.
11. Владимиров В.С., Волович И.В. Законы сохранения для нелинейных уравнений // ДАН СССР. 1984. Т. 279, №4. С. 843–847.
12. Владимиров В.С., Волович И.В. Локальные и нелокальные токи для нелинейных уравнений // ТМФ. 1985. Т. 62, № 1. С. 3–29.
13. Владимиров В.С., Волович И.В. Законы сохранения для нелинейных уравнений// Актуальные проблемы вычислительной математики и математического моделирования. – Новосибирск: Наука, 1985, № 1. С. 147–162.

14. Владимиров В.С. Приближённое решение одной краевой задачи для дифференциального уравнения второго порядка // Прикладная математика и механика. 1955. Т. 19, Вып. 3. С. 315–324.
15. Владимиров В.С. Численное решение кинетического уравнения для сферы // Вычислительная математика. 1958. Сб. 3. С. 3–33.
16. Владимиров В.С., Математические задачи односкоростной теории переноса частиц // Труды Математического ин-та им. В.А. Стеклова. 1961. Т. 61.
17. Владимиров В.С. Особенности решения уравнения переноса // ЖВМиМФ. 1968. Т. 8, № 4. С. 842–852.
18. Владимиров В.С., Марчук Г.И. Об определении сопряжённого оператора для нелинейных задач // Доклады РАН (в печати).
19. Лебедев В.И. Метод композиции. –М.: ОБМ АН СССР, 1986.
20. Lebedev V.I. The composition method and unconventional problems // Sov. J. Num. An. and Math. Mod. 1991. V. 6, № 6. P. 485–496,
21. Лебедев В.И. О квадратурах на сфере // ЖВМиМФ. 1976. Т. 16, № 2. С. 293–306.
22. Лебедев В.И. Об одном типе квадратурных формул повышенной алгебраической точности для сферы // ДАН СССР. 1976. Т. 231, № 1. С. 32–34.
23. Lebedev V.I. How to solve stiff systems of differential equations by explicit method // Numerical Method and Applications. CRC Press, Boca Raton, 1994. P. 45–80.
24. Lebedev V.I. Explicit Difference Schemes with Variable Time Steps for Solving Stiff Systems of Equation // Numerical Analysis and its Applications: Proc. Lecture Notes in Computer Science 1196. –Springer, 1997. P. 274–283.
25. Lebedev V.I. An Introduction to Functional Analysis and Computational Mathematics. –Birkhäuser, Boston, Basel, Berlin, 1996.
26. Lebedev V.I. Extremal polynomials with restrictions and optimal algorithms // Advanced Mathematics: Computation and Applications / A.S. Alekseev and N.S. Bakhvalov (Editors). NCC Publisher. 1995. P. 491–502.
27. Kazakov A.M., Lebedev V.I. Gauss-type Quadrature Formulas for the Sphere, invariant with respect to the Dihedral Group // Proc. of the Steklov Inst. of Math. 1995. Issue 3. P. 89–99,

28. Лебедев В.И., Лайков Д.М. Квадратурная формула типа Гаусса 131-го алгебраического порядка точности // Докл. РАН. 1999. Т. 366, № 6.
29. Lebedev V.I., Finogenov S.A. On the Order of Parameter Specification in Chebyshev Cyclic Iterative Method // Zh. Vychisl. Mat. Mat. Phys. 1971. Vol. 11, №. 2. P. 425–439 (in Russian).
30. Lebedev V.I., Finogenov S.A. On the utilization of ordered Chebyshev parameters in iterative methods // Zh. Vychisl. Mat. Mat. Phys. 1976. Vol. 16, № 4. P. 895–907 (in Russian).
31. Лебедев В.И., Агошков В.И. Операторы Пуанкаре – Стеклова и их приложения в анализе. –М. ОВМ АН СССР, 1983.
32. Agoshkov V.I., Lebedev V.I. Generalized Schartz algorithm with variable parameters // Sov. J. Num. An. and Math. Mod. 1990. V. 5, № 1. P. 1–26.
33. Лебедев В.И., Костенков В.И., Курченкова Г.И. Об условии сшивки на границах зон в нестационарных диффузионных многозонных задачах // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физ. яд. реакторов. 1999. Вып. 1. С. 3–15.
34. Лебедев В.И., Костенков В.И., Курченкова Г.И. Условия сшивки в нестационарных многозонных задачах // Алгоритмы и программы для нейтронно-физических расчётов ядерных реакторов. Нейтроника-98. Обнинск. 1999. С. 135–142.
35. Дементьев В.Г., Лебедев В.И., Нечепуренко Ю.М. Спектральный анализ модели ядерного реактора с запаздывающими нейтронами // Алгоритмы и программы для нейтронно-физических расчётов ядерных реакторов. Нейтроника-98. Обнинск. 1999. С. 143–150.
36. Dementiev V.G., Kosarev A.I., Lebedev V.I., Nechepurenko Yu.M., Shishkov L.K. Spectral Analysis of VVER-1000 Reactor Model at high negative Reactivities // Proceeding of the ninth Symposium of AER, 1999. P. 453–468.
37. Белл В., Глесстон С. Теория ядерных реакторов. –М.: Атомиздат, 1974.
38. Вайнберг М.М. Функциональный анализ. – М.: Просвещение, 1979.
39. Гермогенова Т.А. Локальные свойства решений уравнения переноса. –М.: Наука. 1986.
40. Ершов Ю.И., Шихов С.Б. Математические основы теории переноса. В 2-х томах. –М.: Энергоатомиздат, 1985.

-
41. Лионс Ж.-Л. Оптимальное управление системами, описываемыми уравнениями с частными производными. – М.: Мир, 1972.
 42. Nechipurenko Yu.M. A new spectral analysis technology based on the Schur decomposition // Russ. J. Num. An. and Math. Mod. 1999. V. 14. № 3.
 43. Филиппов А.Ф. Дифференциальные уравнения с разрывной правой частью. –М.: Наука, 1985.
 44. Шифф Л. Квантовая механика. – М.: ИИЛ, 1950.

Вычислительная математика

Сопряженные уравнения и алгоритмы возмущений в задаче об оптимальных траекториях

В.И. Агошков

Институт вычислительной математики РАН
E-mail: agoshkov@inm.ras.ru

Изучается задача об оптимальной траектории точечного источника нестационарного уравнения конвекции-диффузии. Показывается, что данная траектория удовлетворяет системе нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений, нелинейность которых обуславливается зависимостью решения сопряженных уравнений от пространственных уравнений. Рассматриваются частные случаи задач и предлагаются алгоритмы их решения.

ВВЕДЕНИЕ

Сопряженные уравнения и алгоритмы возмущений в последние десятилетия играют всевозрастающую роль в исследованиях сложных математических моделей в различных отраслях науки и техники. Широкое распространение они получили в решении проблем ядерной энергетики, в изучении и численном решении задач физики атмосферы и океана, механики сплошной среды, охраны окружающей среды [5–14].

Одновременно была выявлена та значительная роль сопряженных уравнений, которую они играют в разработке эффективных методов вычислительной и прикладной математики, в том числе алгоритмов возмущений. Часто оказывалось, что только при использовании решений сопряженных уравнений (со специальными функциями в правых частях, граничных условиях и т.д.) алгоритмы возмущений оказывались легко реализуемыми. И в настоящее время сопряженные уравнения совместно с алгоритмами возмущений находят все более широкое распространение в теоретических и прикладных исследованиях (теории нелинейных задач [12, 17], оптимальном управлении [4], теории планирования эксперимента [13] и др.).

Значительный вклад в исследования в области сопряженных уравнений и алгоритмов возмущений и их различных приложений внес Г.И. Марчук, который является инициатором многих исследований в данной области науки [2, 5–8,

13, 14]. Так, в статье [14] в общем виде сформулирован метод получения сопряженных функций φ_p^* (функций ценности) для широкого класса неоднородных линейных уравнений

$$A\varphi = f.$$

В данной работе также была разработана теория возмущений для различных линейных функционалов

$$I_p(\varphi) = (\varphi, p),$$

где p – функция, характеризующая исследуемый физический процесс. Сопряженная функция φ_p^* введена авторами как решение уравнения

$$A^*\varphi_p^* = p,$$

в котором в качестве свободного члена берется именно функция p , входящая в $I_p(\varphi)$. С помощью сопряженных уравнений получены формулы теории возмущений для поправок функционалов при переходе оператора A в возмущенный $A' = A + \delta A$, среди которых – формулы возмущений первого порядка малости

$$\delta I_p = -(\varphi_p^*, \delta A\varphi) = -(\varphi, \delta A^*\varphi_p^*),$$

нашедшие в настоящее время широкое распространение в прикладных задачах и методах их исследования. Кроме прямого использования этих формул для оценки различных эффектов, они применяются в методах исследования сложных систем [7, 9].

На основе сопряженных уравнений и теории возмущений была разработана общая постановка обратных задач [2,10], связанных с восстановлением параметров или функций $\{\alpha_k\}$, $\{\beta_k\}$ в операторе

$$A = \sum_{k=1}^m (\alpha_k A_k + B_k (\beta_k C_k))$$

(A_k, B_k, C_k – некоторые линейные операторы) по заданному набору функционалов (измерений) I_{p_i} , $i = 1, \dots, n$. С помощью формул малых возмущений Г.И. Марчуком получена система уравнений

$$\sum_{k=1}^m [(\varphi_{p_i}^*, \delta\alpha_k A_k \varphi) + (B_k^* \varphi_{p_i}^*, \delta\beta_k C_k \varphi)] = \delta I_{p_i},$$

где $\varphi_{p_i}^*$ – сопряженная функция определяется из уравнения $A^*\varphi_{p_i}^* = p_i$, а φ – решение основной задачи $A\varphi = q$. На основе данной системы предложены алгоритмы определения искомых поправок $\{\delta\alpha_k\}$, $\{\delta\beta_k\}$ к известным коэффициентам $\{\alpha_k\}$, $\{\beta_k\}$ невозмущенной задачи. В результате обратная задача определения наборов $\alpha'_k = \alpha_k + \delta\alpha_k$, $\beta'_k = \beta_k + \delta\beta_k$, $k = 1, \dots, m$, сводится к задачам линейной алгебры. Было дано развитие теории и на случай, когда невозмущенное состояние значительно отличается от реального. На базе сформулированных постановок обратных задач в [13] было дано решение проблемы планирования сложного эксперимента, позволяющее среди всевозможных (практически реализуемых) наборов измерений выбрать те, которые оказываются наиболее информативными с точки зрения решения обратной задачи. Еще одним

конкретным применением общих постановок обратных задач из [10] является постановка задач атмосферной оптики, сформулированная в [11].

Г.И. Марчуком введено понятие сопряженных функций и в задачах с квазилинейным оператором $A(\varphi) \equiv A_1(\varphi)\varphi$, удовлетворяющим соотношению Лагранжа

$$(A(\varphi), \psi) = (\varphi, A_1^*(\varphi)\psi),$$

где $A_1^*(\varphi)$ – линейный по отношению к ψ оператор и зависящий от решения φ прямой задачи $A(\varphi) = f$. Он определил сопряженную функцию φ_p^* (функцию ценности по отношению к функции p) как решение уравнения $A_1^*(\varphi)\varphi_p^* = p$. Введение таким способом сопряженных функций в квазилинейных задачах позволило создать алгоритмы возмущений для сложных математических моделей гидротермодинамики, сформулировать новые методы решения задач прогноза погоды [6].

В последующем были выполнены также важные исследования по теории и приложениям сопряженных уравнений в связи с решением актуальных задач моделирования окружающей среды и оптимизации (с экологической точки зрения) территориального размещения промышленных объектов [7].

Во всех отмеченных выше работах подчеркивается та значительная роль, которую играют решения сопряженных уравнений ("сопряженная функция", "функция ценности", "функция чувствительности"). Вероятно, роль и значение решений этих уравнений еще не изучена полностью. И в данной работе мы обращаем внимание на новое качество решений сопряженных уравнений. На примере конкретной задачи оптимального управления – задачи об оптимальной траектории точечного источника нестационарного уравнения конвекции-диффузии – мы показываем, что именно *характер зависимости решения сопряженного уравнения от пространственных переменных определяет характер нелинейности системы нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений, задающих оптимальную траекторию*.

Таким образом, решения сопряженных уравнений могут выступать как "показатели" типа нелинейности целых классов нелинейных уравнений, возникающих в математической физике и прикладных исследованиях. В настоящей работе мы рассматриваем некоторые из таких уравнений. Получив нелинейные уравнения, которые определяют координаты оптимальной траектории, мы показываем, что при некоторых упрощающих предположениях они совпадают с рядом классических нелинейных уравнений. Мы изучаем также вопросы разрешимости исследуемой задачи и обсуждаем возможные алгоритмы ее приближенного решения (в том числе и алгоритмы возмущений).

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

1.1. Обозначим через D ограниченную область из \mathbf{R}^3 с кусочно-гладкой границей $\partial D \equiv \Gamma$ класса $C^{(2)}$, $x = (x_1, x_2, x_3) \in \bar{D} = D \cup \partial D$, t – временная переменная, $t \in [0, T]$, $T < \infty$. Пусть $U(x, t) = (u_1(x, t), u_2(x, t), u_3(x, t))$ есть заданная вектор-функция, причем $\operatorname{div} U = 0$ в $Q_T \equiv D \times (0, T)$, а $\varphi(x, t)$ удовлетворяет

системе уравнений вида

$$\begin{aligned}
 L\varphi &\equiv \frac{\partial\varphi}{\partial t} + A\varphi \equiv \frac{\partial\varphi}{\partial t} + \operatorname{div}(\tilde{U}\varphi) - \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i}(\mu_i \frac{\partial\varphi}{\partial x_i}) + a\varphi = f \text{ в } Q_T, \\
 \frac{\partial\varphi}{\partial N} + \tilde{U}_n^{(-)}(\varphi - \varphi_{(s)}) + \sigma\varphi &= 0 \text{ на } \partial D \times (0, T), \\
 \varphi &= \varphi_{(0)}(x), \quad x \in D, \quad t = 0.
 \end{aligned} \tag{1}$$

Здесь и в дальнейшем: $\tilde{U} = (u_1, u_2, u_3 - u_g)$, $u_g(x, t)$ – заданная гладкая функция; $n = (n_1, n_2, n_3)$ – единичный вектор внешней нормали к ∂D ; $\tilde{U}_n^{(-)} = (|\tilde{U}, n| - (\tilde{U}, n))/2$, $\tilde{U}_n^{(+)} = (|\tilde{U}, n| + (\tilde{U}, n))/2$, $(\tilde{U}, n) = \sum_{i=1}^3 u_i n_i$; $a = a(x, t) \geq 0$, $\mu_1 = \mu_2 > 0$, $\mu_3 > 0$, $\sigma(x, t) \geq 0$ есть ограниченные коэффициенты; $f = f(x, t)$ – функция внутренних источников, а $\varphi_{(s)} = \varphi_{(s)}(x, t)$ – функция, определенная на $\partial D \times (0, T)$; $\partial\varphi/\partial N \equiv \sum_{i=1}^3 \mu_i \cos(n, x_i) \frac{\partial\varphi}{\partial x_i}$. В дальнейшем, не оговаривая особо, для простоты считаем $a, \sigma, U, \tilde{U}, \mu_1, \mu_2, \mu_3, \varphi_{(s)}$ сколь угодно гладкими по всем своим переменным. Кроме того, условимся, что в работе рассматриваются только вещественные функции, числа и функциональные пространства.

1.2. Сформулируем обобщенную постановку задачи (1).

Пусть $W_2^{2,1}(Q_T) \equiv L_2(0, T; W_2^2(D)) \cap W_2^1(0, T; L_2(D))$, а $H \equiv L_2(Q_T)$ принимается за основное гильбертово пространство со скалярным произведением и нормой вида $(u, v)_H \equiv (u, v) \equiv \int_{Q_T} uv dx dt$, $\|u\|_H \equiv \|u\| \equiv (u, u)^{1/2}$. Пусть дифференциальный оператор L^T определяется так:

$$L^T\psi \equiv -\frac{\partial\psi}{\partial t} + A^T\psi \equiv -\frac{\partial\psi}{\partial t} - (\tilde{U}, \nabla)\psi - \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i}(\mu_i \frac{\partial\psi}{\partial x_i}) + a\psi, \quad \forall \psi \in W_2^{2,1}(Q_T).$$

Рассмотрим задачу вида

$$\begin{aligned}
 L^T\psi &= g \text{ в } Q_T \quad (g \in L_2(Q_T)), \\
 \frac{\partial\psi}{\partial N} + (\tilde{U}_n^{(+)} + \sigma)\psi &= 0 \text{ на } \partial D \times (0, T), \\
 \psi &= 0, \quad x \in D, \quad t = T.
 \end{aligned} \tag{2}$$

Данная задача имеет единственное решение $\psi \equiv (L^T)^{-1}g \in W_2^{2,1}(Q_T)$ (см. [14]), причем $\|\psi\|_{W_2^{2,1}(Q_T)} \leq C\|g\|$. Пусть

$$Y = \{\psi \in W_2^{2,1}(Q_T) : \psi = (L^T)^{-1}g \quad \forall g \in H, \|\psi\|_Y \equiv \|\psi\|_{W_2^{2,1}(Q_T)}\}.$$

Тогда Y есть подпространство из $W_2^{2,1}(Q_T)$. Теперь обобщенную постановку задачи (1) введем следующим образом: при $f \in Y^*$, $\varphi_{(0)} \in L_2(D)$ найти $\varphi \in H$,

такую, что

$$(\varphi, L^T \psi) - (f, \psi) - \int_D \varphi_{(0)} \psi(x, 0) dx - \int_0^T dt \int_{\Gamma} \tilde{U}_n^{(-)} \varphi_{(s)} \psi d\Gamma = 0 \quad \forall \psi \in Y, \quad (3)$$

при этом $\varphi(x, t)$ называется *обобщенным решением* задачи (1).

Лемма 1. *Если $f \in Y^*$, $\varphi_{(0)} \in L_2(D)$, $\varphi_{(s)} \in L_2(\Gamma \times (0, T))$, то (1) имеет единственное обобщенное решение $\varphi \in H$, причем*

$$\|\varphi\| \leq C(\|f\|_{Y^*} + \|\varphi_{(0)}\|_{L_2(D)} + \|\varphi_{(s)}\|_{L_2(\Gamma \times (0, T))}),$$

где $C = \text{const}$. Если же $\varphi \in W_2^{2,1}(Q_T)$, то φ удовлетворяет (1).

(Доказательство утверждений леммы следует из (3), если вместо $L^T \psi$ записать $g \in H$ и затем воспользоваться теоремой Рисса о представлении линейного ограниченного функционала. Если же окажется, что φ – ”гладкая функция” (например, из $W_2^{2,1}(Q_T)$), то интегрированием по частям с учетом принадлежности к Y множества гладких финитных в Q_T функций (которое плотно в H), показывается, что φ удовлетворяет (1).)

Замечание. Отметим, что существование и единственность обобщенного решения $\varphi \in H$ задачи (1) можно установить при более слабых ограничениях на $\varphi_{(0)}$, $\varphi_{(s)}$. \square

1.3. В последующем нас интересует специальный случай задачи (1), когда $f(x, t)$ есть точечный источник мощности $Q(t)$ ($t \in (0, T)$), движущийся по траектории $X(t) = (X_1(t), X_2(t), X_3(t))$, которая подлежит определению, т.е.

$$f(x, t) = Q(t)\delta(x - X(t)), \quad (4)$$

где $\delta(x) = \delta(x_1)\delta(x_2)\delta(x_3)$, $\delta(\xi)$ – ”дельта-функция Дирака”. Предполагается, что траектория $X(t) \subset D$ проходит через точки $X^{(1)} \equiv X_0(t_1)$, $X^{(2)} \equiv X_0(t_2)$, где $(t_1, t_2) \subseteq [0, T]$ ($0 \leq t_1 < t_2 \leq T$), а $X_0(t) = (X_{0,1}, X_{0,2}, X_{0,3})(t) \in D \quad \forall t \in (0, T)$ есть некоторая заданная траектория из класса $(W_2^1(0, T))^3$. Если $t_1 > 0$ ($t_2 < T$), то полагается $X(t) \equiv X_0(t)$ при $t \in [0, t_1)$ ($t \in (t_2, T]$). Функцию $Q(t)$ считаем определенной на $[0, T]$ и (если не оговаривается особо) принадлежащей классу $L_\infty(0, T)$.

При $f(x, t)$ вида (4) соотношение (3) примет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(X; \varphi, \psi) \equiv (\varphi, L^T \psi) - \int_0^T Q(t)\psi(X(t), t) dt - \int_D \varphi_{(0)}(x)\psi(x, 0) dx - \\ - \int_0^T dt \int_{\Gamma} \tilde{U}_n^{(-)} \varphi_{(s)} \psi(x(\Gamma), t) d\Gamma = 0 \quad \forall \psi \in Y. \end{aligned} \quad (5)$$

Отмечаем, что $f(x, t) \equiv Q(t)\delta(x - X(t)) \in Y^*$ при $Q(t) \in L_\infty(0, T)$ и согласно лемме 1 задача (5) имеет единственное обобщенное решение $\varphi \in H$.

Введем теперь функционал $\bar{\varphi}$ вида

$$\bar{\varphi} \equiv (\varphi, p) = \int_{Q_T} \varphi(x, t)p(x, t)dxdt, \quad (6)$$

где $p(x, t) \in L_p(Q_T)$ ($p \geq 2$), и пусть $\bar{\varphi}_{obs} = \text{const}$ есть заданная постоянная. Определим функционал стоимости S_A следующим образом:

$$S_A \equiv \frac{1}{2} \int_{t_1}^{t_2} A(t) \left| \frac{d}{dt}(X - X_0) \right|^2 dt + \frac{1}{2} (\bar{\varphi} - \bar{\varphi}_{obs})^2, \quad (7)$$

где $A(t) \in C[t_1, t_2]$ – известная функция, и если не оговорено специально, то $0 < A_0 \leq A(t) \leq A_1 < \infty$, $A_0, A_1 = \text{const}$.

Пусть $q \in Y$ есть решение следующей сопряженной задачи ("сопряженные уравнения"):

$$L^T q = p \quad \text{в } Q_T,$$

$$\frac{\partial q}{\partial N} + (\tilde{U}_n^{(+)} + \sigma)q = 0 \quad \text{на } \Gamma \times (0, T), \quad (8)$$

$$q = 0, \quad x \in D, \quad t = T.$$

Тогда $\bar{\varphi}$ и S_A можно переписать в виде:

$$\bar{\varphi} = \int_0^T Q(t)q(X(t), t)dt + \int_D \varphi_{(0)}q(x, 0)dx + \int_0^T dt \int_\Gamma \tilde{U}_n^{(-)}\varphi_{(s)}q(x(\Gamma), t)d\Gamma,$$

$$S_A(X_0, \bar{\varphi}_{obs}; q, X) = \frac{1}{2} \int_{t_1}^{t_2} A(t) \left| \frac{d}{dt}(X - X_0) \right|^2 dt +$$

$$\left(\int_0^T Q(t)q(X(t), t)dt + \int_D \varphi_{(0)}q(x, 0)dx + \int_0^T dt \int_\Gamma \tilde{U}_n^{(-)}\varphi_{(s)}q(x(\Gamma), t)d\Gamma - \bar{\varphi}_{obs} \right)^2.$$

Сформулируем теперь задачу об оптимальной траектории: найти $\varphi \in H$ и вектор-функцию $X(t) \in U_{ad} \equiv (W_2^1(t_1, t_2))^3$ такие, что

$$\mathcal{L}(X; \varphi, \psi) = 0 \quad \forall \psi \in Y, \quad S_A = \inf_{\substack{X \in U_{ad}, \\ X(t_1) = X^{(1)}, X(t_2) = X^{(2)}}}. \quad (9)$$

С использованием решения $q(x, t)$ сопряженной задачи (8) задача об оптимальной траектории формулируется следующим образом: найти решение $q \in Y$ задачи (8) и вектор-функцию $X(t) \in U_{ad}$ такие, что

$$S_A(X_0, \bar{\varphi}_{obs}; q, X) = \inf_{\substack{X \in U_{ad}, \\ X(t_1) = X^{(1)}, X(t_2) = X^{(2)}}}. \quad (10)$$

В дальнейшем мы изучаем задачу об оптимальной траектории в постановке (10). Отмечаем, что (10) не зависит от обобщенного решения $\varphi \in H$ задачи (1). Решение сопряженной задачи $q(x, t)$ также не зависит от φ . Таким образом, функция $q(x, t)$ и условие (10) могут определять искомую оптимальную траекторию $X(t)$ (и систему нелинейных уравнений, которым удовлетворяет $X(t)$) независимо от решения φ исходной задачи.

В последующем мы выпишем вариационные уравнения, соответствующие (10), рассмотрим некоторые частные случаи, а также изучим вопросы разрешимости сформулированных задач.

2. ВАРИАЦИОННЫЕ УРАВНЕНИЯ И ЧАСТНЫЕ СЛУЧАИ ЗАДАЧИ

2.1. Пусть q, X есть решение задачи (8), (10). Тогда необходимо выполняются уравнения ("вариационные уравнения"):

$$\begin{aligned} a(X_0, \bar{\varphi}_{obs}; X, \tilde{X}) &= 0 \quad \forall \tilde{X} \in (\overset{\circ}{W}_2^1(t_1, t_2))^3 \\ X(t_1) &= X^{(1)}, \quad X(t_2) = X^{(2)}, \end{aligned} \quad (11)$$

где

$$a(X_0, \bar{\varphi}_{obs}; X, \tilde{X}) \equiv \int_{t_1}^{t_2} A(t) \frac{d(X - X_0)}{dt} \frac{d\tilde{X}}{dt} dt + B(X, \bar{\varphi}_{obs}) \int_{t_1}^{t_2} Q(t)(\tilde{X}, \nabla)q(X(t), t) dt,$$

$$\begin{aligned} B(X, \bar{\varphi}_{obs}) &\equiv \int_0^T Q(t)q(X(t), t) dt + \int_D \varphi_{(0)}(x)q(x, 0) dx + \\ &+ \int_0^T dt \int_{\Gamma} \tilde{U}_n^{(-)} \varphi_{(s)} q(x(\Gamma), t) d\Gamma - \bar{\varphi}_{obs}, \end{aligned}$$

$$(\tilde{X}, \nabla)q = \tilde{X}_1 \frac{\partial q}{\partial x_1} + \tilde{X}_2 \frac{\partial q}{\partial x_2} + \tilde{X}_3 \frac{\partial q}{\partial x_3}, \quad \tilde{X}_i = 0 \quad \text{при } t \in ([0, t_1) \cup (t_2, T]), \quad i = 1, 2, 3.$$

Уравнения (11) являются обобщенной постановкой задачи вида

$$\begin{aligned} -\frac{d}{dt} A \frac{d}{dt} (X - X_0) + B(X, \bar{\varphi}_{obs}) Q(t) \nabla q(X(t), t) &= 0, \quad t \in (t_1, t_2), \\ X(t_1) &= X^{(1)}, \quad X(t_2) = X^{(2)}. \end{aligned} \quad (12)$$

Отмечаем, что первое уравнение из (11) ((12)) является нелинейным относительно $X(t)$ и *характер нелинейности определяется характером зависимости $q(x, t)$ от x* . Это обстоятельство делает важными исследования по изучению типов зависимости решений сопряженных уравнений от исходных данных задач, и в частности от "весовой функции" $p(x, t)$, определяющей (совместно с $\varphi(x, t)$) функционал $\bar{\varphi}$. Заметим также, что характер этой зависимости может

оказаться такой, что задача (12) будет совпадать (точно или приближенно) с задачами для ряда известных классических нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений. Рассмотрим некоторые из этих частных случаев задачи (12).

2.2. Пусть $p(x, t)$ имеет вид

$$p(x, t) = \{1/(\text{mes } \tilde{D}) \times (\tilde{t}_2 - \tilde{t}_1) \text{ в } \tilde{D} \times (\tilde{t}_1, \tilde{t}_2); 0 \text{ иначе}\}, \quad (13)$$

где $\tilde{D} \subseteq D$, $(\tilde{t}_1, \tilde{t}_2) \subseteq (0, T)$. Тогда $\bar{\varphi} = (\varphi, p)$ есть среднее значение $\varphi(x, t)$ в $\tilde{Q} \equiv \tilde{D} \times (\tilde{t}_1, \tilde{t}_2)$ и (12) есть задача о выборе такой траектории $X(t)$, чтобы $\tilde{\varphi} \cong \bar{\varphi}_{obs}$ (если $A(t)$ достаточно мала), а $\bar{\varphi}_{obs}$ есть "желаемое" среднее значение φ в \tilde{Q} .

Предположим, что $\tilde{U}, a, \sigma, \mu_1, \mu_2, \mu_3, p$ не зависят от t , а $\{\varphi_i\}, \{\psi_j\}$ есть собственные функции соответственно задач вида (при однородных краевых условиях из (1), (2)):

$$\mathcal{A}\varphi_i = \lambda_i\varphi_i, \quad \mathcal{A}^T\psi_j = \lambda_j\psi_j, \quad (14)$$

образующие биортогональную систему в H , $(\varphi_i, \psi_j) = \delta_{ij}$. Предполагается (для простоты), что присоединенные собственные функции в (14) отсутствуют и имеет место разложение

$$p(x, t) = \sum_{j=1}^{\infty} (p, \varphi_j)\psi_j \equiv \sum_{j=1}^{\infty} p_j\psi_j. \quad (15)$$

Тогда получаем, что

$$q(x, t) = \sum_{j=1}^{\infty} p_j \frac{1 - e^{-\lambda_j(T-t)}}{\lambda_j} \psi_j, \quad (16)$$

$$\nabla q(X(t), t) = \sum_{j=1}^{\infty} p_j \frac{1 - e^{-\lambda_j(T-t)}}{\lambda_j} \nabla \psi_j(X(t)),$$

$$\begin{aligned} B(X, \bar{\varphi}_{obs}) &= \sum_{j=1}^{\infty} \frac{p_j}{\lambda_j} \left\{ \int_0^T Q(t) (1 - e^{-\lambda_j(T-t)}) \psi_j(X(t)) dt + \right. \\ &\quad \left. + (1 - e^{-\lambda_j T}) \int_D \varphi_{(0)}(x) \psi_j(x) dx + \right. \end{aligned} \quad (17)$$

$$\left. + \int_0^T (1 - e^{-\lambda_j(T-t)}) dt \int_{\Gamma} \tilde{U}_n^{(-)} \varphi_{(s)}(x(\Gamma), t) \psi_j(x(\Gamma)) d\Gamma \right\} - \bar{\varphi}_{obs}.$$

Используя представления (16), (17), можно получить ряд частных случаев задачи (12) или приближений к ней. Пусть, например,

$$\tilde{Q} \equiv Q_T, \quad p = \psi_{j_0}, \quad (18)$$

т.е. $\bar{\varphi} \equiv (\varphi, \psi_{j_0})$ есть коэффициент при j_0 -й гармонике в разложении $\varphi = \sum_{j=1}^{\infty} (\varphi, \psi_j) \varphi_j$ и в исходной постановке задачи требуется найти такую $X(t)$, чтобы

$(\varphi, \psi_{j_0}) \cong \bar{\varphi}_{obs} \equiv \varphi_{obs, j_0} \equiv (\varphi_{obs}, \psi_{j_0})$ при $A \rightarrow +0$, где φ_{obs} – некоторая заданная функция. В этом частном случае (12) принимает вид

$$-\frac{d}{dt}A \frac{d}{dt}(X - X_0) + F_{j_0}(X(t), t) = 0, \quad t \in (t_1, t_2), \quad (19)$$

$$X(0) = X^{(1)}, \quad X(T) = X^{(2)},$$

где

$$F_{j_0}(X(t), t) = Q(t)B(X, \varphi_{obs, j_0}) \frac{p_{j_0}}{\lambda_{j_0}} (1 - e^{-\lambda_{j_0}(T-t)}) \nabla \psi_{j_0}(X(t)).$$

$$B(X, \varphi_{obs, j_0}) = \frac{p_{j_0}}{\lambda_{j_0}} \left\{ \int_0^T Q(t) (1 - e^{-\lambda_{j_0}(T-t)}) \psi_{j_0}(X(t)) dt + \right.$$

$$+ (1 - e^{-\lambda_{j_0}T}) \int_D \varphi_{(0)}(x) \psi_{j_0}(x) dx +$$

$$\left. + \int_0^T (1 - e^{-\lambda_{j_0}(T-t)}) dt \int_{\Gamma} \tilde{U}_n^{(-)} \varphi_{(s)}(x, t) \psi_{j_0}(x) d\Gamma \right\} - \varphi_{obs, j_0}.$$

Система (19) есть нелинейная задача для обыкновенных дифференциальных уравнений, причем *характер ее нелинейности определяется характером зависимости выбранной собственной функции $\psi_{j_0}(x)$ от x* . Зная характер этой зависимости (например, из теории задач на собственные значения для эллиптических уравнений), можно изучать разрешимость задачи (19) методами классической теории обыкновенных дифференциальных уравнений.

Замечание. Если $\tilde{U} \equiv 0$, $a = \text{const}$ и $\psi_{j_0} = 1/(\text{mes}(D) \times (0, T))$, $\varphi_{j_0} = 1$, $\lambda_{j_0} = a$ оказываются решением задачи (14), то

$$B(X, \varphi_{obs, j_0}) = \frac{\bar{p}_{j_0}}{a} \left\{ \int_0^T Q(t) (1 - e^{-a(T-t)}) dt + (1 - e^{-aT}) \int_D \varphi_{(0)}(x) dx \right\} - \varphi_{obs, j_0},$$

$$\nabla \psi_{j_0} = 0, \quad \bar{p}_{j_0} = (p, 1)/(\text{mes}(D) \times (0, T)),$$

а решением задачи (19) является вектор-функция $X(t) = X_0(t)$. Здесь выбор траектории $X(t)$ не влияет на величину $(\bar{\varphi} - \bar{\varphi}_{obs})^2$, а влияет только на минимизацию первого слагаемого в S_A (в этом несложно убедиться также путем непосредственного вычисления $\bar{\varphi} = \int_Q \varphi(x, t) dx dt / (\text{mes}(D) \times T)$ из (1)). □

2.3. Предположим теперь, что μ_1, μ_2, μ_3 есть постоянные,

$$D = \{x = (x_1, x_2, x_3) : 0 < x_i < L, i = 1, 2, 3\}, \quad \sigma \equiv 0, \quad a = \text{const}, \quad \tilde{U} \equiv 0, \quad (21)$$

а $p(x, t)$ имеет вид

$$p(x, t) = p_0(t) + \sum_{i=1}^3 p_i(t) \cos\left(\frac{\pi}{L} x_i\right), \quad (22)$$

где p_i , $i = 0, 1, 2, 3$, – заданные функции от t , т.е. мы рассматриваем ”весовую функцию” $p(x, t)$, являющуюся линейной комбинацией первых четырех собственных функций задачи (14). Тогда

$$q(x, t) = q_0(t) + \sum_{i=1}^3 q_i(t) \cos\left(\frac{\pi}{L} x_i\right), \quad (23)$$

где $q_0(t), \dots, q_3(t)$ задаются в явном виде. Если $p_i = \text{const}$, $i = 0, 1, 2, 3$, то

$$q_0(t) = a(T - t)p_0, \quad q_i(t) = \frac{p_i}{\lambda_i}(1 - e^{-\lambda_i(T-t)}), \quad \lambda_i = a + \mu_i \left(\frac{\pi}{L}\right)^2$$

и задача (19) принимает вид

$$-\frac{d}{dt}A \frac{d}{dt}(X_i - X_{0,i}) - \frac{\pi}{L}Q(t)B(X, \bar{\varphi}_{obs})q_i(t) \sin\left(\frac{\pi}{L}X_i(t)\right) = 0, \quad t \in (t_1, t_2), \quad (24)$$

$$X_i(t_1) = X_i^{(1)}, \quad X_i(t_2) = X_i^{(2)}, \quad i = 1, 2, 3.$$

Таким образом, в данном случае *координаты траектории определяются тремя уравнениями маятника* (с коэффициентами, зависящими от искомого решения).

2.4. Воспользовавшись представлением $\sin(\xi)$ в виде ряда Тейлора, из (24) получаем:

$$\begin{aligned} &-\frac{d}{dt}A \frac{d}{dt}(X_i - X_{0,i}) - \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 Q(t)B(X, \bar{\varphi}_{obs})q_i(t)(X_i(t) - \\ &-\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \frac{1}{3!}X_i^3(t) + O\left(\left(\frac{\pi}{L}\right)^4\right) = 0, \quad i = 1, 2, 3. \end{aligned}$$

Если $\pi \ll L$, то заключаем, что за *приближенное решение задачи (24) может быть принято решение задачи для трех уравнений Дюффинга*:

$$-\frac{d}{dt}A \frac{d}{dt}(X_i - X_{0,i}) - \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 Q(t)B(X, \bar{\varphi}_{obs})q_i(t)(X_i(t) - \frac{1}{3!}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 X_i^3(t)) = 0, \quad t \in (t_1, t_2),$$

$$X_i(t_1) = X_i^{(1)}, \quad X_i(t_2) = X_i^{(2)}, \quad i = 1, 2, 3, \quad (25)$$

или следующей (еще более простой) задачи:

$$-\frac{d}{dt}A \frac{d}{dt}(X_i - X_{0,i}) - \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 Q(t)B(X)q_i(t)X_i(t) = 0, \quad t \in (t_1, t_2), \quad (26)$$

$$X_i(t_1) = X_i^{(1)}, \quad X_i(t_2) = X_i^{(2)}, \quad i = 1, 2, 3,$$

где $B(X)$ вычисляется по формуле для $B(X, \bar{\varphi}_{obs})$ из (11) при $q(X(t), t) \equiv q^{(0)} = q_0(t) + \sum_{i=1}^3 q_i(t)$.

Из изложенного выше заключаем, что (в зависимости от формы области D , коэффициентов исходной задачи, вида $p(x, t)$ и характера зависимости $q(x, t)$

от пространственных переменных) в качестве задачи (12) может выступать ряд (ставших уже классическими) нелинейных задач для обыкновенных дифференциальных уравнений. С другой стороны, форма записи задач типа (12) с использованием решений $q(x, t)$ сопряженной задачи может рассматриваться как один из способов вывода других нелинейных уравнений, имеющих важное значение в соответствующих прикладных задачах.

3. РАЗРЕШИМОСТЬ ЗАДАЧИ

3.1. Разрешимость задачи (12) исследуем при дополнительных ограничениях.

Пусть $\bar{\varphi}_{obs} \equiv \bar{\varphi}_{obs,0} + \varepsilon \bar{\varphi}_{obs,1} \quad \forall \varepsilon \in [-\varepsilon_0, \varepsilon_0]$ – малый параметр, φ_0 есть обобщенное решение (1) при $f(x, t) = Q(t)\delta(x - X_0(t))$, $\bar{\varphi}_{obs,1} = \text{const}$ и предположим, что $\bar{\varphi}_{obs,0} \equiv \bar{\varphi}_0$. Тогда $S_A(X_0, \bar{\varphi}_{obs,0}; q, X_0) = 0$, а (10) представляет собой задачу отыскания "оптимальной" поправки к $X_0(t)$, обусловленной возмущением " $\varepsilon \bar{\varphi}_{obs,1}$ ". Исследование разрешимости данной задачи можно осуществить на основе общих теорем о неявных операторах.

Отмечаем, что первая производная формы $a(\cdot, \cdot; X, \tilde{X}) = 0$ по X в точке $X = X_0$, $\varepsilon = 0$ есть

$$a_X(X_0, \bar{\varphi}_{obs,0}; \tilde{X}, \tilde{X}) \equiv [\tilde{X}, \tilde{X}] = \int_{t_1}^{t_2} A(t) \frac{d\tilde{X}}{dt} \frac{d\tilde{X}}{dt} dt + B_1(\tilde{X})B_1(\tilde{X}) \quad \forall \tilde{X}, \tilde{X} \in (\overset{\circ}{W}_2^1(t_1, t_2))^3,$$

где

$$B_1(\tilde{X}) = \int_{t_1}^{t_2} Q(t)(\tilde{X}, \nabla)q(X_0(t), t)dt.$$

Поскольку

$$[X, X] = \int_{t_1}^{t_2} A(t) \left| \frac{dX}{dt} \right|^2 dt + (B_1(X))^2 \geq A_0 \left(\frac{\pi}{t_2 - t_1} \right)^2 \|X\|_{(L_2(t_1, t_2))^3}^2 + (B_1(X))^2,$$

то $[\tilde{X}, \tilde{X}]$ есть скалярное произведение. Обозначим через H_A гильбертово пространство вектор-функций $X \in (\overset{\circ}{W}_2^1(t_1, t_2))^3$ со скалярным произведением $[\cdot, \cdot]$ и нормой $[\cdot] = [\cdot, \cdot]^{1/2}$.

Рассмотрим уравнение вида

$$[X_1, \tilde{X}] = F_1(\tilde{X}) \quad \forall \tilde{X} \in H_A, \quad (27)$$

где $X_1 \in H_A$ – неизвестная вектор-функция, а также

$$F_1(\tilde{X}) = \bar{\varphi}_{obs,1} B_1(\tilde{X}) = - \frac{\partial}{\partial \varepsilon} a(X_0, \bar{\varphi}_{obs,0} + \varepsilon \bar{\varphi}_{obs,1}; X, \tilde{X}) \Big|_{\varepsilon=0, X=X_0}.$$

Нетрудно установить следующее утверждение.

Лемма 2. Уравнение (27) имеет единственное решение $X_1 \in H_A$, причем

$$\begin{aligned} [X_1] &\leq |\bar{\varphi}_{obs,1}|, \quad \left\| \frac{dX_1}{dt} \right\|_{(L_2(t_1, t_2))^3} \leq |\bar{\varphi}_{obs,1}|/\sqrt{A_0}, \\ \|X_1\|_{(L_2(t_1, t_2))^3} &\leq |\bar{\varphi}_{obs,1}|(t_2 - t_1)/(\pi\sqrt{A_0}). \end{aligned} \quad (28)$$

Используя утверждение данной леммы и привлекая теоремы о неявных операторах, можно установить разрешимость задачи (12) в окрестности точки $X = X_0$, $\varepsilon = 0$, если только потребовать наличие дополнительной гладкости у функции $q(x, t)$ (которая приведет к дополнительной гладкости по X формы $\partial a/\partial \varepsilon$). Однако для простоты мы введем более жесткие ограничения на $q(x, t)$ с целью установления аналитичности решения $X(t)$ задачи (12) по ε , что автоматически даст обоснование одного из методов приближенного решения задачи (12) – ”алгоритма регулярных возмущений”.

3.2. Предположим, что:

- (i) $\text{supp}(p) \subset Q_T$;
- (ii) $\text{dist}(X_0(t), \text{supp}(p)) \geq C_0 = \text{const} \quad \forall t \in (t_1, t_2)$;
- (iii) все коэффициенты уравнения конвекции-диффузии из (1) аналитические по переменным x_i , $i = 1, 2, 3$; $\forall t \in (0, T)$ в $Q_T \setminus \text{supp}(p)$.

Тогда по теории параболических уравнений ([1], [3]) в окрестности любой точки на траектории $X_0(t) (\forall t \in (t_1, t_2))$ функция $q(x, t)$ является аналитической по переменным x_i , $i = 1, 2, 3$. Следовательно, $a(X_0, \bar{\varphi}_{obs,0} + \varepsilon \bar{\varphi}_{obs,1}; X, \tilde{X})$ также будет аналитической в окрестности точки $X = X_0(t)$, $\varepsilon = 0$, ($\forall t \in (t_1, t_2)$), причем

$$a(X_0, \bar{\varphi}_{obs,0}; X, \tilde{X}) = 0 \quad \forall \tilde{X} \in (\overset{\circ}{W}_2^1(t_1, t_2))^3$$

и имеет место разложение

$$a(X_0, \bar{\varphi}_{obs,0} + \varepsilon \bar{\varphi}_{obs,1}; X, \tilde{X}) = \sum_{i+j \geq 0} a_{ij}(\tilde{X}, (X - X_0)^i) \varepsilon^j,$$

где $i = (i_1, i_2, i_3)$, $i_k \geq 0$, $k = 1, 2, 3$, $i + j = i_1 + i_2 + i_3 + j$

$$a_{ij}(\tilde{X}, (X - X_0)^i) = \frac{1}{i!j!} \frac{\partial^{i+j}}{\partial X^i \partial \varepsilon^j} a(X_0, \bar{\varphi}_{obs,0} + \varepsilon \bar{\varphi}_{obs,1}; \tilde{X}, (X - X_0)^i)$$

$$a_{1,0}(\tilde{X}, X - X_0) = a_X(X_0, \bar{\varphi}_{obs,0}; \tilde{X}, X - X_0) = [\tilde{X}, X - X_0]$$

и использованы известные обозначения из теории многомерных рядов Тейлора (см., например, [16]).

Поскольку уравнение (27) корректно разрешимо в H_A при $F_1 \in (H_A)^*$, то по теоремам о неявных операторах в аналитическом случае [16] задача (12) определяет в окрестности точек $(X_0(t), \varepsilon = 0)$ единственную неявную вектор-функцию $X = X(t, \varepsilon)$, причем $X(t, 0) = X_0$ и $X(t, \varepsilon)$ аналитична по ε в окрестности точки $\varepsilon = 0$:

$$X(t, \varepsilon) = X_0(t) + \varepsilon X_1(t) + \varepsilon^2 X_2(t) + \dots \quad \forall \varepsilon \in [-\varepsilon_0, \varepsilon_0], \quad (29)$$

где ε_0 – некоторое положительное число (зависящее от C_0, T и др.), т.е. задача (12) имеет аналитическое по ε решение $X(t)$ вида (29). Теперь на основе утверждения о разрешимости задачи (3) при $X = X(t, \varepsilon)$ заключаем о существовании решения задачи (10), причем S_A достигает минимума на $X = X(t, \varepsilon)$. Суммируя изложенное выше и заменяя условия (i)–(iii) ограничением аналитичности $q(x, t)$ по x , получаем следующее утверждение.

Теорема. *Предположим, что: 1) $X_0 \in (W_2^1(t_1, t_2))^3$, $X_0(t_1) = X^{(1)}$, $X_0(t_2) = X^{(2)}$; 2) $\bar{\varphi}_{obs} = \bar{\varphi}_{obs,0} + \varepsilon \bar{\varphi}_{obs,1}$, где $\bar{\varphi}_{obs,0} \equiv \bar{\varphi}_0$, а $\varphi_0 \in H$ есть решение задачи (3) при $f(x, t) = Q(t)\delta(x - X_0(t))$; 3) исходные данные задачи (1) и $p(x, t)$ таковы, что $q(x, t)$ аналитична по x в окрестности $X_0(t) \forall t \in (t_1, t_2)$ (см., например, ограничения (i)–(iii)). Тогда существует $\varepsilon_0 > 0$, такое, что $\forall \varepsilon \in [-\varepsilon_0, \varepsilon_0]$ задача (10) имеет единственное решение $X(t, \varepsilon)$ вида (29), являющееся аналитической функцией по ε . Функции $X_j(t)$, $j \geq 1$, в разложении (29) могут быть определены по алгоритму регулярных возмущений ("метод малого параметра"). В частности, X_1 есть решение уравнения (27) и все уравнения для X_j , $j \geq 1$, корректно разрешимы.*

Замечание. Обратим внимание на то, что мы не можем утверждать, что $\varphi(x, t)$ является гладкой по ε ! \square

3.3. Рассмотрим теперь задачу (10) при наличии дополнительного ограничения вида

$$|X(t) - X^{(+)}(t)| < \delta, \quad (30)$$

где $\delta = \text{const} > 0$, $X^{(+)}(t) \in (W_2^1(t_1, t_2))^3$ – заданная траектория, такая, что $X^{(+)}(t) \in D$, $\forall t \in (t_1, t_2)$. Предполагается, что существует хотя бы одна траектория $X_0(t)$, удовлетворяющая (30), а также $|X_0(t) - X^{(+)}(t)| < \delta/2$ и $X_0(t_1) = X^{(1)}$, $X_0(t_2) = X^{(2)}$. Если дополнительно выполнены условия сформулированной выше теоремы, то существует аналитическое по ε решение задачи (10) вида (29). Считая $\varepsilon \in [-\tilde{\varepsilon}_0, \tilde{\varepsilon}_0]$, где $0 \leq \tilde{\varepsilon}_0 < \varepsilon_0$, $\tilde{\varepsilon}_0$ – достаточно малое число, можно добиться выполнения условия (30). Таким образом, справедлива

Лемма 3. *Пусть выполнены условия теоремы, причем $X_0(t)$ удовлетворяет ограничению (30) и $|X_0(t) - X^{(+)}(t)| < \delta/2$, $\forall t$. Тогда существует $\tilde{\varepsilon}_0 > 0$ такая, что $\forall \varepsilon \in [-\tilde{\varepsilon}_0, \tilde{\varepsilon}_0]$ справедливы утверждения теоремы и для $X(t, \varepsilon)$ выполнено соотношение (30).*

Сформулированные выше утверждения о разрешимости задачи (10) относятся к случаю, когда $q(x, t)$ является аналитической функцией по x . Рассмотрение задач при более слабых ограничениях на $q(x, t)$ (в том числе задач

типа (19)) можно осуществить методами теории обыкновенных дифференциальных уравнений при ограничениях на $q(x, t)$, соответствующих выбранной весовой функции $p(x, t)$, гармоникам $\{\psi_{j_0}\}$ (см. (19)) и т.д.

4. О ПРИБЛИЖЕННОМ РЕШЕНИИ ЗАДАЧИ

Рассмотрим некоторые алгоритмы приближенного решения задачи об оптимальной траектории.

4.1. Сформулированная ранее теорема дает обоснование метода малых возмущений, который может рассматриваться также как один из методов приближенного решения рассматриваемой задачи. Так, задав X_0 и определив X_1 как решение задачи вида

$$-\frac{d}{dt}A\frac{dX_1}{dt} + (B_1(X_1) - \bar{\varphi}_{obs,1})Q(t)\nabla q(X_0(t), t) = 0, \quad t \in (t_1, t_2), \quad (31)$$

$$X_1(t_1) = X_2(t_2) = 0,$$

где

$$B_1(X_1) = \int_{t_1}^{t_2} Q(t)(X_1, \nabla)q(X_0(t), t)dt,$$

можно принять

$$X \cong X^{(1)} \equiv X_0 + \varepsilon X_1$$

где $X^{(1)}$ есть *приближение первого порядка*. На основе $X^{(1)}$ (решая (3)) находим соответствующее приближенное решение $\varphi^{(1)}$ задачи (1) при $f(x, t) = Q(t)\delta(x - X^{(1)})$.

Если необходимо вычислить приближение n -го порядка $X^{(n)} = X_0 + \varepsilon X_1 + \dots + \varepsilon^n X_n$, то нахождение X_2, \dots, X_n осуществляется путем последовательного решения задач (типа (31)) согласно алгоритму регулярных возмущений [9].

4.2. Сформулируем один из итерационных алгоритмов решения (12), который фактически базируется на отыскании поправок первого порядка (см. п. 5.1).

Пусть задано $\bar{\varphi}_{obs}$, тогда процесс построения $X(t)$ состоит в следующем.

Этап 1. Выбирается подходящее $X_0(t)$, находим решение φ_0 при $f = Q(t)\delta(x - X_0)$ и полагаем $\bar{\varphi}_{obs,0} \equiv \bar{\varphi}_0$.

Если $\bar{\varphi}_{obs} \neq \bar{\varphi}_{obs,0}$, то переходим к следующим этапам.

Этап 2. Решаем задачу по определению $q(x, t)$.

Этап 3. Выбирая подходящую поправку вида $\varepsilon\bar{\varphi}_{obs,1}$ так, чтобы $\bar{\varphi}_{obs} \cong \bar{\varphi}_{obs,0} + \varepsilon\bar{\varphi}_{obs,1}$ (естественно, что величина $|\varepsilon\bar{\varphi}_{obs,1}|$ должна быть такой, чтобы находиться в рамках теории малых возмущений), решаем задачу по определению X_1 , т.е. решаем (31), и полагаем $X \cong X_0 + \varepsilon X_1 = X^{(1)}$.

Если точность $X^{(1)}$ является недостаточной, то принимаем $X^{(1)}$ в качестве новой начальной траектории X_0 и повторяем Этап 3. Как нетрудно заметить, изложенный выше алгоритм есть реализация известного простейшего итерационного процесса.

Для численного решения (12) могут быть также применены другие подходящие итерационные процессы (метод Ньютона, модифицированный метод Ньютона и др.). Построив приближение $X^{(n)}$ с необходимой точностью, затем можно найти (если в этом есть необходимость) решение задачи (3) при $X = X^{(n)}$. (Отметим, что функцию $q(x, t)$ надо определить лишь один раз!).

Сделаем замечание, относящееся ко многим возможным методам решения рассматриваемых задач. Отметим, что для обоснования и практического применения этих методов часто нет необходимости требовать аналитичности $q(x, t)$ по x . Так, по-видимому, для обоснования некоторых итерационных процедур решения рассматриваемой задачи об оптимальных траекториях достаточно требования принадлежности q к Y . В данной работе мы не ставим себе целью исследования "наименьших" ограничений на q или на исходные данные задачи, при которых подходящий алгоритм был бы сходящимся. Как нам кажется, при изучении этой проблемы могут возникнуть трудности, носящие скорее "технический характер".

4.3. В частных случаях задачи отыскание X_1 (а значит, и приближений $X^{(1)} = X_0 + \varepsilon X_1 \cong X$) можно осуществить явным образом, после того как построена функция $q(x, t)$. Рассмотрим некоторые из них.

Пусть $A = \text{const}$. Поскольку решение задачи вида

$$-\frac{d^2 X}{dt^2} = f(t), \quad t \in (t_1, t_2), \quad X(t_1) = X(t_2) = 0$$

есть

$$X(t) = \int_{t_1}^{t_2} G(t, t') f(t') dt',$$

где $G(t, t')$ есть функция Грина:

$$G(t, t') = \begin{cases} \frac{(t-t_1)(t_2-t')}{(t_2-t_1)} & \text{при } t_1 \leq t \leq t' \\ \frac{(t_2-t)(t'-t_1)}{(t_2-t_1)} & \text{при } t' \leq t \leq t_2 \end{cases},$$

то из (31) легко находим выражение для $B(X_1)$ и X_1 , $X^{(1)}$:

$$B_1(X_1) = \frac{\bar{\varphi}_{obs,1} B_1 \left(\int_{t_1}^{t_2} G(t, t') Q(t') (\nabla q)(X_0(t'), t') dt' \right)}{A + B_1 \left(\int_{t_1}^{t_2} G(t, t') Q(t') (\nabla q)(X_0(t'), t') dt' \right)},$$

$$X_1(t) = \frac{\bar{\varphi}_{obs,1} \int_{t_1}^{t_2} G(t, t') Q(t') (\nabla q)(X_0(t'), t') dt'}{A + B_1 \left(\int_{t_1}^{t_2} G(t, t') Q(t') (\nabla q)(X_0(t'), t') dt' \right)},$$

где

$$(\tilde{X}, \nabla)q = \sum_{i=1}^3 \tilde{X}_i(t) \frac{\partial q}{\partial x_i}.$$

Предположим, что $q(x, t)$ такова, что компоненты вектора $(\nabla q)(x, t)$ суть непрерывные по всем переменным функции. Тогда допустима следующая функция $Q(t)$:

$$Q(t) = Q_0 \delta(t - t_0), \quad (32)$$

где $Q_0 = \text{const} > 0$, $t_0 \in (t_1, t_2)$. В этом случае $X_1(t)$ находится по формуле вида:

$$X_1(t) = \frac{\bar{\varphi}_{obs,1} G(t, t_0) (\nabla q)(X_0(t_0), t_0) Q_0}{A + Q_0^2 G(t_0, t_0) |\nabla q|^2(X_0(t_0), t_0)}. \quad (33)$$

Отмечаем, что если $|\nabla q(X_0(t_0), t_0)| \neq 0$, то (33) можно принять $A = 0$, и в результате получаем "предельные формулы" для $X_1(t)$, $X^{(1)}(t)$:

$$X_1(t) = \frac{\bar{\varphi}_{obs,1}}{Q_0} \frac{G(t, t_0)}{G(t_0, t_0)} \frac{(\nabla q)(X_0(t_0), t_0)}{|\nabla q|^2(X_0(t_0), t_0)} \quad (34)$$

$$X^{(1)}(t) = X_0(t) + \varepsilon \bar{\varphi}_{obs,1} \Phi(t), \quad (35)$$

где

$$\Phi(t) = \frac{1}{Q_0} \frac{G(t, t_0)}{G(t_0, t_0)} \frac{(\nabla q)(X_0(t_0), t_0)}{|\nabla q|^2(X_0(t_0), t_0)}$$

есть функция чувствительности траектории $X_0(t)$, соответствующей значению $\bar{\varphi}_{obs,0} = \bar{\varphi}_0$, к возмущению " $\varepsilon \bar{\varphi}_{obs,1}$ " в функционале стоимости.

Из изложенных выше частных случаев задачи очевидным образом следует важность поведения решения сопряженного уравнения при выборе оптимальной траектории $X(t)$.

В заключение сделаем несколько замечаний.

Мы рассмотрели только задачу о выборе траектории точечного внутреннего источника. Однако легко заметить, что аналогичные рассуждения можно провести и для точечных источников с траекториями, принадлежащими Γ . Для обоснования тех или иных алгоритмов приближенного решения задачи достаточно ввести дополнительно соответствующие ограничения на гладкость $\varphi_{(s)}$ и границу Γ .

Обсуждаемые в данной работе задачи и методы их решения могут быть полезными при анализе различных физических процессов с точки зрения экологической безопасности морей и океанов (задачи о выборе путей нефтяных танкеров,

путей прокладывания трубопроводов, возможных авариях подводных лодок, задачи космической экологии и т.п.). С помощью изложенных выше подходов и методов можно строить оптимальные траектории "потенциальных" источников загрязнений с целью минимизации наносимого ими ущерба.

Легко заметить, что не представляет труда переформулировать рассмотренные выше задачи при использовании некоторых других функционалов стоимости (например, с первым слагаемым типа $\|dX^4/dt^4\|_{(L_2(t_1, t_2))}^2$, с другими граничными условиями для выбираемой траектории и др.).

Автор выражает глубокую благодарность П.Б. Дубовскому, В.И. Лебедеву и В.П. Шутяеву за обсуждение работы и высказанные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Егоров Ю.В., Шубин М.А. Линейные дифференциальные уравнения с частными производными. Основы классической теории // Итоги науки и техники. Серия: Современные проблемы математики, 1982. Том 30. – М.: ВИНТИ.
- [2] Гурий Иванович Марчук // Библиография ученых СССР. Серия математики. Вып. 16 – М.: Наука, 1985.
- [3] Ладыженская О.А., Уралцева Н.Н., Солонников В.А. Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа. – М.: Наука, 1967 – 736 с.
- [4] Лионс Ж.-Л. Оптимальное управление системами, описываемыми уравнениями с частными производными. – М.: Мир, 1972.
- [5] Марчук Г.И. Численные методы расчета ядерных реакторов. – М.: Атомиздат, 1958.
- [6] Марчук Г.И. Численные решения задач динамики атмосферы и океана. – Л.: Гидрометеоздат, 1974.
- [7] Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. – М.: Наука, 1982.
- [8] Марчук Г.И. Применение сопряженных уравнений к решению задач математической физики // Успехи механики. 1981. 4, Вып. 1. С. 3–27.
- [9] Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. – М.: Наука, 1989.
- [10] Марчук Г.И. О постановке обратных задач // ДАН СССР. 1964. 156, №3. С. 503–506.
- [11] Марчук Г.И. Уравнение ценности информации с метеорологических спутников и постановка обратных задач // Косм. исследования. 1964. 2, Вып. 3. С. 462–477.

- [12] Марчук Г.И., Агошков В.И., Шутяев В.П. Сопряженные уравнения и алгоритмы возмущений в нелинейных задачах математической физики. – М.: Наука, 1993.
- [13] Марчук Г.И., Ермаков С.М. О некоторых проблемах планирования эксперимента // Математические методы планирования эксперимента. – Новосибирск, 1981. С. 3–18.
- [14] Марчук Г.И., Орлов В.В. К теории сопряженных функций // Нейтронная физика. – М.: Госатомиздат, 1961. С. 30–45.
- [15] Петровский И.Г. Лекции об уравнениях с частными производными. – М.: Физматлит, 1961 – 400 с.
- [16] Треногин В.А. Функциональный анализ. – М.: Наука, 1993. – 440 с.
- [17] Владимиров В.С., Волович И.В. Законы сохранения для нелинейных уравнений. – ДАН СССР. 1984. 279, №4.

Длинноволновая асимптотика с дисперсией для распространения волн в стратифицированных средах ¹

Н. С. БАХВАЛОВ, М. Э. ЭГЛИТ

Московский государственный университет
E-mail: bakh@abs.math.msu.su

Рассматривается распространение волн в стратифицированной среде периодической структуры. Отношение периода среды к характерной длине волны предполагается малым. Методом двухмасштабных асимптотических разложений выписывается главный по этому параметру член уравнения, определяющий дисперсию волн. Показано, что при произвольном направлении распространения гармонической волны в локально ортотропной среде в скалярном случае присутствие этого дисперсионного члена в общем случае приводит к убыванию скорости волн с ростом частоты.

1. АЛГОРИТМ ОСРЕДНЕНИЯ И ОБЗОР РЕЗУЛЬТАТОВ

Работа является естественным продолжением [3], где для случая, описываемого системой уравнений, в общем случае не распадающейся на совокупность скалярных уравнений, изучен процесс распространения волн в стратифицированных средах периодической структуры в направлении, ортогональном слоям. В данной работе рассматривается распространение волн в произвольном направлении. Как и в [3], рассматриваются длинные волны, для которых отношение ε периода среды d к типичной длине волны L мало. В дальнейшем все размеры считаются отнесенными к L , так что ε – безразмерный период свойств среды. Вводятся медленные переменные x_j и быстрые переменные $y_j = x_j/\varepsilon$. Свойства среды задаются функциями, зависящими от быстрых переменных.

Упругие волны в среде произвольной периодической структуры описываются системой уравнений

$$\begin{aligned} L\mathbf{u} &= -\rho \left(\frac{x_1}{\varepsilon}, \frac{x_2}{\varepsilon}, \frac{x_3}{\varepsilon} \right) \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} + L_0 \mathbf{u} = 0, \\ L_0 \mathbf{u} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(A_{ij} \left(\frac{x_1}{\varepsilon}, \frac{x_2}{\varepsilon}, \frac{x_3}{\varepsilon} \right) \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_j} \right); \end{aligned} \quad (1.1)$$

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты №99-01-01146, 99-01-01153) и ИНГАС (код проекта 96-1061).

скалярная функция $\rho(y_1, y_2, y_3)$ и матрицы $A_{ij}(y_1, y_2, y_3)$ – измеримые, ограниченные, 1-периодические (периодические с периодом 1) функции аргументов y_j ; $A_{ij} = A_{ji}^T$, суммирование по повторяющимся индексам в пределах [1, 3]. При этом предполагается, что

$$0 < \underline{\rho} \leq \rho(y_1, y_2, y_3), \quad 0 < \underline{a}(\mathbf{z}_j, \mathbf{z}_j) \leq (A_{ij}(y_1, y_2, y_3)\mathbf{z}_j, \mathbf{z}_i) \quad \forall y_j, \mathbf{z}_j. \quad (1.2)$$

При негладких $\rho(y)$, $A(y)$ решение (1.1) понимается в смысле удовлетворения соответствующему интегральному тождеству.

При $\varepsilon \ll 1$ для приближенного описания процесса можно ввести так называемые осредненные уравнения, соответствующие некоторой однородной среде, такие, что их решение позволяет построить приближенное решение задачи для исходной неоднородной среды. В работах [1], [4] рассмотрен алгоритм построения осредненных уравнений бесконечного порядка точности по ε для системы уравнений (1.1). Применим этот алгоритм в несколько видоизмененной форме. Асимптотическое разложение решения системы (1.1) ищется в виде

$$\mathbf{u} \sim \sum_{q, l_1, l_2, l_3=0}^{\infty} \varepsilon^{q+l_1+l_2+l_3} N_{l_1 l_2 l_3}^q \left(\frac{x_1}{\varepsilon}, \frac{x_2}{\varepsilon}, \frac{x_3}{\varepsilon} \right) \frac{\partial^{q+l_1+l_2+l_3} \mathbf{v}}{\partial t^q \partial x_1^{l_1} \partial x_2^{l_2} \partial x_3^{l_3}}, \quad (1.3)$$

где \mathbf{v} – решение получаемого далее осредненного уравнения, $N_{l_1 l_2 l_3}^q(y_1, y_2, y_3)$ – 1-периодические функции y_1, y_2, y_3 . Здесь и далее $N_{000}^0(y_1, y_2, y_3) = E$ – единичная матрица, $N_{l_1 l_2 l_3}^q(y_1, y_2, y_3) = 0$, если хотя бы один из индексов q, l_1, l_2, l_3 отрицателен. Представление решения в виде (1.3) получается из представления решения в [1],[4] приведением подобных членов. Подставляя разложение (1.3) в $L\mathbf{u}$, получим

$$L\mathbf{u} \sim \sum_{q, l_1, l_2, l_3=0}^{\infty} \varepsilon^{q+l_1+l_2+l_3-2} H_{l_1 l_2 l_3}^q(y_1, y_2, y_3) \frac{\partial^{q+l_1+l_2+l_3} \mathbf{v}}{\partial t^q \partial x_1^{l_1} \partial x_2^{l_2} \partial x_3^{l_3}},$$

$$H_{l_1 l_2 l_3}^q = -\rho N_{l_1 l_2 l_3}^{q-2} + L_{yy}^0 N_{l_1 l_2 l_3}^q + A_{ij} \frac{\partial N_{l_1-\delta_{i1}, l_2-\delta_{i2}, l_3-\delta_{i3}}^q}{\partial y_j}$$

$$+ \frac{\partial}{\partial y_i} (A_{ij} N_{l_1-\delta_{j1}, l_2-\delta_{j2}, l_3-\delta_{j3}}^q) + A_{ij} N_{l_1-\delta_{i1}-\delta_{j1}, l_2-\delta_{i2}-\delta_{j2}, l_3-\delta_{i3}-\delta_{j3}}^q, \quad (1.4)$$

где $L_{yy}^0 N = \frac{\partial}{\partial y_i} (A_{ij}(y_1, y_2, y_3) \frac{\partial N}{\partial y_j})$.

Далее находим $N_{l_1 l_2 l_3}^q$ такие, чтобы коэффициенты $H_{l_1 l_2 l_3}^q(y_1, y_2, y_3)$ при отрицательных степенях ε обратились в ноль, а при неотрицательных – не зависели от y_1, y_2, y_3 :

$$H_{l_1 l_2 l_3}^q(y_1, y_2, y_3) = h_{l_1 l_2 l_3}^q = \text{const}. \quad (1.5)$$

Величины $h_{l_1 l_2 l_3}^q$ находим из условия $\langle H_{l_1 l_2 l_3}^q \rangle = h_{l_1 l_2 l_3}^q$, являющегося условием разрешимости системы уравнений (1.5) относительно $N_{l_1 l_2 l_3}^q$. Здесь и далее $\langle \cdot \rangle$ – обозначение среднего по периоду : $\langle f \rangle = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 f(y_1, y_2, y_3) dy_1 dy_2 dy_3$.

Поскольку $\left\langle \frac{\partial N}{\partial y_j} \right\rangle = 0$ при любой 1-периодической N , то

$$h_{l_1 l_2 l_3}^q = \left\langle A_{ij} \frac{\partial N_{l_1 - \delta_{i1}, l_2 - \delta_{i2}, l_3 - \delta_{i3}}^q}{\partial y_j} + A_{ij} N_{l_1 - \delta_{i1}, l_2 - \delta_{i2}, l_3 - \delta_{i3} - \delta_{j3}}^q \right\rangle. \quad (1.6)$$

В результате получим осредненное уравнение

$$\bar{L}\mathbf{v} \sim \sum_{q+l_1+l_2+l_3 \geq 2} \varepsilon^{q+l_1+l_2+l_3-2} h_{l_1 l_2 l_3}^q \frac{\partial^{q+l_1+l_2+l_3} \mathbf{v}}{\partial t^q \partial x_1^{l_1} \partial x_2^{l_2} \partial x_3^{l_3}} \sim 0. \quad (1.7)$$

Из структуры рекурсии видно, что

$$N_{l_1 l_2 l_3}^q = 0, \quad h_{l_1 l_2 l_3}^q = 0 \quad \text{при } q \text{ нечетных.} \quad (1.8)$$

Матрицы $N_{l_1 l_2 l_3}^q(y_1, y_2, y_3)$ определяются из решения так называемых задач на ячейке (1.5) с точностью до постоянных слагаемых (некоторых постоянных матриц). Выбором этих слагаемых можно добиться выполнения условий $\langle N_{l_1 l_2 l_3}^q \rangle = 0$.

В [1] доказаны следующие утверждения.

1. Если решения задач (1.5) выбираются так, что $\langle N_{l_1 l_2 l_3}^q \rangle = 0$ при $q + l_1 + l_2 + l_3 > 0$, то получаемое осредненное уравнение (1.7) является уравнением Эйлера для некоторого функционала, и, следовательно, постоянные матрицы $h_{l_1 l_2 l_3}^q$ удовлетворяют соотношению

$$(h_{l_1 l_2 l_3}^q)^T = (-1)^{l_1+l_2+l_3} h_{l_1 l_2 l_3}^q, \quad (1.9)$$

то есть они симметричны при $l_1 + l_2 + l_3$ четном и косимметричны при $l_1 + l_2 + l_3$ нечетном.

2. Путем введения новой неизвестной функции \mathbf{w} :

$$\mathbf{v} \sim \sum_{q, l_1, l_2, l_3 \geq 0} \varepsilon^{q+l_1+l_2+l_3} d_{l_1 l_2 l_3}^q \frac{\partial^{q+l_1+l_2+l_3} \mathbf{w}}{\partial t^q \partial x_1^{l_1} \partial x_2^{l_2} \partial x_3^{l_3}},$$

где $d_{l_1 l_2 l_3}^q$ – постоянные матрицы, $d_{000}^0 = E$, может быть получено уравнение следующего вида относительно \mathbf{w} :

$$L^B \mathbf{w} \sim -\hat{\rho} \frac{\partial^2 \mathbf{w}}{\partial t^2} + \sum_{l_1+l_2+l_3 \geq 2} \varepsilon^{l_1+l_2+l_3-2} \hat{h}_{l_1 l_2 l_3}^0 \frac{\partial^{l_1+l_2+l_3} \mathbf{w}}{\partial x_1^{l_1} \partial x_2^{l_2} \partial x_3^{l_3}} \sim 0, \quad (1.10)$$

где $\hat{\rho} = \langle \rho \rangle$, а постоянные матрицы $\hat{h}_{l_1 l_2 l_3}^0$ удовлетворяют соотношению

$$(\hat{h}_{l_1 l_2 l_3}^0)^T = (-1)^{l_1+l_2+l_3} \hat{h}_{l_1 l_2 l_3}^0. \quad (1.11)$$

Уравнение (1.10) отличается от уравнения (1.7) тем, что оно содержит только одно слагаемое, содержащее дифференцирование по времени. В скалярном случае (размерность вектора \mathbf{u} равна единице) из (1.9), (1.11) следует, что

$$h_{l_1 l_2 l_3}^q = 0, \quad \hat{h}_{l_1 l_2 l_3}^0 = 0 \quad \text{при } l_1 + l_2 + l_3 \text{ нечетном.} \quad (1.12)$$

Далее предполагаем исходную систему (1.1) масштабированной так, что $\hat{\rho} = \langle \rho \rangle = 1$, и рассматриваем случай слоистой (стратифицированной) среды, когда $\rho = \rho(y)$, $A_{ij} = A_{ij}(y)$, где $y = x_1/\varepsilon$.

Опишем некоторые этапы преобразования (1.7) к виду (1.10) в случае, когда \mathbf{v} не зависит от x_3 , а осредненное уравнение (1.7) имеет вид

$$-\frac{\partial^2 \mathbf{v}}{\partial t^2} + h_{20}^0 \frac{\partial^2 \mathbf{v}}{\partial x_1^2} + h_{02}^0 \frac{\partial^2 \mathbf{v}}{\partial x_2^2} + \varepsilon^2 (h_{00}^4 \frac{\partial^4 \mathbf{v}}{\partial t^4} + h_{20}^2 \frac{\partial^4 \mathbf{v}}{\partial t^2 \partial x_1^2} + h_{02}^2 \frac{\partial^4 \mathbf{v}}{\partial t^2 \partial x_2^2} + h_{40}^0 \frac{\partial^4 \mathbf{v}}{\partial x_1^4} + h_{22}^0 \frac{\partial^4 \mathbf{v}}{\partial x_1^2 \partial x_2^2} + h_{04}^0 \frac{\partial^4 \mathbf{v}}{\partial x_2^4}) + O(\varepsilon^4) = 0. \quad (1.13)$$

Уравнения вида (1.13) будут получаться в задачах, рассматриваемых в разделах 2 (см. (2.29)) и 3.

Положим $\mathbf{v} = \mathbf{v}_1 + \frac{1}{2}\varepsilon^2 h_{00}^4 \frac{\partial^2 \mathbf{v}_1}{\partial t^2}$ и умножим уравнение (1.13) слева на оператор

$$E + \frac{1}{2}\varepsilon^2 h_{00}^4 \frac{\partial^2}{\partial t^2}.$$

Получим уравнение

$$L^A \mathbf{v}_1 = -\frac{\partial^2 \mathbf{v}_1}{\partial t^2} + h_{20}^0 \frac{\partial^2 \mathbf{v}_1}{\partial x_1^2} + h_{02}^0 \frac{\partial^2 \mathbf{v}_1}{\partial x_2^2} + \varepsilon^2 (\tilde{h}_{20}^2 \frac{\partial^4 \mathbf{v}_1}{\partial t^2 \partial x_1^2} + \tilde{h}_{02}^2 \frac{\partial^4 \mathbf{v}_1}{\partial t^2 \partial x_2^2} + h_{40}^0 \frac{\partial^4 \mathbf{v}_1}{\partial x_1^4} + h_{22}^0 \frac{\partial^4 \mathbf{v}_1}{\partial x_1^2 \partial x_2^2} + h_{04}^0 \frac{\partial^4 \mathbf{v}_1}{\partial x_2^4}) + O(\varepsilon^4) = 0,$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{h}_{20}^2 &= h_{20}^2 + \frac{1}{2} (h_{20}^0 h_{00}^4 + h_{00}^4 h_{20}^0), \\ \tilde{h}_{02}^2 &= h_{02}^2 + \frac{1}{2} (h_{02}^0 h_{00}^4 + h_{00}^4 h_{02}^0). \end{aligned}$$

Далее положим

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{w} + \frac{1}{2}\varepsilon^2 \left(\tilde{h}_{20}^2 \frac{\partial^2 \mathbf{w}}{\partial x_1^2} + \tilde{h}_{02}^2 \frac{\partial^2 \mathbf{w}}{\partial x_2^2} \right)$$

и умножим уравнение слева на оператор

$$E + \frac{1}{2}\varepsilon^2 \left(\tilde{h}_{20}^2 \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \tilde{h}_{02}^2 \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right).$$

В результате получим уравнение четвертого порядка точности по ε :

$$-\frac{\partial^2 \mathbf{w}}{\partial t^2} + h_{20}^0 \frac{\partial^2 \mathbf{w}}{\partial x_1^2} + h_{02}^0 \frac{\partial^2 \mathbf{w}}{\partial x_2^2} + \varepsilon^2 \left(\hat{h}_{40}^0 \frac{\partial^4 \mathbf{w}}{\partial x_1^4} + \hat{h}_{22}^0 \frac{\partial^4 \mathbf{w}}{\partial x_1^2 \partial x_2^2} + \hat{h}_{04}^0 \frac{\partial^4 \mathbf{w}}{\partial x_2^4} \right) = 0, \quad (1.14)$$

где коэффициенты вычисляются через исходные по формулам

$$\begin{aligned} \hat{h}_{40}^0 &= h_{40}^0 + \frac{1}{2} (h_{20}^0 h_{20}^2 + h_{20}^2 h_{20}^0) \\ &+ \frac{1}{4} ((h_{20}^0)^2 h_{00}^4 + 2h_{20}^0 h_{00}^4 h_{20}^0 + h_{00}^4 (h_{20}^0)^2), \end{aligned} \quad (1.15)$$

$$\begin{aligned} \widehat{h}_{22}^0 &= h_{22}^0 + \frac{1}{2} (h_{20}^0 h_{02}^2 + h_{02}^2 h_{20}^0 + h_{02}^0 h_{20}^2 + h_{20}^2 h_{02}^0) \\ &\quad + \frac{1}{4} (2(h_{02}^0 h_{00}^4 h_{20}^0 + h_{20}^0 h_{00}^4 h_{02}^0) \\ &\quad + h_{02}^0 h_{20}^0 h_{00}^4 + h_{00}^4 h_{20}^0 h_{02}^0 + h_{00}^4 h_{02}^0 h_{20}^0 + h_{20}^0 h_{02}^0 h_{00}^4), \end{aligned} \quad (1.16)$$

$$\begin{aligned} \widehat{h}_{04}^0 &= h_{04}^0 + \frac{1}{2} (h_{02}^0 h_{02}^2 + h_{02}^2 h_{02}^0) \\ &\quad + \frac{1}{4} ((h_{02}^0)^2 h_{00}^4 + 2h_{02}^0 h_{00}^4 h_{02}^0 + h_{00}^4 (h_{02}^0)^2). \end{aligned} \quad (1.17)$$

Заметим, что в соответствии с *утверждениями 1,2* все матрицы, входящие в эти соотношения, симметричны. Введем следующие обозначения

$$\begin{aligned} R &= \rho E - \widehat{\rho} E, \quad \widehat{A}_{11} = \langle A_{11}^{-1} \rangle^{-1}, \quad Q_1 = A_{11}^{-1} \widehat{A}_{11} - E, \\ \widehat{A}_{22} &= \langle A_{22} \rangle, \quad Q_2 = A_{22} - \widehat{A}_{22}, \quad \widetilde{Q}_2 = \widehat{A}_{22}^{-1} Q_2 \\ \widehat{A}_{33} &= \langle A_{33} \rangle, \quad Q_3 = A_{33} - \widehat{A}_{33}, \quad \widetilde{Q}_3 = \widehat{A}_{33}^{-1} Q_3. \end{aligned}$$

При $\langle g(y) \rangle = 0$ определим оператор J равенствами

$$\langle J(g) \rangle = 0, \quad (J(g))' = g.$$

В дальнейших построениях часто используются неравенство для скалярного произведения

$$\langle fg \rangle^2 \leq \langle f^2 \rangle \langle g^2 \rangle \quad (1.18)$$

(равенство имеет место лишь в случае коллинеарности f и g), а также следующая лемма.

Лемма [3]. При $\langle B(y) \rangle = 0$ справедливо равенство

$$\langle AJ(B) \rangle = - \langle J(A - \langle A \rangle) B \rangle.$$

В [3] были получены необходимые для нас в дальнейшем равенства

$$\begin{aligned} h_{200}^0 &= \widehat{A}_{11}, \quad h_{k00}^0 = 0, \quad \forall k > 2, \\ h_{000}^4 &= \langle J(R) A_{11}^{-1} J(R) \rangle - \langle A_{11}^{-1} J(R) \rangle \widehat{A}_{11} \langle A_{11}^{-1} J(R) \rangle, \end{aligned} \quad (1.19)$$

$$h_{200}^2 = \langle J(Q_1^T) \rho J(Q_1) \rangle - \langle J(R) J(Q_1) \rangle - \langle J(Q_1^T) J(R) \rangle, \quad (1.20)$$

$$N_{000}^2 = J(A_{11}^{-1} (J(R) - \widehat{A}_{11} \langle A_{11}^{-1} J(R) \rangle)), \quad N_{200}^0 = -J^2(Q_1). \quad (1.21)$$

Из (1.15) в скалярном случае получаем равенство

$$\widehat{h}_{400}^0 = \widehat{A}_{11} (\langle J(Q - R) \rho J(Q - R) \rangle - \langle J(Q - R) \rho \rangle \langle J(Q - R) \rho \rangle). \quad (1.22)$$

Из неравенства для скалярного произведения (1.18) следует, что $\widehat{h}_{400}^0 \geq 0$.

В [2] для скалярного случая (размерность вектора \mathbf{u} равна 1) показано, что для произвольной периодической среды (не обязательно слоистой структуры) $h_{000}^4 \geq 0$.

2. ВОЛНЫ В НАПРАВЛЕНИИ, ПАРАЛЛЕЛЬНОМ СЛОЯМ

В этом разделе для случая, когда \mathbf{u} – вектор, рассматривается распространение волн в направлении оси x_2 при дополнительном предположении $A_{12} = A_{21}^T = 0$. Вычисляются и исследуются коэффициенты уравнений (1.13) и (1.14).

В рассматриваемом нами случае слоистой среды $N_{l_1 l_2 l_3}^q = N_{l_1 l_2 l_3}^q(y)$ и соотношения (1.4) приобретают вид

$$\begin{aligned} H_{l_1 l_2 l_3}^q &= -\rho N_{l_1 l_2 l_3}^{q-2} + \frac{\partial}{\partial y} \left(A_{11} \frac{\partial N_{l_1 l_2 l_3}^q}{\partial y} \right) + A_{i1} \frac{\partial N_{l_1 - \delta_{i1}, l_2 - \delta_{i2}, l_3 - \delta_{i3}}^q}{\partial y} \\ &+ \frac{\partial}{\partial y} \left(A_{1j} N_{l_1 - \delta_{j1}, l_2 - \delta_{j2}, l_3 - \delta_{j3}}^q \right) + A_{ij} N_{l_1 - \delta_{i1} - \delta_{j1}, l_2 - \delta_{i2} - \delta_{j2}, l_3 - \delta_{i3} - \delta_{j3}}^q \end{aligned} \quad (2.23)$$

Выпишем эти равенства при $l_1 = l_3 = 0$:

$$H_{0l_2 0}^q = -\rho N_{0l_2 0}^{q-2} + \frac{\partial}{\partial y} \left(A_{11} \frac{\partial N_{0l_2 0}^q}{\partial y} \right) + A_{22} N_{0l_2 0}^q = h_{0l_2}^q = \text{const}. \quad (2.24)$$

Для удобства в разделах 2 и 3 далее опускаем последний индекс 0 у $H_{l_1 l_2 0}^q, N_{l_1 l_2 0}^q, H_{l_1 l_2 0}^q, C_{l_1 l_2 0}^q$. При $q = 0, l = 1$ имеем уравнение

$$H_{01}^0 = \frac{\partial}{\partial y} \left(A_{11} \frac{\partial N_{01}^0}{\partial y} \right) = h_{01}^0.$$

Отсюда получаем, что $h_{01}^0 = 0$ и $N_{01}^0 = 0$. При $q = 0, l = 2$ имеем уравнение

$$H_{02}^0 = \frac{\partial}{\partial y} \left(A_{11} \frac{\partial N_{02}^0}{\partial y} \right) + A_{22} = h_{02}^0.$$

Последовательно получаем

$$\begin{aligned} h_{02}^0 &= \langle A_{22} \rangle, \quad A_{11} \frac{\partial N_{02}^0}{\partial y} = -J(Q_2) + C_{02}^0, \\ \frac{\partial N_{02}^0}{\partial y} &= -(A_{11})^{-1} J(Q_2) + A_{11}^{-1} C_{02}^0, \quad C_{02}^0 = \widehat{A}_{11} \langle A_{11}^{-1} J(Q_2) \rangle. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Таким образом,

$$N_{02}^0 = J(A_{11}^{-1} \widehat{A}_{11} \langle A_{11}^{-1} J(Q_2) \rangle - A_{11}^{-1} J(Q_2)). \quad (2.26)$$

Аналогично имеем

$$h_{04}^0 = \langle A_{22} N_{02}^0 \rangle.$$

Подставляя выражение N_{02}^0 , получим

$$h_{04}^0 = \langle J(Q_2) A_{11}^{-1} J(Q_2) \rangle - \langle J(Q_2) A_{11}^{-1} \widehat{A}_{11} \langle A_{11}^{-1} J(Q_2) \rangle \rangle. \quad (2.27)$$

Согласно (2.24) с учетом (1.21) и (2.26) имеем

$$\begin{aligned} h_{02}^2 &= \langle A_{22} N_{00}^2 \rangle - \langle \rho N_{02}^0 \rangle = -(\langle J(R) A_{11}^{-1} J(Q_2) \rangle + \langle J(Q_2) A_{11}^{-1} J(R) \rangle) \\ &+ (\langle J(R) A_{11}^{-1} \widehat{A}_{11} \langle A_{11}^{-1} J(Q_2) \rangle + \langle J(Q_2) A_{11}^{-1} \widehat{A}_{11} \langle A_{11}^{-1} J(R) \rangle \rangle). \end{aligned} \quad (2.28)$$

Из структуры рекурсии (2.24) видно, что $N_{0l}^q = 0$, $h_{0l}^q = 0$, если хотя бы одно из чисел q, l нечетно. Поэтому уравнение (1.7) имеет вид

$$-\frac{\partial^2 \mathbf{v}}{\partial t^2} + \hat{A}_{22} \frac{\partial^2 \mathbf{v}}{\partial x_2^2} + \varepsilon^2 \left(h_{00}^4 \frac{\partial^4 \mathbf{v}}{\partial t^4} + h_{02}^2 \frac{\partial^4 \mathbf{v}}{\partial t^2 \partial x_2^2} + h_{04}^0 \frac{\partial^4 \mathbf{v}}{\partial x_2^4} \right) + O(\varepsilon^4) = 0. \quad (2.29)$$

Воспользовавшись построениями п.1, получаем систему уравнений четвертого порядка точности по ε :

$$-\frac{\partial^2 \mathbf{w}}{\partial t^2} + \hat{A}_{22} \frac{\partial^2 \mathbf{w}}{\partial x_2^2} + \varepsilon^2 \hat{h}_{04}^0 \frac{\partial^4 \mathbf{w}}{\partial x_2^4} = 0, \quad (2.30)$$

где коэффициент \hat{h}_{04}^0 вычисляется из соотношений (1.17), (1.19), (2.27), (2.28). Справедливо равенство: $\hat{h}_{04}^0 = \Delta_1 - \delta_1$, где

$$\begin{aligned} \Delta_1 &= \left\langle (J(Q_2) - \hat{A}_{22}J(R))A_{11}^{-1}(J(Q_2) - \hat{A}_{22}J(R)) \right\rangle \\ &\quad + \frac{1}{2} \left(\langle J(Q_2)A_{11}^{-1}J(R) - J(R)A_{11}^{-1}J(Q_2) \rangle \hat{A}_{22} \right. \\ &\quad \left. - \hat{A}_{22} \langle J(Q_2)A_{11}^{-1}J(R) - J(R)A_{11}^{-1}J(Q_2) \rangle \right) \\ &+ \frac{1}{4} [\hat{A}_{22}^2 \langle J(R)A_{11}^{-1}J(R) \rangle - 2\hat{A}_{22} \langle J(R)A_{11}^{-1}J(R) \rangle \hat{A}_{22} + \langle J(R)A_{11}^{-1}J(R) \rangle \hat{A}_{22}^2], \\ \delta_1 &= \left\langle (J(Q_2) - \hat{A}_{22}J(R))A_{11}^{-1} \right\rangle \hat{A}_{11} \left\langle A_{11}^{-1}(J(Q_2) - \hat{A}_{22}J(R)) \right\rangle \\ &\quad + \frac{1}{2} \hat{A}_{22} [\langle J(R)A_{11}^{-1} \rangle \hat{A}_{11} \langle A_{11}^{-1}J(Q_2) \rangle - \langle J(Q_2)A_{11}^{-1} \rangle \hat{A}_{11} \langle J(R)A_{11}^{-1} \rangle] \\ &\quad + \frac{1}{2} [\langle J(Q_2)A_{11}^{-1} \rangle \hat{A}_{11} \langle J(R)A_{11}^{-1} \rangle - \langle J(R)A_{11}^{-1} \rangle \hat{A}_{11} \langle A_{11}^{-1}J(Q_2) \rangle] \hat{A}_{22} \\ &\quad + \frac{1}{4} [\hat{A}_{22}^2 \langle J(R)A_{11}^{-1} \rangle \hat{A}_{11} \langle J(R)A_{11}^{-1} \rangle - 2\hat{A}_{22} \langle J(R)A_{11}^{-1} \rangle \hat{A}_{11} \langle J(R)A_{11}^{-1} \rangle \hat{A}_{22} \\ &\quad + \langle J(R)A_{11}^{-1} \rangle \hat{A}_{11} \langle J(R)A_{11}^{-1} \rangle \hat{A}_{22}^2]. \end{aligned}$$

Если матрицы A_{22} и A_{11} перестановочны, то полученное соотношение записывается в виде

$$\begin{aligned} \hat{h}_{04}^0 &= \left\langle (J(Q_2) - \hat{A}_{22}J(R))A_{11}^{-1}(J(Q_2) - \hat{A}_{22}J(R)) \right\rangle - \\ &\left\langle (J(Q_2) - \hat{A}_{22}J(R))A_{11}^{-1} \right\rangle \hat{A}_{11} \left\langle A_{11}^{-1}(J(Q_2) - \hat{A}_{22}J(R)) \right\rangle. \end{aligned} \quad (2.31)$$

Отыскивая решение системы (2.30) в виде гармонической волны $e^{i(kx_2 - \omega t)} \mathbf{e}$, получаем задачу на собственные значения

$$c^2 \mathbf{e} = (\hat{A}_{22} - (\varepsilon k)^2 \hat{h}_{04}^0) \mathbf{e}; \text{ здесь } c = \omega/k - \text{ скорость распространения волны.}$$

Матрицы A_{11} и A_{22} перестановочны, в частности, когда они диагональные, то есть исходная задача распадается на скалярные задачи. Тогда матрица \hat{h}_{04}^0 диагональная и из соотношения (2.31) и неравенства для скалярного произведения (1.18) следует, что все ее диагональные элементы неотрицательны. Таким образом, в этом случае наличие дисперсии, вообще говоря, приводит к замедлению скорости распространения гармонических волн с ростом частоты.

Используя непрерывность собственных значений матрицы от ее элементов, можно показать, что эффект замедления скорости распространения всех гармонических волн с ростом частоты может иметь место и для системы уравнений общего вида (1.1) (с $A_{21} = (A_{12})^T \neq 0$) при малых значениях $\|A_{21}\|$.

При размерности вектора \mathbf{v} равной 2 можно привести пример, когда матрица \widehat{h}_{04}^0 имеет следующий вид: диагональные элементы нулевые, а внедиагональные – равные между собой ненулевые. Для этого возьмем произвольную четную функцию $\rho(y) \neq \text{const}$, диагональную постоянную матрицу \widehat{A}_{22} с диагональными элементами $d_1 \neq d_2$ и положим $A_{22}(y) = \widehat{A}_{22} + (\rho(y) - \widehat{\rho})\widehat{A}_{22}$. Матрицу $A_{11}^{-1}(y)$ выберем так, чтобы матрица $Q = \|q_{ij}\| = \langle A_{11}^{-1}(J(R))^2 \rangle$ удовлетворяла условию $q_{12} \neq 0$. Непосредственными вычислениями устанавливается, что матрица \widehat{h}_{04}^0 будет искомой; ее диагональные элементы равны нулю, а недиагональные элементы равны $d_3 = -q_{12}(d_1 - d_2)^2/4$.

Отыскивая решение уравнения (2.30) в виде гармонической волны $e^{i(kx_2 - \omega t)}\mathbf{e}$, получаем уравнение относительно скорости распространения волны $(c^2 - d_1)(c^2 - d_2) = (d_3 \varepsilon k)^2$.

Отсюда следует, что наличие членов с четвертой производной приводит к уменьшению меньшей из скоростей распространения гармонических волн и возрастанию большей с ростом εk .

Используя непрерывную зависимость собственных значений матрицы от ее элементов, можно построить пример системы уравнений общего вида (1.1) (с $A_{21} = (A_{12})^T \neq 0$) с тем же эффектом уменьшения меньшей из скоростей распространения гармонических волн и возрастания большей с ростом частоты.

3. РАСПРОСТРАНЕНИЕ ВОЛН В ПРОИЗВОЛЬНОМ НАПРАВЛЕНИИ ДЛЯ ДВУМЕРНОГО СКАЛЯРНОГО СЛУЧАЯ

Далее рассматривается случай, когда размерность вектора \mathbf{u} равна 1, причем $A_{12} = A_{21} = 0$, как и в разделе 2. Сюда относится, в частности, задача о распространении акустических волн в слоистой локально-изотропной жидкости. Покажем, что в рассматриваемом случае уравнение (1.7) имеет вид (1.13). Распишем соотношения (2.23).

$$H_{l_1 l_2}^q = -\rho N_{l_1 l_2}^{q-2} + \frac{\partial}{\partial y} \left(A_{11} \frac{\partial N_{l_1 l_2}^q}{\partial y} \right) + A_{11} \frac{\partial N_{l_1-1, l_2}^q}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} \left(A_{11} N_{l_1-1, l_2}^q \right) + A_{11} N_{l_1-2, l_2}^q + A_{22} N_{l_1, l_2-2}^q.$$

Положим $N_{l_1 l_2}^q = 0$ при q четных и l_2 нечетных. Используя соотношения $N_{0 l_2}^q = 0$, если l_2 нечетно, $N_{l_1 l_2}^q = 0$, если хотя бы один из индексов q, l_1, l_2 отрицателен, можно проверить, что тогда:

$$H_{l_1 l_2}^q = 0 \quad \text{при } q \text{ четных и } l_2 \text{ нечетных,}$$

и, следовательно,

$$h_{l_1 l_2}^q = 0 \quad \text{при } q \text{ четных и } l_2 \text{ нечетных.}$$

Отсюда следуют, в частности, равенства

$$h_{11}^0 = 0, \quad h_{13}^0 = 0, \quad h_{31}^0 = 0, \quad h_{15}^0 = 0, \quad h_{33}^0 = 0, \quad h_{51}^0 = 0, \quad h_{11}^2 = 0, \quad h_{13}^2 = 0, \quad h_{31}^2 = 0.$$

Из соотношений (1.9) следует, что

$$\begin{aligned} h_{03}^0 = 0, \quad h_{12}^0 = 0, \quad h_{21}^0 = 0, \quad h_{30}^0 = 0, \quad h_{05}^0 = 0, \quad h_{14}^0 = 0, \quad h_{23}^0 = 0 \\ h_{32}^0 = 0, \quad h_{41}^0 = 0, \quad h_{50}^0 = 0, \quad h_{03}^2 = 0, \quad h_{12}^2 = 0, \quad h_{21}^2 = 0, \quad h_{30}^2 = 0. \end{aligned}$$

Воспользовавшись также (1.8), получаем, что осредненное уравнение (1.7) имеет вид (1.13). Следовательно, для исследования распространения волн в произвольном направлении в плоскости (x_1, x_2) требуется иметь в распоряжении коэффициенты \widehat{h}_{04}^0 , \widehat{h}_{22}^0 и \widehat{h}_{40}^0 , вычисляемые через коэффициенты уравнения (1.7) по формулам (1.15) – (1.17).

Коэффициенты \widehat{h}_{04}^0 , \widehat{h}_{40}^0 уже вычислены нами ранее ((1.22), (2.31)). Для нахождения \widehat{h}_{22}^0 из (1.16) необходимо вычислить h_{22}^0 .

Из (1.6) имеем

$$h_{22}^0 = \langle A_{22} N_{20}^0 \rangle + \left\langle A_{11} \left(\frac{\partial N_{12}^0}{\partial y} + N_{02}^0 \right) \right\rangle.$$

Первое слагаемое с учетом (1.21) записывается в виде

$$\langle A_{22} N_{20}^0 \rangle = - \langle A_{22} J^2(Q_1) \rangle = \langle J(Q_2) J(Q_1) \rangle.$$

Для нахождения второго слагаемого рассмотрим уравнение

$$H_{12}^0 = \frac{\partial}{\partial y} \left(A_{11} \frac{\partial N_{12}^0}{\partial y} + N_{02}^0 \right) + A_{11} \frac{\partial N_{02}^0}{\partial y} + A_{22} N_{10}^0 = h_{12}^0.$$

Отсюда следует, что

$$A_{11} \left(\frac{\partial N_{12}^0}{\partial y} + N_{02}^0 \right) = C_{02}^0 + J(h_{12}^0 - (A_{11} \frac{\partial N_{02}^0}{\partial y} + A_{22} N_{10}^0)).$$

После домножения на A_{11}^{-1} и применения оператора $\langle \cdot \rangle$ имеем

$$0 = \langle (A_{11})^{-1} \rangle C_{02}^0 + \left\langle (A_{11})^{-1} J(h_{12}^0 - (A_{11} \frac{\partial N_{02}^0}{\partial y} + A_{22} N_{10}^0)) \right\rangle.$$

Отсюда получаем равенство

$$\begin{aligned} C_{02}^0 &= - \left\langle \widehat{A}_{11} (A_{11})^{-1} J(h_{12}^0 - (A_{11} \frac{\partial N_{02}^0}{\partial y} + A_{22} N_{10}^0)) \right\rangle \\ &= - \left\langle Q_1^T J(h_{12}^0 - (A_{11} \frac{\partial N_{02}^0}{\partial y} + A_{22} N_{10}^0)) \right\rangle \\ &= - \left\langle J(Q_1^T) (A_{11} \frac{\partial N_{02}^0}{\partial y} + A_{22} N_{10}^0) \right\rangle = - \left\langle J(Q_1^T) A_{11} \frac{\partial N_{02}^0}{\partial y} \right\rangle - \langle J(Q_1^T) A_{11} J(Q_1) \rangle. \end{aligned}$$

Согласно (2.25) имеем $A_{11} \frac{\partial N_{02}^0}{\partial y} = C_{02}^0 - J(Q_2)$; поэтому

$$-\left\langle J(Q_1^T)A_{11}\frac{\partial N_{02}^0}{\partial y}\right\rangle = \langle J(Q_1^T)J(Q_2)\rangle. \text{ В итоге получаем}$$

$$h_{22}^0 = -\langle J(Q_1^T)A_{22}J(Q_1)\rangle + \langle J(Q_1^T)J(Q_2)\rangle + \langle J(Q_2)J(Q_1)\rangle. \quad (3.32)$$

Все дальнейшие преобразования относятся к скалярному случаю.

Тогда $h_{22}^0 = -\langle A_{22}(J(Q_1))^2\rangle + 2\langle J(Q_2)J(Q_1)\rangle$.

Далее регулярно используются равенства $\langle J(A)\rangle = 0 \quad \forall A$,

$$\langle (Q_1 - R)(J(Q_1 - R))^k \rangle = \left\langle \left(\frac{1}{k+1} J(Q_1 - R)^{k+1} \right)' \right\rangle = 0 \quad \forall k \geq 0, \quad (3.33)$$

$$\langle (\widehat{A}_{11}A_{11}^{-1} - E)(J(Q_1))^k \rangle = \langle Q_1(J(Q_1))^k \rangle = \left\langle \left(\frac{1}{k+1} (J(Q_1))^{k+1} \right)' \right\rangle = 0 \quad \forall k \geq 0.$$

Первый член в выражении h_{22}^0 (3.32) преобразуем следующим образом:

$$\begin{aligned} -\langle A_{22}(J(Q_1))^2 \rangle &= -\widehat{A}_{22} \langle (J(Q_1))^2 \rangle - \langle J'(Q_2)(J(Q_1))^2 \rangle = \\ &= -\widehat{A}_{22} \langle (J(Q_1))^2 \rangle + 2\langle J(Q_2)J(Q_1)Q_1 \rangle. \end{aligned}$$

Поэтому $h_{22}^0 = -\widehat{A}_{22} \langle (J(Q_1))^2 \rangle + 2\widehat{A}_{11} \langle (A_{11})^{-1}J(Q_2)J(Q_1)\rangle$.

Теперь преобразуем выражения для h_{20}^2 и h_{02}^2 . Из (1.20) в скалярном случае получаем $h_{20}^2 = \langle \rho(J(Q_1))^2 \rangle - 2\langle J(R)J(Q_1)\rangle$. Отсюда

$$\begin{aligned} h_{20}^2 &= \langle (J(Q_1))^2 \rangle + \langle J'(R)(J(Q_1))^2 \rangle - 2\langle J(R)J(Q_1)\rangle \\ &= \langle (J(Q_1))^2 \rangle - 2\langle Q_1J(R)J(Q_1)\rangle - 2\langle J(R)J(Q_1)\rangle \\ &= \langle (J(Q_1))^2 \rangle - 2\widehat{A}_{11} \langle (A_{11})^{-1}J(R)J(Q_1)\rangle. \end{aligned}$$

Наконец, вследствие (2.28) имеем

$$h_{02}^2 = -2\langle J(R)A_{11}^{-1}J(Q_2)\rangle + \langle J(Q_2)A_{11}^{-1}J(R)\rangle + 2\langle J(R)A_{11}^{-1}\widehat{A}_{11}\langle A_{11}^{-1}J(Q_2)\rangle\rangle;$$

кроме того, $h_{20}^0 = \widehat{A}_{11}$, $h_{02}^0 = \widehat{A}_{22}$, а $h_{00}^4 = \langle A_{11}^{-1}(J(R))^2 \rangle - \widehat{A}_{11} \langle A_{11}^{-1}J(R)\rangle^2$ вследствие (1.19). Подставляя в (1.16) полученные соотношения, а также выражение для h_{00}^4 (1.19), после цепочки преобразований получаем

$$\widehat{h}_{22}^0 = \Delta_2 - \delta_2, \quad \text{где}$$

$$\begin{aligned} \Delta_2 &= 2\widehat{A}_{11} \langle A_{11}^{-1}J(Q_1)J(Q_2)\rangle - 2\widehat{A}_{11}\widehat{A}_{22} \langle A_{11}^{-1}J(\widetilde{Q}_2)J(R)\rangle \\ &\quad - 2\widehat{A}_{11}\widehat{A}_{22} \langle (A_{11})^{-1}J(R)J(Q_1)\rangle + 2\widehat{A}_{11}\widehat{A}_{22} \langle (A_{11})^{-1}(J(R))^2 \rangle \\ &= 2\widehat{A}_{11}\widehat{A}_{22} \langle (A_{11})^{-1}(J(Q_1 - R))(J(\widetilde{Q}_2 - R)) \rangle, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \delta_2 &= -2\widehat{A}_{11}^2\widehat{A}_{22} \langle (A_{11})^{-1}J(R)\rangle \langle (A_{11})^{-1}J(\widetilde{Q}_2)\rangle \\ + 2\widehat{A}_{11}^2\widehat{A}_{22} \langle (A_{11})^{-1}(J(R))^2 \rangle &= 2\widehat{A}_{11}^2\widehat{A}_{22} \langle (A_{11})^{-1}(J(Q_1 - R)) \rangle \langle (A_{11})^{-1}(J(\widetilde{Q}_2 - R)) \rangle. \end{aligned}$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} \hat{h}_{22}^0 &= 2[\hat{A}_{11}\hat{A}_{22} \langle (A_{11})^{-1}J(Q_1 - R)J(\tilde{Q}_2 - R) \rangle \\ &- (\hat{A}_{11})^2\hat{A}_{22} \langle (A_{11})^{-1}J(Q_1 - R) \rangle \langle A_{11}^{-1}J(\tilde{Q}_2 - R) \rangle]. \end{aligned}$$

Воспользовавшись соотношением (3.33), преобразуем выражение (1.22) к виду

$$\hat{h}_{40}^0 = \hat{A}_{11}^2 \langle A_{11}^{-1}(J(Q_1 - R))^2 \rangle - \hat{A}_{11}^3 \langle A_{11}^{-1}J(Q_1 - R) \rangle^2.$$

Кроме того, вследствие (2.31) имеем

$$\hat{h}_{04}^0 = \hat{A}_{22}^2 \langle A_{11}^{-1}(J(\tilde{Q}_2 - R))^2 \rangle - \hat{A}_{11}\hat{A}_{22}^2 \langle A_{11}^{-1}J(\tilde{Q}_2 - R) \rangle^2.$$

Подставим в уравнение (1.14) решение вида бегущей гармонической волны $w = e^{i(k(\theta_1 x_1 + \theta_2 x_2) - \omega t)}$. Получим равенство

$$c^2 = \frac{\omega^2}{k^2} = (\theta_1^2 \hat{A}_{11} + \theta_2^2 \hat{A}_{22}) - (\varepsilon k)^2 (\hat{h}_{40}^0 \theta_1^4 + \hat{h}_{22}^0 \theta_1^2 \theta_2^2 + \hat{h}_{04}^0 \theta_2^4).$$

Введем обозначение

$$S(\theta_1, \theta_2) = \hat{h}_{40}^0 \theta_1^4 + \hat{h}_{22}^0 \theta_1^2 \theta_2^2 + \hat{h}_{04}^0 \theta_2^4.$$

Подставим в выражение $S(\theta_1, \theta_2)$ вычисленные выше значения коэффициентов $\hat{h}_{40}^0, \hat{h}_{22}^0, \hat{h}_{04}^0$. Можно проверить, что это выражение представимо в виде

$$S(\theta_1, \theta_2) = \langle A_{11}^{-1}Z^2 \rangle - \hat{A}_{11} \langle A_{11}^{-1}Z \rangle^2,$$

$$\text{где } Z = \theta_1^2 \hat{A}_{11}(J(Q_1 - R)) + \theta_2^2 \hat{A}_{22}(J(\tilde{Q}_2 - R)).$$

Воспользовавшись неравенством для скалярного произведения (1.18) при $f = A_{11}^{-1/2}$, $g = A_{11}^{-1/2}Z$, получаем, что $S(\theta_1, \theta_2) \geq 0$. Таким образом, справедлива

Теорема 1. При условии, что \mathbf{w} – скаляр, скорость распространения гармонических волн – решений уравнения (1.14) – не возрастает с ростом ω независимо от направления.

4. ТРЕХМЕРНЫЙ СКАЛЯРНЫЙ СЛУЧАЙ

Для скалярного случая исследуем распространение волн в направлении, задаваемом произвольным вектором единичной длины $(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$ в случае уравнения

$$\begin{aligned} -\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \frac{\partial}{\partial x_1} \left(A_{11} \frac{\partial u}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left(A_{22} \frac{\partial u}{\partial x_2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_3} \left(A_{33} \frac{\partial u}{\partial x_3} \right) \\ + \frac{\partial}{\partial x_3} \left(A_{32} \frac{\partial u}{\partial x_2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_3} \left(A_{33} \frac{\partial u}{\partial x_3} \right) = 0. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Для исследования процесса распространения волн в направлении, задаваемом вектором $(\theta_1, \theta_2, 0)$, следует вычислить значения коэффициентов $h_{l_1, l_2, 0}^q$. Выпишем соотношения (2.23) при $l_3 = 0$ для слоистой среды в конкретном случае уравнения (4.34). Получим

$$\begin{aligned} H_{l_1, l_2, 0}^q &= -\rho N_{l_1, l_2, 0}^{q-2} + \frac{\partial}{\partial y} \left(A_{11} \frac{\partial N_{l_1, l_2, 0}^q}{\partial y} \right) + A_{11} \frac{\partial N_{l_1-1, l_2, 0}^q}{\partial y} + \\ &\frac{\partial}{\partial y} \left(A_{11} N_{l_1-1, l_2, 0}^q \right) + A_{11} N_{l_1-2, l_2, 0}^q + A_{22} N_{l_1, l_2-2, 0}^q + \\ &A_{23} (N_{l_1, l_2-1, -1}^q + N_{l_1, l_2-1, -1}^q) + A_{33} N_{l_1, l_2, -2}^q = h_{l_1, l_2, 0}^q. \end{aligned} \quad (4.35)$$

Поскольку по определению $N_{l_1, l_2, l_3}^q = 0$, если хотя бы один из индексов отрицателен, то формулы (4.35) могут быть записаны в виде

$$\begin{aligned} H_{l_1, l_2, 0}^q &= -\rho N_{l_1, l_2, 0}^{q-2} + \frac{\partial}{\partial y} \left(A_{11} \frac{\partial N_{l_1, l_2, 0}^q}{\partial y} \right) + A_{11} \frac{\partial N_{l_1-1, l_2, 0}^q}{\partial y} + \\ &\frac{\partial}{\partial y} \left(A_{11} N_{l_1-1, l_2, 0}^q \right) + A_{11} N_{l_1-2, l_2, 0}^q + A_{22} N_{l_1, l_2-2, 0}^q = h_{l_1, l_2, 0}^q. \end{aligned}$$

Эти выражения имеют тот же вид, что и соответствующие соотношения для случая двух пространственных переменных при $A_{12} = A_{21} = 0$, рассмотренного в разделах 2, 3. Поэтому осредненным уравнением порядка точности $O(\varepsilon^4)$, описывающим распространение волн в плоскости x_1, x_2 , является уравнение (1.14) с коэффициентами, вычисляемыми по тем же формулам, что и в разделе 3.

Рассмотрим теперь распространение волн в направлении, задаваемом вектором единичной длины $(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$ при $\theta_2 \neq 0, \theta_3 \neq 0$. Произведем замену независимых переменных

$$x_1^n = x_1, \quad x_2^n = \frac{\theta_2 x_2 + \theta_3 x_3}{\sqrt{\theta_2^2 + \theta_3^2}}, \quad x_3^n = \frac{-\theta_3 x_2 + \theta_2 x_3}{\sqrt{\theta_2^2 + \theta_3^2}}. \quad (4.36)$$

Далее сохраняем за x_1 старое обозначение. Тогда рассматриваемое уравнение запишется в виде

$$\begin{aligned} -\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \frac{\partial}{\partial x_1} \left(A_{11} \frac{\partial u}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2^n} \left(A_{22}^n \frac{\partial u}{\partial x_2^n} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2^n} \left(A_{23}^n \frac{\partial u}{\partial x_3^n} \right) \\ + \frac{\partial}{\partial x_3^n} \left(A_{32}^n \frac{\partial u}{\partial x_2^n} \right) + \frac{\partial}{\partial x_3^n} \left(A_{33}^n \frac{\partial u}{\partial x_3^n} \right) = 0, \end{aligned} \quad (4.37)$$

где

$$\begin{aligned} A_{22}^n &= \frac{\theta_2^2 A_{22} + 2\theta_2 \theta_3 A_{23} + \theta_3^2 A_{33}}{\theta_2^2 + \theta_3^2}, \quad A_{23}^n = A_{32}^n = \frac{-\theta_2 \theta_3 A_{22} + (\theta_2^2 - \theta_3^2) A_{23} + \theta_2 \theta_3 A_{33}}{\theta_2^2 + \theta_3^2}, \\ A_{33}^n &= \frac{\theta_3^2 A_{22} - 2\theta_2 \theta_3 A_{23} + \theta_3^2 A_{33}}{\theta_2^2 + \theta_3^2}. \end{aligned}$$

Вследствие второго из соотношений (1.2) справедливы неравенства $\underline{a} \leq A_{22}^n, \underline{a} \leq A_{33}^n$.

В новых переменных нас теперь будет интересовать распространение волн в направлении задаваемом вектором $(\theta_1, \theta_2^n, 0)$, где $\theta_2^n = \sqrt{\theta_2^2 + \theta_3^2}$. Гармоническая волна $e^{i(k(\theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \theta_3 x_3) - \omega t)}$ превратится в новых переменных в гармоническую волну $e^{i(k(\theta_1 x_1 + \theta_2^n x_2) - \omega t)}$. Соответствующее значение скорости распространения гармонических волн вычисляется по формуле

$$c^2 = \frac{\omega^2}{k^2} = \theta_1^2 \hat{A}_{11} + (\theta_2^n)^2 \hat{A}_{22} - (\varepsilon k)^2 S^n(\theta_1, \theta_2^n),$$

где

$$S^n(\theta_1, \theta_2^n) = \langle A_{11}^{-1} Z^2 \rangle - \hat{A}_{11} \langle A_{11}^{-1} Z \rangle^2, \quad Z = \theta_1^2 \hat{A}_{11} J(Q_1 - R) + (\theta_2^n)^2 \hat{A}_{22} J(\tilde{Q}_2^n - R),$$

$$\hat{A}_{22}^n = \frac{\theta_2^2 \langle A_{22} \rangle + 2\theta_2 \theta_3 \langle A_{23} \rangle + \theta_3^2 \langle A_{33} \rangle}{\theta_2^2 + \theta_3^2}, \quad Q_2^n = \frac{\theta_2^2 A_{22} + 2\theta_2 \theta_3 A_{23} + \theta_3^2 A_{33}}{\hat{A}_{22}^n}.$$

Из неравенства для скалярного произведения (1.18), как и в двумерном случае, получаем, что $S^n(\theta_1, \theta_2^n) \geq 0$.

Таким образом, доказана

Теорема 2. Для процесса распространения волн, описываемого уравнением (4.34), скорость распространения гармонических волн – решений осредненного уравнения четвертого порядка точности по ε , получаемого из (1.10) отбрасыванием членов высшего порядка, не возрастает с ростом частоты.

Утверждение теоремы верно, в частности, в случае локально-ортотропной среды с одной из плоскостей симметрии, параллельной слоям.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Bakhvalov N.S., Eglit M.E. Variational properties of averaged equations for periodic media // Proc. of the Steklov Institute of Mathematics. 1992. Issue 3. P. 3–18.
- [2] Bakhvalov N.S., Eglit M.E. Effective equations with dispersion for waves propagation in periodic media // Doklady Math. 2000. Vol. **370**, №1. P. 1–4.
- [3] Бахвалов Н.С., Эглит М.Э. Long-waves asymptotics with dispersion for the waves propagation in stratified media. Part 1. Waves orthogonal to the layers // Russian J. Numer. Analys. and Math. Modelling. 2000. **15**, №1. P. 3–14.
- [4] Bakhvalov N.S., Panasenko G.P. Homogenization. Averaging processes in periodic media. –Dordrecht: Kluwer. 1989. –366 P.

Матрично-многочленная структура в R^n

Ю. И. КУЗНЕЦОВ

Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН
E-mail:kuzn@ommfao.sssc.ru

Классическая интерпретация матрицы – представление оператора в фиксированной координатной системе. Для симметричной матрицы – это также представление квадратичной формы. В данной статье представлена новая концепция: (i) строго невырожденная матрица, (ii) неразложимые нижняя и верхняя матрицы Хессенберга и (iii) две системы специальных многочленов, все вместе представляют различные аспекты некоторого объекта, лежащего вне пространства R^n . Например, если элемент (ii) есть якобиева матрица с неотрицательным спектром, то этим объектом является колебательная система с n степенями свободы.

The classical interpretation of matrix is representation of the operator in fixed coordinate system. For a symmetric matrix this is the representation of the quadratic form as well. In the paper the new concept is presented: (i) a strongly nonsingular matrix, (ii) irreducible low and upper Hessenberg matrices and (iii) two system of special polynomials, taken together represents the different aspects of the some object exterior to the linear vector space R^n . For instance, if element (ii) is Jacobi matrix with nonsingular spectrum, then this object is the oscillation system with n degrees of freedom.

Классическая интерпретация матрицы – представление оператора в фиксированной координатной системе. Для симметричной матрицы – это также представление квадратичной формы. В данной статье развивается новая концепция: (i) строго невырожденная матрица, (ii) неразложимые нижняя и верхняя матрицы Хессенберга и (iii) две системы специальных многочленов, представляют различные стороны некоторого объекта, лежащего вне пространства R^n . Например, если элемент ii есть якобиева матрица с неотрицательным спектром, то этим объектом является колебательная система с n степенями свободы [2].

В ряде предыдущих работ [3-6] были исследованы случаи, связанные с положительно определенной, в частности ганкелевой, матрицей A . В работе снимается условие положительной определенности (что важно, например, в случае псевдоортогональных многочленов [7]) и даже симметричности матрицы. Кроме

того, получен ряд новых соотношений, детализирующих взаимосвязь всех трех элементов ((i),(ii) и (iii)), совокупность которых названа Rn-структурой.

ВВЕДЕНИЕ

В отношении строк и столбцов некоторой матрицы будем придерживаться следующих правил: $B_{\bullet k} = B e_k$, $B_{l\bullet} = e_l^T B$, где e_k есть k -й столбец единичной матрицы E , обозначают k -й столбец и l -ю строку матрицы B . В то же время B_k обозначает усеченную подматрицу k -го порядка матрицы B , получающуюся при отбрасывании строк и столбцов с номерами больше k . Также под вектором \bar{b} понимается вектор, составленный из первых компонент вектора b , а размерность его определяется из контекста.

Пусть $\mathcal{R} = (r_{ij})$ – невырожденная верхняя треугольная матрица. Как показано в [4], ей соответствует неразложимая верхняя матрица Хессенберга \mathcal{T}

$$\mathcal{T} = \begin{bmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} & \cdots & & \tau_{1n} \\ \tau_{21} & \tau_{22} & \tau_{23} & \cdots & \tau_{2n} \\ & \tau_{32} & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & \ddots & \tau_{n-1,n} \\ & & & \tau_{n,n-1} & \tau_{nn} \end{bmatrix}$$

с произвольным последним столбцом. Матрица \mathcal{T} следующим образом связывает соседние столбцы матрицы \mathcal{R} :

$$\mathcal{R}_{\bullet k+1} = \mathcal{T} \mathcal{R}_{\bullet k} = r_{11} \mathcal{T}^k e_1, \quad k = 0(1)n \quad (1)$$

(соотношение при $k = n$ включает уже окаймление матрицы \mathcal{R} , и вместо $\mathcal{R}_{\bullet n+1}$ следует читать $\bar{\mathcal{R}}_{\bullet n+1}$), а ее элементы находятся рекуррентно:

$$\tau_{lk} = \frac{\mathbf{r}_{l,k+1}}{\mathbf{r}_{kk}} - \sum_{j=m}^{k-1} \frac{\mathbf{r}_{jk}}{\mathbf{r}_{kk}} \tau_{lj}, \quad (2)$$

$$l = 1(1)k + 1, \quad k = 1(1)n, \quad m = \max(l - 1, 1).$$

В частности,

$$\begin{aligned} \tau_{k+1,k} &= \frac{\mathbf{r}_{k+1,k+1}}{\mathbf{r}_{kk}}, \\ \tau_{k,k} &= \frac{\mathbf{r}_{k,k+1}}{\mathbf{r}_{kk}} - \frac{\mathbf{r}_{k-1,k}}{\mathbf{r}_{k-1,k-1}}, \\ \tau_{k,k-1} \tau_{k-1,k} &= \frac{\mathbf{r}_{k-1,k+1}}{\mathbf{r}_{k-1,k-1}} - \frac{\mathbf{r}_{k-1,k}}{\mathbf{r}_{k-1,k-1}} \tau_{k-1,k-1} - \frac{\mathbf{r}_{k-2,k}}{\mathbf{r}_{k-2,k-2}}, \end{aligned} \quad (3)$$

$$k = 1(1)n - 1.$$

Первые $n - 1$ столбцов \mathcal{T} линейно независимы и определены однозначно. Последний столбец произволен и может быть выбран так, чтобы спектр матрицы \mathcal{T} был наперед задан. Это можно сделать следующим образом. Пусть

$$\pi_n(x) = x^n - \sum_{j=1}^n p_{n-j+1} x^{j-1}$$

является характеристическим многочленом матрицы \mathcal{T} , и $\mathcal{P} = (p_n, \dots, p_1)^T$. Рассмотрим равенство (1) при $k = n$ и вектор $\mathcal{R}_{\bullet n}$, окаймляющий матрицу \mathcal{R} , подставим в (2) при $k = n$. Благодаря тождеству Кели – Гамильтона получим [4]:

$$\mathcal{P} = \mathcal{R}^{-1} \mathcal{T} \mathcal{R}_{\bullet n}, \quad (4)$$

$$\mathcal{T}_{\bullet n} = \frac{1}{r_{nn}} (\mathcal{R} \mathcal{P} - \sum_{j=1}^{n-1} r_{jn} \mathcal{T}_{\bullet j}). \quad (5)$$

Произвольным невырожденным нижней и верхней треугольным матрицам L и R через треугольное разложение ставится в соответствие строго невырожденная матрица $A = LR$. Если A симметрична ($L^T = DR$, где D – диагональная матрица), ей соответствует фактически одна матрица Хессенберга.

В дальнейшем понадобится выражение элементов матриц L и R через окаймленные миноры матрицы A , поэтому введем окаймленную матрицу

$$A_k(m, l) = \begin{bmatrix} A_{k-1} & \bar{A}_{\bullet l} \\ \bar{A}_{m \bullet} & a_{ml} \end{bmatrix}$$

порядка k , где A_{k-1} – усеченная матрица порядка $k-1$ и $A_k(k, k) = A_k$. Как известно [1],

$$A = LDU, \quad (6)$$

где $L = (l_{ij})$, $U = (u_{ij})$, $i, j = 1(1)n$, $D = \text{diag}(d_1, \dots, d_n)$ суть нижняя и верхняя треугольные матрицы соответственно, D – диагональная, с элементами

$$\begin{aligned} l_{ij} &= |A_j(i, j)|, \\ d_i &= 1/(|A_{i-1}| |A_i|), \quad |A_0| = 1, \\ u_{ij} &= |A_i(i, j)|, \end{aligned} \quad (7)$$

Хотя разложение (6) не единственно, но существует инвариант

$$l_{kk} d_k u_{kk} = |A_k| / |A_{k-1}|, \quad k = 1(1)n. \quad (8)$$

В частности, если матрица A симметрична, ($L^T = U$), то при $\varepsilon_k = \text{sign}(|A_k| / |A_{k-1}|)$, $\mathcal{E} = \text{diag}(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n)$ и $R = (\mathcal{E}D)^{1/2}U$ имеем разложение

$$A = R^T \mathcal{E} R. \quad (9)$$

Аналогичную окаймленным минорам роль играют вложенные миноры, то есть определители матриц вида

$$A_{k-1}[i, j] = \begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1,j-1} & a_{1,j+1} & \dots & a_{1k} \\ \dots & & \dots & \dots & & \dots \\ a_{i-1,1} & \dots & a_{i-1,j-1} & a_{i-1,j+1} & \dots & a_{i-1,k} \\ a_{i+1,1} & \dots & a_{i+1,j-1} & a_{i+1,j+1} & \dots & a_{i+1,k} \\ \dots & & \dots & \dots & & \dots \\ a_{k1} & \dots & a_{k,j-1} & a_{k,j+1} & \dots & a_{kk} \end{bmatrix},$$

$i, j = 1(1)k.$

Это матрица минора, дополнительного к элементу a_{ij} в матрице A_k . В разложении (6) применим операцию обращения матриц

$$A^{-1} = U^*DL^*, \quad (10)$$

где

$$U^* = U^{-1}D^{-1} = (u_{ij}^*), L^* = D^{-1}L^{-1} = (l_{ij}^*).$$

Имеет место [3] следующее представление элементов треугольных матриц через определители матриц $A_{k-1}[i, j]$:

Теорема 1. *Для треугольного разложения (10) строго невырожденной матрицы A^{-1} справедливы соотношения*

$$\begin{aligned} l_{ij}^* &= (-1)^{i+j} |A_{i-1}[j, i]|, & i \geq j, \\ u_{ij}^* &= (-1)^{i+j} |A_{j-1}[j, i]|, & j \geq i. \end{aligned} \quad (11)$$

К этому надо добавить, что в случае, если матрица $A = \mathcal{R}^T \mathcal{R}$ является ганкелевой положительно определенной, матрица Хессенберга \mathcal{T} , с точностью до последнего столбца, является симметричной [4].

Все эти сведения нам понадобятся в дальнейшем.

1. СИСТЕМА МНОГОЧЛЕНОВ

Непосредственно связь матрицы A с многочленами устанавливает следующая, вытекающая из (11)

Теорема 2. *Элементы k -го столбца матрицы U^* и k -й строки матрицы L^* представляют собой коэффициенты многочленов $k-1$ -го порядка $U_{k-1}^*(x)$ и $L_{k-1}^*(x)$ соответственно, вычисляемых по формулам*

$$\begin{aligned} U_{k-1}^*(x) &= \sum_{i=1}^k u_{ik}^* x^{i-1} = \\ &= \sum_{i=1}^k (-1)^{i+k} |A_{k-1}[k, i]| x^{i-1} = \\ &= \begin{vmatrix} A_{k-1} & \bar{A}_{\bullet k} \\ 1 \dots x^{k-2} & x^{k-1} \end{vmatrix}, \\ L_{k-1}^*(x) &= \sum_{i=1}^k l_{ki}^* x^{i-1} = \\ &= \sum_{i=1}^k (-1)^{i+k} |A_{k-1}[i, k]| x^{i-1} = \begin{vmatrix} A_{k-1} & 1 \\ \dots & \dots \\ \bar{A}_{k\bullet} & x^{k-1} \end{vmatrix}. \end{aligned}$$

Коэффициенты при старших членах этих многочленов равны $|A_{k-1}|$. За счет изменения нормировки матриц в треугольном разложении нормировка многочленов $U_{k-1}^*(x)$, $L_{k-1}^*(x)$ может быть изменена.

Итак, k -й столбец матрицы $U^* = U^{-1}D^{-1}$ (k -я строка $L^* = D^{-1}L^{-1}$) состоит из коэффициентов разложения многочлена $U_{k-1}^*(x)$ ($L_{k-1}^*(x)$) по степеням x .

В качестве примера рассмотрим невырожденную матрицу Вандермонда

$$V = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & \dots & x_1^{n-1} \\ 1 & x_2 & \dots & x_2^{n-1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_n & \dots & x_n^{n-1} \end{bmatrix}$$

как элемент (i) Rn-структуры. Введем узловые многочлены

$$\begin{aligned} \pi_k(x) &= \prod_{i=1}^k (x - x_i) = \sum_{i=1}^k c_{k,k-i} x^i, \\ \varphi_l^{(k)}(x) &= \pi_k(x)/(x - x_l), \quad l = 1(1)k, \quad k = 1(1)n, \end{aligned}$$

и рассмотрим треугольные разложения матриц V и V^{-1} [3], [6]:

$$V = ZW,$$

где $Z = (z_{ij})$, $W = (w_{ij})$, $i, j = 1(1)n$, – соответственно нижняя и верхняя треугольные матрицы, причем

$$\begin{aligned} w_{ij} &= \sum_{l=1}^i \frac{x_l^{j-1}}{\varphi_l^{(i)}(x_l)}, \\ z_{ji} &= \pi_{i-1}(x_j) \end{aligned}$$

и

$$V^{-1} = W^{-1}Z^{-1},$$

где элементы матриц $Z^{-1} = (z_{ij}^*)$ и $W^{-1} = (w_{ij}^*)$, $i, j = 1(1)n$, даются соотношениями

$$\begin{aligned} z_{jl}^* &= \frac{1}{\varphi_l^{(j)}(x_l)}, \quad l = 1(1)j, \\ w_{ij}^* &= c_{j-1,j-i}, \quad i = 1(1)j, \end{aligned}$$

соответственно.

Для верхней треугольной матрицы W (элемент w_{ij} которой есть разделенная разность $(i-1)$ -го порядка функции x^{j-1} на узлах x_1, \dots, x_i) матрица Хессенберга имеет вид [3] (последний столбец может быть и другим)

$$\mathcal{T} = \begin{bmatrix} x_1 & & & & & \\ 1 & x_2 & & & & \\ & & 1 & \ddots & & \\ & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 1 & x_n \end{bmatrix},$$

а W^{-1} определяет узловые многочлены $\pi_k(x)$, $k = 0(1)n - 1$.

Применим теперь теорему 2 к симметричной матрице A .

Следствие 1. Для симметричной матрицы имеется аналог представления (7). Полагая в (10) $P = U^*(\mathcal{E}D)^{1/2}$ и $\mathcal{E} = \text{diag}(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n)$, приходим к разложению

$$A^{-1} = P\mathcal{E}P^T. \quad (12)$$

Если $P = (p_{i-1}^{j-1})$, $i = 1(1)j$, $j = 1(1)n$, то

$$\begin{aligned} p_{i-1}^{j-1} &= (-1)^{i+j} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_j |A_{j-1}| |A_j|}} |A_{j-1}[j, i]|, & j \geq i, \\ \varepsilon_j &= \text{sign}(|A_j|/|A_{j-1}|). \end{aligned} \quad (13)$$

Следствие 2. Элементы k -го столбца матрицы P представляют собой коэффициенты многочлена $p_{k-1}(x)$ порядка $k - 1$, вычисляемого по формуле

$$\begin{aligned} p_{k-1}(x) &= \sum_{i=0}^{k-1} p_i^{k-1} x^i = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_k |A_{k-1}| |A_k|}} \sum_{i=1}^k (-1)^{i+k} |A_{k-1}[k, i]| x^{i-1} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_k |A_{k-1}| |A_k|}} \begin{vmatrix} A_{k-1} & \bar{A}_{\bullet k} \\ 1 \dots x^{k-2} & x^{k-1} \end{vmatrix}. \end{aligned} \quad (14)$$

2. ДИАГОНАЛЬНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ПОДОБИЯ

Неединственность треугольного разложения матрицы A сказывается на нормировке соответствующих многочленов и порождает семейство матриц Хессенберга. Это семейство представляет собой класс подобных матриц, как утверждает следующая

Теорема 3. Пусть столбцы некоторой невырожденной треугольной матрицы \mathcal{R} порождаются неразложимой матрицей Хессенберга \mathcal{T} согласно соотношениям (1). Тогда для любой невырожденной диагональной матрицы \bar{D} имеют место соотношения $\bar{R}_{\bullet k+1} = \bar{T} \bar{R}_{\bullet k}$, $k = 1(1)n - 1$, где $\bar{T} = \bar{D} \mathcal{T} \bar{D}^{-1} = (\bar{t}_{ij})$ – неразложимая хессенбергова и $\bar{R} = \bar{D} \mathcal{R}$ – невырожденная треугольные матрицы. В этом преобразовании существуют две группы инвариантов (то есть не зависящих от \bar{D} тождеств):

$$\begin{aligned} \bar{t}_{kk} &= \tau_{kk}, \\ \bar{t}_{k,k-1} \bar{t}_{k-1,k} &= \tau_{k,k-1} \tau_{k-1,k}. \end{aligned} \quad (15)$$

Доказательство. Матрица \bar{R} очевидно невырожденна и треугольна, поэтому существует некоторая матрица Хессенберга \bar{T} , для которой

$$\bar{R}_{\bullet k+1} = \bar{T} \bar{R}_{\bullet k}, \quad k = 1(1)n - 1.$$

В то же время при тех же значениях k по условию теоремы $\mathcal{R}_{\bullet k+1} = \mathcal{T}\mathcal{R}_{\bullet k}$. А так как $\bar{R}_{\bullet l} = \bar{D}\mathcal{R}_{\bullet l}$, то $\mathcal{R}_{\bullet k+1} = \bar{D}^{-1}\bar{T}\bar{D}\mathcal{R}_{\bullet k} = \mathcal{T}\mathcal{R}_{\bullet k}$, или обозначая $U = \bar{D}^{-1}\bar{T}\bar{D} - \mathcal{T}$, получим

$$U\mathcal{R}_{\bullet k} = \sum_{j=1}^k \mathbf{r}_{jk}U_{\bullet j} = 0, \quad k = 1(1)n - 1.$$

При $k = 1$ находим, что $U_{\bullet 1} = 0$. По индукции из условия $U_{\bullet j} = 0$, $j = 1(1)k - 1$, находим $U_{\bullet k} = 0$, $k = 1(1)n - 1$. Но последний столбец матрицы \bar{T} произволен, и его выберем из условия $U_{\bullet n} = 0$. Следовательно, матрица U равна нулю, что совпадает с первым утверждением теоремы. Последнее утверждение теоремы есть очевидное следствие матричного перемножения $\bar{D}^{-1}\bar{T}\bar{D}$. \square

3. СОБСТВЕННАЯ ПРОБЛЕМА МАТРИЦЫ \mathcal{T}

Представим матрицу \mathcal{R} , используя для этого выражение (1)

$$\mathcal{R} = \sum_{k=1}^{n-1} \mathcal{T}^{k-1} \mathcal{R}_{\bullet 1} e_k^T + \mathcal{R}_{\bullet n} e_n^T,$$

умножим ее слева на \mathcal{T} , после чего исключим последнее слагаемое с помощью (4):

$$\mathcal{T}\mathcal{R} = \sum_{k=1}^{n-1} \mathcal{T}^k \mathcal{R}_{\bullet 1} e_k^T + \mathcal{R}\mathcal{P} e_n^T.$$

Вновь применив тождество Кели – Гамильтона, найдем представление матрицы Хессенберга в форме Фробениуса:

$$\mathcal{T}\mathcal{R} = \mathcal{R}F, \tag{16}$$

где F – матрица Фробениуса

$$F = \sum_{k=1}^{n-1} e_{k+1} e_k^T + \mathcal{P} e_n.$$

Введенная матрица Фробениуса, как легко видеть, обладает тем свойством, что если $\pi(x_i) = 0$, то x_i есть ее собственное число, а $v(x_i) = (1, x_i, \dots, x_i^{n-1})$ – соответствующий ему левый собственный вектор. Положим $P = \mathcal{R}^{-1}$. Имеет место

Лемма 1. *Справедливы следующие соотношения:*

$$P\mathcal{T} = FP, \tag{17}$$

$$v(x_i)P\mathcal{T} = x_i v(x_i)P. \tag{18}$$

Возьмем теперь разложение строго невырожденной матрицы A , $A = LDU$, с матрицей D , не обязательно подчиненной условиям (7), и рассмотрим окаймленные матрицы:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} A & \bar{A}_{\bullet n+1} \\ \bar{A}_{n+1 \bullet} & a_{n+1, n+1} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} LD & 0 \\ lD & \lambda d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U & u \\ 0 & \rho \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} LDU & LDu \\ lDU & d\lambda\rho + lDu \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Применительно к матрицам U и T_U , а также L и T_L , в обозначениях данного контекста соотношение (1) при $k = n$ будет иметь вид: $u = T_U U_{\bullet n} = UP$, $l = L_{n \bullet} T_L = P^T L$, если при этом учесть равенство (4). Поэтому имеют место соотношения

$$\bar{A}_{\bullet n+1} = LDU = AP, \quad \bar{A}_{n+1 \bullet} = P^T A.$$

Теперь может быть сформулирована

Теорема 4. *Для строго невырожденной матрицы A характеристический многочлен связанных с ней неразложимых матриц Хессенберга T_U и T_L , если брать для них одинаковые характеристические многочлены, имеет вид*

$$\pi(x) = \frac{1}{|A|} \begin{bmatrix} A & AP \\ v^T(x) & x^n \end{bmatrix} = \frac{1}{|A|} \begin{bmatrix} A & v(x) \\ P^T A & x^n \end{bmatrix}, \quad (19)$$

$v(x) = (1, x, \dots, x^{n-1})^T$. Каждому собственному числу, независимо от кратности, соответствует по одному собственному вектору для обеих матриц: левый $v^T(x_i)P_U$ для матрицы T_U и правый $P_L v(x_i)$ для матрицы T_L , причем $P_U U = P_L L = E$.

Доказательство. Справедливость (19) устанавливается простым раскрытием определителя по строке (в первом случае) или по столбцу (во втором). При этом нужно только учесть свойство умножения матрицы на вектор, например:

$AP = \sum_{i=1}^n p_j A_{\bullet n-j+1}$. Утверждения относительно собственных векторов следует из неразложимости матриц Хессенберга, а также из соотношений (18). \square

Совокупность представленных выше доказательств обосновывает и еще один важный, в смысле постановки прямых и обратных задач, результат.

Теорема 5. *Для задания элементов Rn -структуры достаточно определить один из них.*

Это очевидно. Если дана матрица A , то через ее треугольное разложение $A = LR$ находятся и матрицы Хессенберга T_L , T_R , и системы многочленов $p_k^{(L)}(x)$, $p_k^{(R)}(x)$, $k = 0(1)n - 1$. Если известны $T^{(L)}$, $T^{(R)}$, достаточно без последнего столбца, то находим треугольные матрицы

$$\begin{aligned} L &= l_{11} \sum_{k=1}^n e_k e_1^T T_L^{k-1}, \\ R &= r_{11} \sum_{k=1}^n T_R^{k-1} e_1 e_k^T \end{aligned}$$

и вслед за ними матрицу A . Наконец, если имеем системы многочленов $p_k^{(L)}(x)$ и $p_k^{(R)}(x)$, $k = 0(1)n-1$, то из их коэффициентов составляем матрицы L^{-1} и R^{-1} , после чего можно определить A .

В случае симметричной матрицы A задача упрощается.

4. СТРОГО НЕВЫРОЖДЕННАЯ СИММЕТРИЧНАЯ МАТРИЦА

Если матрица положительно определена, то ей соответствует треугольная матрица, определяемая разложением $A = R^T R$. Но для строго невырожденной симметричной матрицы, согласно разложению (9), кроме матрицы R следует учитывать также и диагональную матрицу \mathcal{E} . Помимо (9) удобно пользоваться следующей его модификацией:

$$A = \tilde{R}^T \tilde{D} \tilde{R}, \quad (20)$$

где $\tilde{D} = \text{diag}(\tilde{d}_1, \dots, \tilde{d}_n)$, $\tilde{R} = (\tilde{r}_{ij})$, $i, j = 1(1)n$, – верхняя единичная треугольная матрица,

$$\tilde{d}_i = |A_i|/|A_{i-1}|, \quad \tilde{r}_{ij} = |A_i(i, j)|/|A_i| \quad (21)$$

Так как матрицы R и \tilde{R} связаны отношением

$$R = (\tilde{D}\mathcal{E})^{1/2} \tilde{R}, \quad (22)$$

$\mathcal{E} = \text{diag}(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n)$, $\varepsilon_i = \text{sign} \tilde{d}_i$, то по теореме 3 находим связь матриц Хессенберга

$$T = (D\mathcal{E})^{1/2} \tilde{T} (\tilde{D}\mathcal{E})^{-1/2} \quad (23)$$

и $\tilde{T} = (\tilde{t}_{ij})$, $i, j = 1(1)n$, отвечающих треугольным разложениям (9) и (20) соответственно.

Разумеется, как для пары T, R , так и для пары \tilde{T}, \tilde{R} справедливы, с точностью до обозначений, соотношения (1) - (3). Например, в силу (22), (23) матрицы \tilde{T} и \tilde{R} связаны соотношениями:

$$\tilde{R}_{\bullet k+1} = \tilde{T} \tilde{R}_{\bullet k} = \tilde{T}^k \tilde{R}_{\bullet 1}, \quad k = 0(1)n-1, \quad (24)$$

или

$$\tilde{t}_{jk} = \tilde{r}_{j, k+1} - \sum_{i=m}^{k-1} \tilde{r}_{ik} \tilde{t}_{ji}, \quad (25)$$

$$j = 1(1)k+1, \quad k = 1(1)n-1, \quad m = \max(j-1, 1),$$

и, в частности,

$$\begin{aligned} \tilde{t}_{k+1, k} &= 1, \\ \tilde{t}_{k, k} &= \tilde{r}_{k, k+1} - \tilde{r}_{k-1, k}, \\ \tilde{t}_{k-1, k} &= \tilde{r}_{k-1, k+1} - \tilde{r}_{k-2, k} - \tilde{r}_{k-1, k} \tilde{t}_{k-1, k-1}, \quad k = 1(1)n-1. \end{aligned} \quad (26)$$

Перейдем теперь к основной задаче этого раздела – выразим элементы матрицы \tilde{R} через окаймленные миноры матрицы A , для чего введем матрицу $\tilde{D}^+ = \text{diag}(\tilde{d}_1^+, \dots, \tilde{d}_n^+)$ равенством

$$\tilde{D} = \tilde{D}^+ \mathcal{E}.$$

Из всевозможных матриц \mathcal{E} (их общее число равно 2^n) одна является единичной, причем ей соответствует положительно определенная матрица $A^+ = \tilde{R}^T \tilde{D}^+ \tilde{R}$ в семействе 2^n матриц $A = \tilde{R}^T \tilde{D} \tilde{R}$. И через элементы треугольного разложения A^+ могут быть выражены все окаймленные миноры матриц A этого семейства.

Лемма 2. *Для симметричной строго невырожденной матрицы A и ее разложения (9) и (20) имеют место соотношения:*

$$\tilde{D} = \mathcal{E} \tilde{D}^+, \quad \tilde{R} = \tilde{R}^+, \quad R = R^+.$$

Доказательство. Первое равенство есть просто определение \tilde{D}^+ . Далее, так как в разложении (20) $\tilde{r}_{ii} = 1, i = 1(1)n$, то должны выполняться равенства

$$\begin{aligned} |A_i(i, j)| &= |\tilde{R}_i^T \tilde{D}_i \tilde{R}_i(i, j)| = |\mathcal{E}_i \tilde{R}_i^T \tilde{D}_i^+ \tilde{R}_i(i, j)| = \\ &= |\mathcal{E}_i A_i^+(i, j)|. \end{aligned}$$

Это означает, что в разложении (6) с $L = U^T$

$$u_{ij} = |A_i(i, j)| = |\mathcal{E}_i u_{ij}^+|,$$

следовательно,

$$\tilde{r}_{ij} = \frac{u_{ij}}{\sqrt{|A_i|}} = \frac{|u_{ij}^+|}{|A_i^+|} = r_{ij}^+.$$

Этим обосновывается второе равенство. Очевидно и третье равенство, поскольку из сопоставления разложений $A = R^T \mathcal{E} R = \tilde{R}^T \tilde{D} \tilde{R}$ следует $R = (\tilde{D}^+)^{1/2} \tilde{R} = (\tilde{D}^+)^{1/2} \tilde{R}^+ = R^+$. \square

5. ГАНКЕЛЕВА Rn-СТРУКТУРА

Rn-структуру с ганкелевой матрицей $A = (a_{ij})$, $a_{ij} = a_{i+j-2}$, будем называть ганкелевой Rn-структурой. Применим к общему случаю строго невырожденной матрицы технику, использованную в [3-4].

Теорема 6. *В ганкелевой Rn-структуре матрица Хессенберга \tilde{T} , соответствующая разложению (20), является трехдиагональной и имеет вид:*

$$\tilde{T} = \begin{bmatrix} b_1 & g_1 & & & \\ & 1 & b_2 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & g_{n-1} \\ & & & 1 & b_n \end{bmatrix}$$

с элементами

$$\begin{aligned} b_j &= r_{j,j+1} - r_{j-1,j}, \quad j = 1(1)n, \\ g_j &= \frac{|A_{j-1}| |A_{j+1}|}{|A_j|^2}, \quad j = 1(1)n - 1. \end{aligned} \tag{27}$$

Доказательство. Рассуждения основаны на двух соотношениях [3-4]: тождестве Фробениуса для ганкелевой матрицы в форме

$$|A_{l-1}(l, k)| = u_{l-1, k+1} + |A_{l-1}| \frac{u_{l-2, l-1} u_{l-1, k} - u_{l-2, k} |A_{l-1}|}{|A_{l-2}| |A_{l-1}|} \quad (28)$$

и тождестве Сильвестра в форме

$$|A_{l-2}| u_{lk} = |A_{l-1}| |A_{l-1}(l, k)| - u_{l, l-1} u_{l-1, k} \quad (29)$$

(здесь учтено, что если в определителе $|A_l|$ заменим l -й столбец на k -й, получим u_{lk}). Исключив из обоих тождеств определитель $|A_{l-1}(l, k)|$ и учтя симметричность матрицы A , получим следующее базовое выражение:

$$\frac{u_{l-1, k+1}}{|A_{l-1}|} = \frac{u_{l-2, k}}{|A_{l-2}|} + \frac{u_{l-1, k}}{|A_{l-1}|} \left(\frac{u_{l-1, l}}{|A_{l-1}|} - \frac{u_{l-2, l-1}}{|A_{l-2}|} \right) + \frac{|A_{l-2}| u_{lk}}{|A_{l-1}|^2},$$

или, в силу (16):

$$\tilde{r}_{l-1, k+1} = \tilde{r}_{l-2, k} + \tilde{r}_{l-1, k} (\tilde{r}_{l-1, l} - \tilde{r}_{l-2, l-1}) + \frac{|A_{l-2}| |A_l|}{|A_{l-1}|^2} \tilde{r}_{lk}. \quad (30)$$

Беря последнее выражение при $l = k$ и подставляя его в третье уравнение системы (26) (учитывая и другие уравнения этой системы), находим:

$$\tilde{t}_{k-1, k} = \frac{|A_{k-2}| |A_k|}{|A_{k-1}|^2}.$$

Вместе с первым и вторым уравнениями (26) это составляет утверждение (27).

Остается доказать, что $\tilde{t}_{j-1, k} = 0$ при $j < k$, т.е. трехдиагональность матрицы T . Берем два равенства: (30), которое запишем в виде

$$\tilde{r}_{l-1, k+1} = \sum_{i=l-2}^l \tilde{r}_{ik} \tilde{t}_{l-1, i},$$

и (25) в виде

$$\tilde{r}_{l-1, k+1} = \sum_{i=l-2}^k \tilde{r}_{ik} \tilde{t}_{l-1, i},$$

и вместе они приводят к соотношениям

$$\sum_{i=l+1}^k \tilde{r}_{ik} \tilde{t}_{l-1, i} = 0. \quad (31)$$

При $l = k - 1$ находим $\tilde{t}_{k-2, k} = 0$ для $k = 3(1)n$. Таким образом, нижним пределом в (28) становится $l + 2$. Далее, по индукции, повышая нижний предел до k , доказываем, что из $\tilde{t}_{k-j, k} = 0$ следует $\tilde{t}_{k-j-1, k} = 0$. При доказательстве учтено, что матрица \tilde{T} определена с точностью до последнего столбца. \square

Теперь рассмотрим матрицу T , связанную с соотношением (9).

Определение. Матрицу B будем называть симметричной по модулю, если она обладает свойством $|b_{ij}| = |b_{ji}|$.

Следствие. Для строго невырожденной ганкелевой матрицы A с разложением (9) матрица T является симметричной по модулю, то есть

$$T = \begin{bmatrix} b_1 & a_1 \varepsilon_1 \varepsilon_2 & & & \\ a_1 & b_2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & a_{n-1} \varepsilon_{n-1} \varepsilon_n & \\ & & & a_{n-1} & b_n \\ & & & & b_n \end{bmatrix},$$

где

$$a_j = \sqrt{\frac{\text{abs}(|A_{j-1}| |A_{j+1}|)}{|A_j|^2}}.$$

Легко убедиться в том, что для симметричной по модулю матрицы выполняется равенство

$$T^T = \mathcal{E} T \mathcal{E}.$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Гантмахер Ф.Р. Теория матриц. – М.: Наука, 1966.
2. Гантмахер Ф.Р., Крейн М.Г. Осцилляционные матрицы и ядра и малые колебания механических систем. – М.-Л.: ГИТЛ, 1950.
3. Ильин В.П., Кузнецов Ю.И. Алгебраические основы численного анализа. – Новосибирск: Наука, 1986.
4. Кузнецов Ю.И. Связь положительно определенных матриц и матриц Хессенберга // Сиб. мат. журнал. 1986. Том XXVII, №2. С. 84–90.
5. Кузнецов Ю.И. О свойствах матрицы Хессенберга. // Сиб. мат. журнал. 1987. Том XXVIII, №6. С. 148.
6. Кузнецов Ю.И. Элементы анализа на конечном множестве точек. – Новосибирск: ВЦ СО РАН, 1994.
7. Кузнецов Ю.И. Системы псевдоортогональных многочленов. Препринт ВЦ СО РАН №1068, 1996.

Корректная версия S_n -метода в теории переноса излучения

В.В. СМЕЛОВ

Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН

Объяснено возникновение локальной неустойчивости хорошо известного S_n -метода. Предложен другой абсолютно устойчивый вариант этого метода.

1. С 1955 года в практике решения задач односкоростной теории переноса излучения в областях со сферической и цилиндрической симметрией стал широко применяться S_n -метод (метод Карлсона). Однако при решении таких задач стали обнаруживаться нежелательные осцилляции решений. Так, в монографии Г.И.Марчука и В.И.Лебедева [1] читаем: “Расчеты... иногда показывают неустойчивость счета, при которой наблюдается сильная осцилляция решений, сопровождаемая даже переменной знака. К сожалению, критерии устойчивости в S_n -методе до сих пор не выяснены”. На интегральные характеристики, в частности функционалы, такие осцилляции заметно не сказывались, и это предопределило устойчивый интерес к методу [2–6]. В то же время с позиций математической корректности оставалась неудовлетворенность от наличия упомянутого дефекта метода.

Ниже вместо попытки поиска условий, которые обеспечивали бы устойчивость этого уже сформировавшегося метода, предлагается иной вариант S_n -алгоритма, абсолютно устойчивый и, по этой причине, не порождающий осцилляций решения.

2. Анализ прежнего алгоритма S_n -метода и предлагаемого проводится на примере сферически симметричной задачи с изотропной функцией рассеяния и изотропным источником $q(r)$, которая в итерационном процессе записывается в виде [1, 4, 6]

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \mu \varphi^{(n)}) + \frac{\partial}{\partial \mu} \left(\frac{1 - \mu^2}{r} \varphi^{(n)} \right) + \sigma \varphi^{(n)} = f^{(n)}(r), \quad (1)$$

$$\varphi^{(n)}(R, \mu) = S(\mu) \quad \text{при } \mu \leq 0. \quad (2)$$

Здесь $f^{(n)}(r) = \frac{1}{2}(\sigma_s \int_{-1}^1 \varphi^{(n-1)}(r, \mu) d\mu + q(r))$ - на каждом итерационном шаге "n" известная функция; $0 \leq r \leq R$, $-1 \leq \mu \leq 1$; $\sigma(r) \geq \sigma_s(r) > 0$.

Пусть отрезок $-1 \leq \mu \leq 1$ разбит на $2n$ равных частей (μ_j, μ_{j+1}) , начиная с $\mu_0 = -1$, а отрезок $0 \leq r \leq R$ на N интервалов (r_k, r_{k+1}) так, чтобы возможные границы раздела сред с разными физическими свойствами содержались среди точек r_k . Рассмотрим произвольную ячейку M_{kj} построенной сетки, где $r_k \leq r \leq r_{k+1}$, $\mu_j \leq \mu \leq \mu_{j+1}$. В результате интегрирования уравнения (1) в пределах ячейки M_{kj} с учетом ее элемента "объема" $dM = r^2 dr d\mu$ получаем (опуская для простоты итерационный индекс n) следующее строгое равенство:

$$\begin{aligned} r_{k+1}^2 \int_{\mu_j}^{\mu_{j+1}} \mu \varphi(r_{k+1}, \mu) d\mu - r_k^2 \int_{\mu_j}^{\mu_{j+1}} \mu \varphi(r_k, \mu) d\mu + (1 - \mu_{j+1}^2) \int_{r_k}^{r_{k+1}} r \varphi(r, \mu_{j+1}) dr - \\ (1 - \mu_j^2) \int_{r_k}^{r_{k+1}} r \varphi(r, \mu_j) dr + \int_{r_k}^{r_{k+1}} \sigma(r) r^2 dr \int_{\mu_j}^{\mu_{j+1}} \varphi(r, \mu) d\mu = \Delta\mu \int_{r_k}^{r_{k+1}} f(r) r^2 dr, \quad (3) \end{aligned}$$

где $\Delta\mu = \mu_{j+1} - \mu_j$.

В подвергаемом "ревизии" S_n -алгоритме функция $\varphi(r, \mu)$ в пределах ячейки M_{kj} аппроксимируется билинейной интерполяционной формулой. Соответственно функция $f(r)$ аппроксимируется линейной интерполяционной формулой. В итоге получаем разностные уравнения со вторым порядком аппроксимации

$$A_{kj} \varphi_{kj} + B_{kj} \varphi_{k+1,j} + C_{kj} \varphi_{k,j+1} + D_{kj} \varphi_{k+1,j+1} = E_k f_k + F_k f_{k+1}, \quad (4)$$

где $k = 0, 1, \dots, N-1$; $j = 0, 1, \dots, n-1$. Мы не выписываем достаточно громоздкие выражения для коэффициентов $A_{kj}, B_{kj}, \dots, F_k$, которые приведены в работах [1, 6].

Система уравнений (4) должна быть дополнена следующими равенствами:

$$\varphi_{Nj} = S(\mu_j), \quad j = 0, 1, \dots, n; \quad (5)$$

$$\varphi_{0j} = \varphi_{0,2n-j}, \quad j > n. \quad (6)$$

Первые из этих равенств отвечают граничному условию (2), а вторые — условию сферической симметрии задачи в центре сферы.

После привлечения этих дополнительных равенств разностная задача остается еще недоопределенной. Доопределить ее легко конечно-разностными уравнениями, связывающими искомые величины φ_{k0} , $k = 0, 1, \dots, N$. С этой целью положим в уравнении (1) $\mu = -1$, что переводит его в обыкновенное дифференциальное уравнение

$$-\frac{\partial \varphi}{\partial r} + \sigma \varphi(r, -1) = f(r) \quad (7)$$

с начальным условием $\varphi(R, -1) = S(-1)$. Решение этой задачи Коши разностным методом доводит общую систему уравнений до замкнутой. Схема вычислений для этой приближенной задачи подробно изложена в работах [1, 6] и алгебраически означает решение системы уравнений с треугольной матрицей. В данный момент нас интересуют другие свойства этой матрицы. При $0 \leq j < n$ диагональными элементами матрицы являются положительные коэффициенты C_{kj} в уравнениях (4), а при $j \geq n$ диагональными элементами будут коэффициенты $D_{kj} > 0$. Существенно, однако, то, что остальные элементы матрицы не остаются знакопостоянными. Другими словами, матрица в общем случае не является M -матрицей [7], а потому не имеет места дискретный принцип максимума [8]. По отношению к исходной задаче (1), (2) принцип максимума означает неотрицательность решения $\varphi(r, \mu)$ при $f(r) \geq 0$ и $S(\mu) \geq 0$, в то время как в разностной задаче при $f_k = f(r_k) \geq 0$ и $S(\mu_j) \geq 0$ неотрицательность решения φ_{kj} при всех k и j не гарантирована. Именно это обстоятельство и является причиной появления нежелательных осцилляций решения.

3. Исправляет "дефект" вышеприведенного S_n -алгоритма предлагаемый ниже другой вариант метода также с треугольной матрицей. Этот выход на абсолютно устойчивый алгоритм достигается, однако, снижением порядка аппроксимации разностной схемы на единицу, т.е. до первого порядка. Следует отметить, что и другие разностные алгоритмы для задач типа (1), (2) (метод Владимирова [4, 6], метод расщепления [1, 6] и др.), подчиненные принципу максимума, также имеют первый порядок аппроксимации.

Новый алгоритм начнем с разностной записи уравнения (7)

$$(1 + \sigma(r_k)\Delta r_k)\varphi_{k0} - \varphi_{k+1,0} = \int_{r_k}^{r_{k+1}} f(r)dr, \quad \varphi_{N0} = S(-1), \quad (8)$$

где $\Delta r_k = r_{k+1} - r_k$. Далее, если узлы ячейки M_{kj} отвечают значениям $\mu \leq 0$, ($0 \leq j \leq n$), то точное равенство (3) заменим следующим приближенным:

$$\left(-r_k^2 \int_{\mu_j}^{\mu_{j+1}} \mu d\mu + (1 - \mu_{j+1}^2) \int_{r_k}^{r_{k+1}} r dr + \int_{r_k}^{r_{k+1}} \sigma r^2 dr \int_{\mu_j}^{\mu_{j+1}} d\mu \right) \varphi_{k,j+1} +$$

$$r_{k+1}^2 \int_{\mu_j}^{\mu_{j+1}} \mu d\mu \cdot \varphi_{k+1,j+1} - (1 - \mu_j^2) \int_{r_k}^{r_{k+1}} r dr \cdot \varphi_{kj} = \Delta\mu \int_{r_k}^{r_{k+1}} f(r)r^2 dr. \quad (9)$$

Граничные условия (5) и найденные значения φ_{k0} на основе уравнений (8) определяют при $0 \leq j < n$ последовательное вычисление значений $\varphi_{k,j+1}$ из уравнений (9). Это означает, что положительный коэффициент при $\varphi_{k,j+1}$ есть диагональный элемент матрицы нашей системы уравнений. Остальные коэффициенты в уравнениях (9) отрицательны.

Следующий этап схемы вычислений – при $n \leq j \leq 2n - 1$ последовательное

вычисление величин $\varphi_{k+1,j+1}$ из следующего приближенного равенства:

$$\left(-r_{k+1}^2 \int_{\mu_j}^{\mu_{j+1}} \mu d\mu + (1 - \mu_{j+1}^2) \int_{r_k}^{r_{k+1}} r dr + \int_{r_k}^{r_{k+1}} \sigma r^2 dr \int_{\mu_j}^{\mu_{j+1}} d\mu \right) \varphi_{k+1,j+1} -$$

$$r_k^2 \int_{\mu_j}^{\mu_{j+1}} \mu d\mu \cdot \varphi_{k,j+1} - (1 - \mu_j^2) \int_{r_k}^{r_{k+1}} r dr \cdot \varphi_{k+1,j} = \Delta\mu \int_{r_k}^{r_{k+1}} f(r) r^2 dr. \quad (10)$$

В этом равенстве при $k = 0$ величины $\varphi_{0,j+1}$ следует положить равными $\varphi_{0,2n-(j+1)}$ согласно условию симметрии (6).

В уравнениях (10) положительный коэффициент при $\varphi_{k+1,j+1}$ есть диагональный элемент матрицы, а остальные коэффициенты отрицательны. Дополнительно констатируем: матрица объединенной системы уравнений (8)–(10) является треугольной матрицей со строгим диагональным преобладанием. Последнее утверждение по отношению к уравнениям (8) очевидно; относительно уравнений (9) это следует из тождества

$$-r_k^2 \int_{\mu_j}^{\mu_{j+1}} \mu d\mu + (1 - \mu_{j+1}^2) \int_{r_k}^{r_{k+1}} r dr + r_{k+1}^2 \int_{\mu_j}^{\mu_{j+1}} \mu d\mu + (1 - \mu_j^2) \int_{r_k}^{r_{k+1}} r dr \equiv 0;$$

аналогичное тождество справедливо и для уравнений (10).

В итоге из всего вышеизложенного следует, что объединенная система уравнений является M -матрицей [7], т.е. ее обратная матрица $A^{-1} \geq 0$, а потому при неотрицательных $f(r)$ и $S(\mu)$ решение разностной задачи будет неотрицательным. Более определенно, при $f(r) \geq 0$, $S(\mu) \geq 0$ можно записать [8]

$$0 \leq \max_{k,j} \varphi_{k,j} \leq \max \left\{ \max_{0 \leq k \leq N-1} \int_{r_k}^{r_{k+1}} f(r) dr / \sigma(r_k) \Delta r_k, \right.$$

$$\left. \max_{0 \leq k \leq N-1} \int_{r_k}^{r_{k+1}} f(r) r^2 dr / \int_{r_k}^{r_{k+1}} \sigma r^2 dr, \max_{0 \leq j \leq n} S(\mu_j) \right\}.$$

Если не постулировать неотрицательность f и S , то в полученной оценке нужно положить: $|\varphi_{k,j}|$, $|f(r)|$, $|S(\mu_j)|$. Эти оценки есть одновременно и характеристика абсолютной устойчивости разностной схемы (8)–(10).

Все вышеизложенное распространяется, естественно, на цилиндрические задачи, на случаи неравномерной сетки по μ и т.д.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Марчук Г.И., Лебедев В.И. Численные методы в теории переноса нейтронов. – М.: Атомиздат, 1981. – 454 с.

-
- [2] Carlson B.G. Solution of the transport equation S_n -approximations / Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-1891, 1955.
- [3] Карлсон Б., Белл Дж. Решение транспортного уравнения S_n -методом // Физика ядерных реакторов. – М.: Атомиздат, 1959. – 408 с.
- [4] Марчук Г.И. Методы расчета ядерных реакторов. – М.: Госатомиздат, 1961. – 667 с.
- [5] Морозов В.Н. О решении кинетических уравнений с помощью S_n -метода // Теория и методы расчета ядерных реакторов. – М.: Госатомиздат, 1962. – 91 с.
- [6] Смелов В.В. Лекции по теории переноса нейтронов. – М.: Атомиздат, 1978. – 216 с.
- [7] Воеводин В.В., Кузнецов Ю.А. – Матрицы и вычисления. – М.: Наука, 1984. – 218 с.
- [8] Смелов В.В. Алгебраический аспект дискретного принципа максимума. – Новосибирск, 1998. – 9 с. (Препринт/РАН. Сиб. Отд-ние, ИВМиМГ; 1118)
- [9] Марчук Г.И. Методы расщепления. – М.: Наука, 1988. – 263 с.

Численное решение проблемы об усвоении данных для полулинейного параболического уравнения ¹

В. П. ШУТЯЕВ, Е. И. ПАРМУЗИН

Институт вычислительной математики РАН
E-mail: shutyaev@im.ras.ru

Предложен и обоснован численный алгоритм решения задачи вариационного усвоения данных для полулинейного параболического уравнения.

ВВЕДЕНИЕ

Развитие методов исследования и численного решения задач вариационного усвоения данных на основе теории сопряженных уравнений вызывает в настоящее время большой интерес у многих исследователей в различных областях знаний [1]–[20] и др. Основы теории сопряженных уравнений для решения обратных и оптимизационных задач были заложены в пионерских работах Г.И.Марчука [3, 4].

Настоящая работа посвящена проблеме об усвоении данных для эволюционной задачи с уравнением состояния, являющимся полулинейным параболическим уравнением. Рассмотрен численный алгоритм решения задачи, основанный на проекционно-сеточном методе и методе последовательных приближений. Исследованы свойства линейной задачи и доказана сходимость метода последовательных приближений. Приведены результаты численных экспериментов по решению задачи идентификации начальных данных для нелинейной задачи теплопроводности. Представленные результаты являются развитием ряда вопросов, связанных с методами решения задач об усвоении данных и поднятых в работах [13], [15], [21].

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим эволюционную задачу вида:

$$\begin{cases} \frac{d\varphi}{dt} + A(t)\varphi + F(\varphi) = f, & t \in (0, T) \\ \varphi|_{t=0} = u, \end{cases} \quad (1.1)$$

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №00–01–00611)

где A – линейный оператор, определяемый выражением

$$A(t)\varphi = - \sum_{i,j=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} a_{i,j} \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} + \sum_{i=1}^2 a_i \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} + a\varphi.$$

Здесь $\bar{x} = (x_1, x_2) \in \Omega \subset \mathbf{R}^2$, Ω – ограниченная область с кусочно-гладкой границей $\partial\Omega$, функции $a_{i,j}$, a_i , a предполагаются достаточно гладкими и удовлетворяющими условиям:

$$a(\bar{x}, t) \geq 0, \quad \sum_{i=1}^2 \frac{\partial a_i}{\partial x_i} = 0, \quad a_{i,j} = a_{j,i},$$

$$\sum_{i,j=1}^2 a_{i,j} \xi_i \xi_j \geq \gamma \sum_{i=1}^2 \xi_i^2 \quad \forall \xi_i \in \mathbf{R}, \quad \gamma = \text{const} > 0.$$

Оператор A действует из $Y = L_2(\Omega \times (0, T))$ в Y с областью определения $D(A) = \{\varphi : \varphi \in Y; A\varphi \in Y, \varphi|_{\partial\Omega} = 0\}$. Пусть также $f \in Y$, $u \in H = L_2(\Omega)$, $F(\varphi)$ – нелинейный оператор, задаваемый формулой

$$F(\varphi) = \begin{cases} Qe^{-\theta/\rho\varphi}, & \varphi > 0, \\ 0, & \varphi \leq 0, \end{cases}$$

$Q, \theta, \rho > 0$ – физические константы. Задачи вида (1.1) возникают, например, в теории горения [23], [24].

Введем функционал

$$S(\varphi) = \frac{\alpha}{2} \|\varphi|_{t=0}\|^2 + \frac{1}{2} \int_0^T \|\hat{\varphi} - \varphi\|^2 dt, \quad (1.2)$$

где $\alpha = \text{const} \geq 0$; $\hat{\varphi} = \hat{\varphi}(t) \in Y$ – заданная функция, $\|\cdot\|$ – норма в пространстве H . Функция $\hat{\varphi}(t)$ определяется, как правило, априорными данными наблюдений. Весовой коэффициент α принято называть параметром регуляризации [13]. Далее всюду предполагается, что все рассматриваемые пространства и функции вещественны.

Рассмотрим задачу (1.1) с неизвестной функцией $u \in H$ (т.е. неизвестным управлением u) в начальном условии. Задача об усвоении данных может быть сформулирована следующим образом [6],[13]: найти функцию $\varphi = \varphi(t)$ и управление u такие, что они удовлетворяют (1.1), причем на множестве решений уравнения (1.1) функционал (1.2) принимает наименьшее значение.

Сформулированную задачу запишем в виде:

$$\begin{cases} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + A(t)\varphi + F(\varphi) = f, & t \in (0, T) \\ \varphi|_{t=0} = u \\ S(\varphi) = \min_u S(\varphi). \end{cases} \quad (1.3)$$

Задачи вида (1.3) рассматривались в работах [6], [13], [15], [25] и многих других. Функционал вида (1.2) рассматривался, в частности, в работе [15].

Как известно [6], [13], задача (1.3) сводится к системе для отыскания функций $\varphi = \varphi(t)$, $\varphi^* = \varphi^*(t)$ и управления u вида:

$$\begin{cases} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + A(t)\varphi + F(\varphi) = f, & t \in (0, T) \\ \varphi|_{t=0} = u, \end{cases} \quad (1.4)$$

$$\begin{cases} -\frac{\partial \varphi^*}{\partial t} + A^*(t)\varphi^* + (F'(\varphi))^*\varphi^* = (\widehat{\varphi} - \varphi), & t \in (0, T) \\ \varphi^*|_{t=T} = 0, \end{cases} \quad (1.5)$$

$$\alpha u - \varphi^*|_{t=0} = 0, \quad (1.6)$$

где $A^*(t)$ – оператор, сопряженный к $A(t)$, а оператор F' есть производная Гато от оператора F .

Разрешимость систем вида (1.4)–(1.6) и более сложных исследовалась в работах [13], [25] и других. Мы не исследуем здесь вопросы разрешимости, а будем предполагать, что решение φ , φ^* , u системы (1.4)–(1.6) существует, единственно и является достаточно гладким.

2. ЧИСЛЕННЫЙ АЛГОРИТМ

Для аппроксимации задачи (1.4)–(1.6) по пространственным переменным воспользуемся проекционно-сеточным методом.

Задачи (1.4), (1.5) мы будем рассматривать в обобщенной постановке. Так, обобщенную постановку для задачи (1.4) можно сформулировать следующим образом. Назовем *обобщенным решением* задачи (1.4) функцию $\varphi(\bar{x}, t)$, которая при всех $t \in (0, T)$ принадлежит энергетическому пространству H_A [26], обладает производной $\frac{\partial \varphi}{\partial t} \in L_2(\Omega \times (0, T))$ и удовлетворяет почти всюду на $(0, T)$ соотношениям

$$\left(\frac{\partial \varphi}{\partial t}, \psi\right)(t) + [\varphi, \psi](t) + \sum_{k=1}^2 \left(a_k \frac{\partial \varphi}{\partial x_k}, \psi\right) + (F(\varphi), \psi)(t) = (f, \psi)(t); \quad (\varphi|_{t=0}, \psi) = (u, \psi), \quad (2.1)$$

для всех $\psi \in H_A$. Здесь (\cdot, \cdot) – скалярное произведение в H , H_A – энергетическое пространство, соответствующее $A(t)$, со скалярным произведением

$$[\varphi, \psi] = \int_{\Omega} \left(\sum_{i,j=1}^2 a_{i,j} \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \frac{\partial \psi}{\partial x_i} + a\varphi\psi \right) d\bar{x}$$

и нормой $[\varphi] = [\varphi, \varphi]^{1/2}$.

Аппроксимацию задачи по пространственным переменным выполним, используя проекционно-сеточный алгоритм, на основе обобщенной постановки [26]. Вводя сетку в Ω и выполняя триангуляцию области, каждому узлу P_i поставим в соответствие нормированную базисную функцию Куранта ψ_i [26]. Приближенное решение задачи (2.1) будем искать в виде

$$\varphi_h(\bar{x}, t) = \sum_{i=1}^N b_i(t)\psi_i(\bar{x}),$$

где N – число узлов в сеточной области. Коэффициенты $b_i(t)$ определяются из следующего уравнения:

$$\left(\frac{\partial \varphi_h}{\partial t}, \psi_i\right)(t) + [\varphi_h, \psi_i](t) + \sum_{k=1}^2 \left(a_k \frac{\partial \varphi_h}{\partial x_k}, \psi_i\right) + (F(\varphi_h), \psi_i)(t) = (f, \psi_i)(t), \quad (2.2)$$

при начальных условиях

$$(\varphi_h(\bar{x}, 0) - \varphi_0, \psi_i) = 0 \quad i = \overline{1, N}. \quad (2.3)$$

На основе описанного алгоритма задача (1.4)–(1.6) сводится к системе:

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial \varphi_h}{\partial t}, \psi_i\right) + [\varphi_h, \psi_i] + \sum_{k=1}^2 \left(a_k \frac{\partial \varphi_h}{\partial x_k}, \psi_i\right) + (F(\varphi_h), \psi_i) = (f, \psi_i) \\ (\varphi_h|_{t=0} - u_h, \psi_i) = 0, \\ -\left(\frac{\partial \varphi_h^*}{\partial t}, \psi_i\right) + [\varphi_h^*, \psi_i] - \sum_{k=1}^2 \left(a_k \frac{\partial \varphi_h^*}{\partial x_k}, \psi_i\right) + (F'(\varphi_h)\varphi_h^*, \psi_i) = (\widehat{\varphi} - \varphi_h, \psi_i) \\ (\varphi_h^*|_{t=T}, \psi_i) = 0, \end{cases} \quad (2.4)$$

$$(\alpha u_h - \varphi_h^*|_{t=0}, \psi_i) = 0, \quad i = \overline{1, N}. \quad (2.6)$$

Введем следующие функции: $\tilde{\varphi}_h = \varphi_h - \overline{\varphi}_h$, $\tilde{\varphi}_h^* = \varphi_h^* - \overline{\varphi}_h^*$, $\tilde{u}_h = u_h - \overline{u}_h$, где $\overline{\varphi}_h$, $\overline{\varphi}_h^*$, \overline{u}_h – решение линейной задачи:

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial \overline{\varphi}_h}{\partial t}, \psi_i\right) + [\overline{\varphi}_h, \psi_i] + \sum_{k=1}^2 \left(a_k \frac{\partial \overline{\varphi}_h}{\partial x_k}, \psi_i\right) = (f, \psi_i) \\ (\overline{\varphi}_h|_{t=0} - \overline{u}_h, \psi_i) = 0, \end{cases} \quad (2.7)$$

$$\begin{cases} -\left(\frac{\partial \overline{\varphi}_h^*}{\partial t}, \psi_i\right) + [\overline{\varphi}_h^*, \psi_i] - \sum_{k=1}^2 \left(a_k \frac{\partial \overline{\varphi}_h^*}{\partial x_k}, \psi_i\right) = (\widehat{\varphi} - \overline{\varphi}_h, \psi_i) \\ (\overline{\varphi}_h^*|_{t=T}, \psi_i) = 0, \end{cases} \quad (2.8)$$

$$(\alpha \overline{u}_h - \overline{\varphi}_h^*|_{t=0}, \psi_i) = 0, \quad i = \overline{1, N}. \quad (2.9)$$

Тогда задача для $\tilde{\varphi}_h$, $\tilde{\varphi}_h^*$, \tilde{u}_h имеет вид:

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial \tilde{\varphi}_h}{\partial t}, \psi_i\right) + [\tilde{\varphi}_h, \psi_i] + \sum_{k=1}^2 \left(a_k \frac{\partial \tilde{\varphi}_h}{\partial x_k}, \psi_i\right) + (F(\overline{\varphi}_h + \tilde{\varphi}_h), \psi_i) = 0 \\ (\tilde{\varphi}_h|_{t=0} - \tilde{u}_h, \psi_i) = 0, \end{cases} \quad (2.10)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} - \left(\frac{\partial \tilde{\varphi}_h^*}{\partial t}, \psi_i \right) + [\tilde{\varphi}_h^*, \psi_i] - \sum_{k=1}^2 \left(a_k \frac{\partial \tilde{\varphi}_h^*}{\partial x_k}, \psi_i \right) + \\ (F'(\bar{\varphi}_h + \tilde{\varphi}_h)(\bar{\varphi}_h^* + \tilde{\varphi}_h^*), \psi_i) = -(\tilde{\varphi}_h, \psi_i) \\ (\tilde{\varphi}_h^*|_{t=T}, \psi_i) = 0, \end{array} \right. \quad (2.11)$$

$$(\alpha \tilde{u}_h - \tilde{\varphi}_h^*|_{t=0}, \psi_i) = 0, \quad i = \overline{1, N}. \quad (2.12)$$

Для её решения рассмотрим метод последовательных приближений в виде:

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{\partial \tilde{\varphi}_h^{(n+1)}}{\partial t}, \psi_i \right) + [\tilde{\varphi}_h^{(n+1)}, \psi_i] + \sum_{k=1}^2 \left(a_k \frac{\partial \tilde{\varphi}_h^{(n+1)}}{\partial x_k}, \psi_i \right) + (F'(\bar{\varphi}_h + \tilde{\varphi}_h^{(n)}), \psi_i) = 0, \\ (\tilde{\varphi}_h^{(n+1)}|_{t=0} - \tilde{u}_h^{(n+1)}, \psi_i) = 0, \end{array} \right. \quad (2.13)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} - \left(\frac{\partial \tilde{\varphi}_h^{*(n+1)}}{\partial t}, \psi_i \right) + [\tilde{\varphi}_h^{*(n+1)}, \psi_i] - \sum_{k=1}^2 \left(a_k \frac{\partial \tilde{\varphi}_h^{*(n+1)}}{\partial x_k}, \psi_i \right) + \\ + (F'(\bar{\varphi}_h + \tilde{\varphi}_h^{(n)})(\bar{\varphi}_h^* + \tilde{\varphi}_h^{*(n)}), \psi_i) = -(\tilde{\varphi}_h^{(n+1)}, \psi_i) \\ (\tilde{\varphi}_h^{*(n+1)}|_{t=T}, \psi_i) = 0, \end{array} \right. \quad (2.14)$$

$$(\alpha \tilde{u}_h^{(n+1)} - \tilde{\varphi}_h^{*(n+1)}|_{t=0}, \psi_i) = 0, \quad i = \overline{1, N}. \quad (2.15)$$

Для обоснования сходимости метода (2.13)–(2.15) необходимо исследование линейной задачи (2.7)–(2.9), которое мы проведем в следующем параграфе.

3. СВОЙСТВА ЛИНЕЙНОЙ ЗАДАЧИ

Рассмотрим линейную задачу (2.7)–(2.9) при фиксированных $f, \hat{\varphi} \in Y = L_2(\Omega \times (0, T))$. Справедлива

Теорема 3.1. Пусть $f, \hat{\varphi} \in Y$. Тогда при $\alpha > 0$ задача (2.7)–(2.9) имеет единственное решение $\bar{\varphi}_h, \bar{\varphi}_h^*, \bar{u}_h$, для которого справедлива оценка

$$\|\bar{\varphi}_h\|_Y + \|\bar{\varphi}_h^*\|_Y + \|\bar{u}_h\| \leq c(\|f\|_Y + \|\hat{\varphi}\|_Y), \quad c = \text{const} > 0. \quad (3.1)$$

Эта теорема вытекает из хорошо известных результатов [6], [9], [13] по разрешимости таких задач. В данном параграфе мы докажем оценку (3.1) и выпишем постоянную c в явном виде – она понадобится в дальнейшем для формулировки теоремы о сходимости метода последовательных приближений.

Прежде сформулируем следующую лемму.

Лемма 3.1. Для решения $\bar{\varphi}_h$ задачи (2.7) справедлива априорная оценка

$$\|\bar{\varphi}_h|_{t=T}\|^2 + \mu\|\bar{\varphi}_h\|_Y^2 \leq \frac{1}{\mu}\|f\|_Y^2 + \|\bar{\varphi}_h|_{t=0}\|^2, \quad (3.2)$$

где $\mu = \frac{9}{4}\gamma \text{mes } \Omega$, а γ – постоянная, определяющая эллиптичность исходного оператора A .

Доказательство. Из уравнений (2.7) обычным образом [13] получается тождество

$$\left(\frac{\partial \bar{\varphi}_h}{\partial t}, \bar{\varphi}_h \right) + [\bar{\varphi}_h, \bar{\varphi}_h] = (f, \bar{\varphi}_h),$$

интегрируя которое по t от 0 до T , приходим к равенству

$$\frac{1}{2}\|\bar{\varphi}_h\|^2(T) + \int_0^T [\bar{\varphi}_h]^2(t') dt' = \int_0^T (f, \bar{\varphi}_h) dt' + \frac{1}{2}\|\bar{\varphi}_h\|^2(0).$$

Поскольку

$$[\bar{\varphi}_h]^2 \geq \gamma \int_{\Omega} \sum_{k=1}^2 \left(\frac{\partial \bar{\varphi}_h}{\partial x_k} \right)^2 d\bar{x} \geq \gamma C^2(\Omega) \|\bar{\varphi}_h\|^2,$$

где $C(\Omega) = \frac{3}{2}(\text{mes } \Omega)^{1/2}$ – постоянная из неравенства Пуанкаре-Фридрихса [27], то для любого $\varepsilon > 0$ имеем

$$\frac{1}{2}\|\bar{\varphi}_h\|^2(T) + \mu\|\bar{\varphi}_h\|_Y^2 \leq \frac{1}{4\varepsilon}\|f\|_Y^2 + \varepsilon\|\bar{\varphi}_h\|_Y^2 + \frac{1}{2}\|\bar{\varphi}_h\|^2(0).$$

Полагая в последнем неравенстве $\varepsilon = \mu/2$, приходим к (3.2).

Аналогичная оценка справедлива и для решения $\bar{\varphi}_h^*$ сопряженной задачи (2.8). Докажем теперь теорему 3.1.

Доказательство теоремы 3.1. В силу леммы 3.1 для решений уравнений (2.7)–(2.8) справедливы представления

$$\bar{\varphi}_h = G_0 \bar{u}_h + G_1 f, \quad \bar{\varphi}_h^* = G_1^{(T)} (\hat{\varphi} - \bar{\varphi}_h),$$

где $G_0 : H \rightarrow Y$, $G_1 : Y \rightarrow Y$, $G_1^{(T)} : Y \rightarrow Y$ – линейные ограниченные операторы. Исключая $\bar{\varphi}_h$, $\bar{\varphi}_h^*$ из (2.7), (2.8) и подставляя результаты в (2.9), приходим к уравнению для управления \bar{u}_h :

$$L\bar{u}_h = P, \quad (3.3)$$

где $L = T_0 G_1^{(T)} G_0 + \alpha E$, $P = T_0 G_1^{(T)} (\hat{\varphi} - G_1 f)$, $T_0 \varphi = \varphi|_{t=0}$, $E\varphi = \varphi$.

Рассмотрим оператор L на конечномерном подпространстве H_N – линейной оболочке базисных функций $\{\psi_i\}_{i=1, \dots, N}$. Этот оператор симметричен и при $\alpha \geq 0$ положительно определен, т.к.

$$(L\bar{u}_h, \bar{u}_h) = \alpha\|\bar{u}_h\|^2 + \int_0^T \|G_1 \bar{u}_h\|^2 dt > 0.$$

Тогда уравнение $L\bar{u}_h = P$ имеет единственное решение, для которого справедлива оценка

$$\|\bar{u}_h\| \leq d\|P\|, \quad (3.4)$$

где $d = 1/\lambda_{\min}(L)$, а $\lambda_{\min}(L)$ – наименьшее собственное значение оператора L . Очевидно, что $\lambda_{\min}(L) \geq \alpha$.

Для оценки P воспользуемся леммой 3.1. Имеем:

$$\|P\| \leq \frac{1}{\sqrt{\mu}}(\|\hat{\varphi} - G_1 f\|_Y) \leq \frac{1}{\sqrt{\mu}}\|\hat{\varphi}\|_Y + \mu^{-3/2}\|f\|_Y,$$

тогда согласно (3.4)

$$\|\bar{u}_h\| \leq d\mu^{-1/2}\|\hat{\varphi}\|_Y + d\mu^{-3/2}\|f\|_Y. \quad (3.5)$$

Поскольку $\bar{\varphi}_h$ – решение задачи (2.7), то по лемме 3.1

$$\|\bar{\varphi}_h\|_Y \leq \frac{1}{\mu}\|f\|_Y + \mu^{-1/2}\|u\|,$$

а с учётом (3.5)

$$\|\bar{\varphi}_h\|_Y \leq \left(\frac{1}{\mu} + \frac{d}{\mu^2}\right)\|f\|_Y + \frac{d}{\mu}\|\hat{\varphi}\|_Y. \quad (3.6)$$

Аналогично получаем для решения сопряженной задачи (2.8) с учетом (3.6):

$$\|\bar{\varphi}_h^*\|_Y \leq \frac{1}{\mu}\|\hat{\varphi} - \bar{\varphi}_h\|_Y \leq \frac{1}{\mu}\|\hat{\varphi}\|_Y + \left(\frac{1}{\mu^2} + \frac{d}{\mu^3}\right)\|f\|_Y + \frac{d}{\mu^2}\|\hat{\varphi}\|_Y. \quad (3.7)$$

Суммируя (3.5)–(3.7), получаем оценку (3.1), где

$$c = \max\left(\frac{d}{\sqrt{\mu}} + \frac{d}{\mu} + \frac{1}{\mu} + \frac{d}{\mu^2}, \frac{d}{\mu^{3/2}} + \frac{1}{\mu} + \frac{d}{\mu^2} + \frac{1}{\mu^2} + \frac{d}{\mu^3}\right).$$

Теорема доказана.

4. СХОДИМОСТЬ МЕТОДА ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫХ ПРИБЛИЖЕНИЙ

Прежде всего исследуем свойства нелинейного оператора исходной задачи. Рассмотрим функцию $\Phi(x) = Qe^{-\theta/\rho x}$, $x \in (0, \infty)$, определяющую нелинейный оператор $F(\varphi)$. Непосредственным вычислением проверяется

Лемма 4.1. Для функции Φ и её производных Φ' , Φ'' справедливы оценки

$$|\Phi(x)| \leq Q, \quad |\Phi'(x)| \leq q_1 Q, \quad |\Phi''(x)| \leq q_2 Q, \quad (4.1)$$

где $q_1 = \frac{4\rho}{\theta}e^{-2}$, $q_2 = \max(\Theta_1, \Theta_2)$, $\Theta_i = |\Phi''(\xi_i)|$, $i = 1, 2$, $\xi_{1,2} = \frac{\theta}{2}\left(\frac{1}{2} \pm \frac{\sqrt{3}}{6}\right)$, $\Phi''(x) = \theta \exp\left\{-\frac{\theta}{\rho x}\left(\frac{\theta}{\rho} - 2x\right)\right\}/\rho x^4$, $x \in (0, \infty)$.

Из леммы 4.1 вытекает

Лемма 4.2. *Оператор F ограничен из Y в Y , непрерывно дифференцируем по Фреше и*

$$\|F(\varphi)\|_Y \leq Q\sqrt{T\text{mes}\Omega}, \quad \|F'(\varphi)\psi\|_Y \leq q_1Q\|\psi\|_Y, \quad \forall \varphi, \psi \in Y, \quad (4.2)$$

где постоянная q_1 определена в (4.1).

Рассмотрим теперь метод последовательных приближений (2.13)–(2.15) и докажем следующую теорему.

Теорема 4.1. *Пусть начальное приближение $\tilde{\varphi}_h^{(0)}$, $\tilde{\varphi}_h^{*(0)}$, $\tilde{u}_h^{(0)}$ лежит в шаре радиуса R :*

$$\|\tilde{\varphi}_h^{(0)}\|_Y + \|\tilde{\varphi}_h^{*(0)}\|_Y + \|\tilde{u}_h^{(0)}\| \leq R, \quad R > 0.$$

Тогда при $Q \leq 1/(cq_1 + g_0/R)$, где $g_0 = cq_1(\|\bar{\varphi}_h\|_Y + \|\bar{\varphi}_h^*\|_Y + \|\bar{u}_h\|)$, на каждой итерации метода (2.13)–(2.15) решение $\tilde{\varphi}_h^{(n)}$, $\tilde{\varphi}_h^{*(n)}$, $\tilde{u}_h^{(n)}$ также остается в этом шаре.

Доказательство. Рассмотрим итерационный процесс (2.13)–(2.14) при $\|\tilde{\varphi}_h^{(0)}\|_Y + \|\tilde{\varphi}_h^{*(0)}\|_Y + \|\tilde{u}_h^{(0)}\| \leq R$. Поскольку (при фиксированном n) $\tilde{\varphi}_h^{(n+1)}$, $\tilde{\varphi}_h^{*(n+1)}$, $\tilde{u}_h^{(n+1)}$ – решение линейной задачи, то в силу теоремы 3.1 и леммы 4.2

$$\begin{aligned} \|\tilde{\varphi}_h^{(n+1)}\|_Y + \|\tilde{\varphi}_h^{*(n+1)}\|_Y + \|\tilde{u}_h^{(n+1)}\| &\leq c(\|F(\bar{\varphi}_h + \tilde{\varphi}_h^{(n)})\|_Y + \|F'(\bar{\varphi}_h + \tilde{\varphi}_h^{(n)})(\bar{\varphi}_h^* + \tilde{\varphi}_h^{*(n)})\|_Y) \leq \\ &\leq cq_1Q(\|\bar{\varphi}_h + \tilde{\varphi}_h^{(n)}\|_Y + \|\bar{\varphi}_h^* + \tilde{\varphi}_h^{*(n)}\|_Y) \leq cq_1Q(\|\tilde{\varphi}_h^{(n)}\|_Y + \|\tilde{\varphi}_h^{*(n)}\|_Y) + cq_1Q(\|\bar{\varphi}_h\|_Y + \|\bar{\varphi}_h^*\|_Y). \end{aligned}$$

Последовательно применяя это неравенство, получаем

$$\|\tilde{\varphi}_h^{(n)}\|_Y + \|\tilde{\varphi}_h^{*(n)}\|_Y + \|\tilde{u}_h^{(n)}\| \leq (cq_1Q)^n(\|\tilde{\varphi}_h^{(0)}\|_Y + \|\tilde{\varphi}_h^{*(0)}\|_Y) + \frac{1 - (cq_1Q)^n}{1 - cq_1Q}g_0Q \leq R,$$

если $Q \leq 1/(cq_1 + g_0/R)$. Таким образом, приближённое решение на каждой итерации остаётся в шаре радиуса R .

В условиях теоремы 4.1 справедлива также оценка

$$\max_t \|\tilde{\varphi}_h^{(n)}\|_{L_\infty(\Omega)} + \max_t \|\tilde{\varphi}_h^{*(n)}\|_{L_\infty(\Omega)} + \|\tilde{u}_h^{(n)}\|_{L_\infty(\Omega)} \leq qR \quad (4.3)$$

с постоянной q , не зависящей от n и R . Эта оценка следует из вложения подпространства H_N кусочно-линейных функций из $L_2(\Omega)$ вида $v_h = \sum_{i=1}^N b_i\psi_i$ в $L_\infty(\Omega)$ [26].

Чтобы доказать сходимость метода последовательных приближений, требуется наложить на Q дополнительные ограничения. Справедлива

Теорема 4.2. *Пусть начальное приближение $\tilde{\varphi}_h^{(0)}$, $\tilde{\varphi}_h^{*(0)}$, $\tilde{u}_h^{(0)}$ лежит в шаре радиуса $R = r_0 = \|\bar{\varphi}_h\|_Y + \|\bar{\varphi}_h^*\|_Y + \|\bar{u}_h\|$. Тогда при $Q < Q_0$, где $Q_0 = [2c(q_1 + qq_2r_0)]^{-1}$, метод последовательных приближений (2.13)–(2.15) сходится.*

Доказательство. Выберем $R = r_0$ в теореме 4.1, тогда утверждение теоремы 4.1 справедливо при $Q \leq 1/(2cq_1)$. Исходя из (2.13)–(2.15) запишем для разностей $\xi_n = \tilde{\varphi}_h^{(n+1)} - \tilde{\varphi}_h^{(n)}$, $\xi_n^* = \tilde{\varphi}_h^{*(n+1)} - \tilde{\varphi}_h^{*(n)}$, $v_n = \tilde{u}_h^{(n+1)} - \tilde{u}_h^{(n)}$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{\partial \xi_n}{\partial t}, \psi_i \right) + [\xi_n, \psi_i] + \sum_{k=1}^2 (a_k \frac{\partial \xi_n}{\partial x_k}, \psi_i) = (F(\overline{\varphi}_h + \tilde{\varphi}_h^{(n-1)}) - F(\overline{\varphi}_h + \tilde{\varphi}_h^{(n)}), \psi_i) \\ (\xi_n|_{t=0} - v_n, \psi_i) = 0, \end{array} \right. \quad (4.4)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} - \left(\frac{\partial \xi_n^*}{\partial t}, \psi_i \right) + [\xi_n^*, \psi_i] - \sum_{k=1}^2 (a_k \frac{\partial \xi_n^*}{\partial x_k}, \psi_i) = (F'(\overline{\varphi}_h + \tilde{\varphi}_h^{(n-1)})(\overline{\varphi}_h^* + \tilde{\varphi}_h^{*(n-1)}), \psi_i) - \\ - (F'(\overline{\varphi}_h + \tilde{\varphi}_h^{(n)})(\overline{\varphi}_h^* + \tilde{\varphi}_h^{*(n)}), \psi_i) - (\xi_n, \psi_i) \\ (\xi_n^*|_{t=T}, \psi_i) = 0 \end{array} \right. \quad (4.5)$$

$$(\alpha v_n - \xi_n^*|_{t=0}, \psi_i) = 0, \quad i = \overline{1, N}. \quad (4.6)$$

Используя теорему 3.1 и лемму 4.1, 4.2, из (4.4)–(4.6) и (4.3) получаем оценки

$$\begin{aligned} \|\xi_n\|_Y + \|\xi_n^*\|_Y + \|v_n\| &\leq c(\|F(\overline{\varphi}_h + \tilde{\varphi}_h^{(n-1)}) - F(\overline{\varphi}_h + \tilde{\varphi}_h^{(n)})\|_Y + \\ &\|F'(\overline{\varphi}_h + \tilde{\varphi}_h^{(n-1)})(\tilde{\varphi}_h^{*(n)} - \tilde{\varphi}_h^{*(n-1)})\|_Y + \|(F'(\overline{\varphi}_h + \tilde{\varphi}_h^{(n)}) - F'(\overline{\varphi}_h + \tilde{\varphi}_h^{(n-1)}))(\overline{\varphi}_h^* + \tilde{\varphi}_h^{*(n)})\|_Y) \\ &\leq cQ(q_1 \|\tilde{\varphi}_h^{(n)} - \tilde{\varphi}_h^{(n-1)}\|_Y + q_1 \|\tilde{\varphi}_h^{*(n)} - \tilde{\varphi}_h^{*(n-1)}\|_Y + 2qq_2r_0 \|\tilde{\varphi}_h^{(n)} - \tilde{\varphi}_h^{(n-1)}\|_Y) \\ &= \Theta(\|\tilde{\varphi}_h^{(n)} - \tilde{\varphi}_h^{(n-1)}\|_Y + \|\tilde{\varphi}_h^{*(n)} - \tilde{\varphi}_h^{*(n-1)}\|_Y), \end{aligned}$$

где $\Theta = cQ(q_1 + 2qq_2r_0)$.

Из последней оценки заключаем, что для любых натуральных m и n справедливо неравенство:

$$\|\tilde{\varphi}_h^{(n+m)} - \tilde{\varphi}_h^{(n)}\|_Y + \|\tilde{\varphi}_h^{*(n+m)} - \tilde{\varphi}_h^{*(n)}\|_Y + \|\tilde{u}_h^{(n+m)} - \tilde{u}_h^{(n)}\| \leq \frac{\Theta^n - \Theta^{n+m}}{1 - \Theta}, \quad k = \text{const} > 0. \quad (4.7)$$

Поскольку по условию теоремы $\Theta < 1$, то из (4.7) следует, что метод последовательных приближений сходится.

5. ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ОБ УСВОЕНИИ ДАННЫХ

В настоящем параграфе мы приведем некоторые результаты численных экспериментов на основе сформулированного выше вычислительного алгоритма.

На каждом шаге метода последовательных приближений (2.13)–(2.14) необходимо решать линейную задачу вида:

$$\begin{cases} \frac{d\varphi}{dt} + A^h(t)\varphi = \tilde{f}, \\ \varphi|_{t=0} = u, \end{cases} \quad (5.1)$$

$$\begin{cases} -\frac{d\varphi^*}{dt} + A^{h^*}(t)\varphi^* = -\varphi + g, \\ \varphi^*|_{t=T} = 0, \end{cases} \quad (5.2)$$

$$\alpha u - \varphi^*|_{t=0} = 0, \quad (5.3)$$

где $\varphi = \varphi(t)$, $\varphi^* = \varphi^*(t)$, u – неизвестные векторы длины N , $A^h(t)$, A^{h^*} – матрицы размера N , $\tilde{f} = \tilde{f}(t)$, $g = g(t)$ – заданные вектор-функции.

Для решения системы (5.1)–(5.3) воспользуемся итерационными методами, разработанными в [21], [22]. Один из таких методов (после аппроксимации задачи по временной переменной на основе схем Кранка-Николсон) формулируется следующим образом [22]:

$$\begin{cases} \frac{\varphi^{k+1(j)} - \varphi^{k(j)}}{\tau} + A^{k+1/2} \frac{\varphi^{k+1(j)} + \varphi^{k(j)}}{2} = \tilde{f}^{k+1/2}, \\ \varphi^{0(j)} = u^j \end{cases} \quad (5.4)$$

$$\begin{cases} -\frac{\varphi^{*k+1(j)} - \varphi^{*k(j)}}{\tau} + A^{*k+1/2} \frac{\varphi^{*k+1(j)} + \varphi^{*k(j)}}{2} = -\varphi^{k+1/2(j)} + g^{k+1/2}, \\ \varphi^{*M(j)} = 0, \end{cases} \quad (5.5)$$

$$u^{j+1} = u^j + \alpha_{j+1}(\varphi^{*0(j)} - \alpha u^j) + \beta_{j+1}(u^j - u^{j-1}), \quad (5.6)$$

где α_{j+1} , β_{j+1} – итерационные параметры, $\varphi^{k(j)}$, $\varphi^{*k(j)}$, u^j – итерационные последовательности, $\varphi^{k+1/2(j)} = \frac{\varphi^{k+1(j)} + \varphi^{k(j)}}{2}$, τ – шаг сетки по времени, $k = 0, M-1$, $\tau = T/M$.

Сходимость итерационного процесса (5.4)–(5.6) исследована в [22]. Для решения линейных задач (5.4), (5.5) на каждом шаге итерационного процесса (5.4)–(5.6) был выбран BiCGSTAB-метод [28], [29].

Таким образом, вычислительный алгоритм состоял из внешнего итерационного процесса (2.13)–(2.15), на каждом шаге которого применялся внутренний итерационный процесс вида (5.4)–(5.6).

Приведем теперь некоторые результаты численных экспериментов. В рассматриваемых примерах шаги по пространству выбирались одинаковыми и равными $h = 0.05$, а шаги по времени $\tau = 0.05$. Критерием остановки итерационных

процессов (как внутреннего, так и внешнего) являлось условие

$$\frac{\|u^{j+1} - u^j\|}{\|u^j\|} < \varepsilon,$$

где $\varepsilon = h^2 = 2.5 \cdot 10^{-3}$, а $\|\cdot\|$ – разностный аналог нормы в $L_2(\Omega)$.

В первой серии экспериментов исследовалась сходимость итерационных методов при следующих входных параметрах и функциях: $a_{ij} = 1$, $i = j$; $a_{ij} = 0$, $i \neq j$; $a_i = 0, a = 0$, $Q = \theta = \rho = 1$. Решение φ прямой задачи (1.1) было задано аналитически, и оно рассматривалось в качестве $\hat{\varphi} = \hat{\varphi}(x_1, x_2, t)$, где $t \in (0, 1)$, $x_1 \in (0, 1)$, $x_2 \in (0, 1)$. Затем предполагалось, что u неизвестно, и для его отыскания из (2.4)–(2.6) мы воспользовались алгоритмом, описанным выше, с начальным приближением $u^0 = x_1^2 x_2^2 (1 - x_1)(1 - x_2)$, полагая согласно [21]

$$\alpha_{j+1} = \begin{cases} \frac{2}{\Delta + \delta}, & j = 0 \\ \frac{4}{\Delta - \delta} \frac{T_j(\varpi)}{T_{j+1}(\varpi)}, & j > 0 \end{cases}; \quad \beta_{j+1} = \begin{cases} 0, & j = 0 \\ \frac{T_{j-1}(\varpi)}{T_{j+1}(\varpi)}, & j > 0, \end{cases} \quad (5.7)$$

где

$$\varpi = \frac{\Delta + \delta}{\Delta - \delta}, \quad \delta = \alpha + (2\lambda_{\max})^{-1} \left[1 - \left(\frac{1 - \tau\lambda_{\max}/2}{1 + \tau\lambda_{\max}/2} \right)^{2T/\tau} \right],$$

$$\Delta = \alpha + (2\lambda_{\min})^{-1} \left[1 - \left(\frac{1 - \tau\lambda_{\min}/2}{1 + \tau\lambda_{\min}/2} \right)^{2T/\tau} \right],$$

$$\lambda_{\max} = \frac{8}{h^2} \cos^2 \frac{\pi h}{2}, \quad \lambda_{\min} = \frac{8}{h^2} \sin^2 \frac{\pi h}{2}.$$

В табл. 5.1 приведена зависимость числа всех внутренних итераций, необходимых для отыскания приближенного решения с требуемой точностью ε , от параметра регуляризации α для различных значений α . Как видно из табл. 5.1, с уменьшением параметра регуляризации α количество итераций возрастает.

Таблица 5.1. Зависимость числа итераций $n(\varepsilon)$ от параметра регуляризации

Параметр α	1	0.5	0.2	0.1	0.05	0.01	0.001	0.0005
Количество итераций n	8	8	8	9	11	16	42	54

Введение регуляризатора с параметром α , как известно [18], приводит к решению u задачи (5.1)–(5.3), которое отличается от решения \bar{u} , полученного из (5.1)–(5.3) при $\alpha = 0$, на величину $O(\alpha)$. Обозначим через R относительную погрешность $R = \|u^j - \bar{u}\|/\|\bar{u}\|$, где u^j – приближенное решение, найденное с помощью рассматриваемого алгоритма. В табл. 5.2 приведены значения R при различных α . Из таблицы видно, что с уменьшением параметра регуляризации α величина погрешности R уменьшается, однако при этом растет число итераций в алгоритме.

Таблица 5.2. Зависимость величины погрешности R от параметра регуляризации

Параметр α	1	0.5	0.2	0.1	0.05	0.01	0.001	0.0005
Погрешность R	0.9765	0.9541	0.8931	0.8078	0.6804	0.3167	0.0586	0.0351

Одной из важнейших характеристик задач данного типа является значение минимизируемого функционала (1.2). В табл. 5.3 приведены значения функционала $S(\varphi)$ по итерациям для некоторых значений α . В табл. 5.4 представлены значения функционала $S(\varphi)$ при различных значениях α после окончания процесса инициализации начального условия.

Таблица 5.3. Величина функционала $S(\varphi)$ по итерациям для некоторых значений α

Параметр α	1	0.1	0.05
Итерации			
0	0.12732	0.11895	0.11848
1	0.02019	0.01666	0.01356
2	0.02009	0.01687	0.01419
3	0.02006	0.01649	0.01328
4	0.02006	0.01654	0.01352
5	0.02006	0.01653	0.01341
6	*	0.01652	0.01345
7		0.01653	0.01342
8		0.01653	0.01343
9		*	0.01343
...
17			0.01343

Таблица 5.4. Зависимость величины функционала $S(\varphi)$ от параметра регуляризации α

Параметр α	1	0.5	0.2	0.1	0.05
$S(\varphi)$	0.02006	0.01963	0.01839	0.01653	0.01343

Выводы

Метод последовательных приближений (2.13)–(2.15), использованный для решения нелинейной системы (2.10)–(2.12), сходится достаточно быстро – во всех рассматриваемых случаях требовалось 2-3 итерации для внешнего итерационного процесса. Что касается внутреннего итерационного процесса, то его сходимость определяется величиной параметра регуляризации α . Если $0.05 \leq \alpha \leq 1$, то количество итераций невелико, – в этом преимущество введения регуляризатора. Недостатком же является тот факт, что при введении регуляризатора

в решение задачи вносится погрешность. С уменьшением α погрешность уменьшается, но при этом число внутренних итераций резко возрастает.

В заключение авторы выражают свою глубокую благодарность академику Гурию Ивановичу Марчуку за постоянный интерес к работам в области исследования и численного решения задач вариационного усвоения данных на основе сопряженных уравнений, за плодотворные обсуждения и всестороннюю поддержку.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Понтрягин Л.С. Избранные труды. –М.: Наука, 1998.
- [2] Красовский Н.Н. Теория управления движением. –М.: Наука, 1969.
- [3] Марчук Г.И. О постановке некоторых обратных задач // ДАН СССР. 1964. Т.156, №3. С.503–506.
- [4] Марчук Г.И. Уравнение для ценности информации с метеорологических спутников и постановка обратных задач // Космич. исслед. 1964. Т.2. Вып.3. С.462–477.
- [5] Летов А.М. Динамика полета и управления. –М.: Наука, 1969.
- [6] Лионс Ж.-Л. Оптимальное управление системами, описываемыми уравнениями с частными производными. –М.: Мир, 1972.
- [7] Marchuk G.I., Penenko V.V. Application of optimization methods to the problem of mathematical simulation of atmospheric processes and environment // Modelling and Optimization of Complex Systems: Proc. of the IFIP-TC7 Work. conf. New York: Springer, 1978. P. 240-252.
- [8] Le Dimet F.X., Talagrand O. Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorological observations: theoretical aspects // Tellus. 1986. 38A. P. 97-110.
- [9] Агошков В. И. Разрешимость одного класса задач нечувствительного оптимального управления и применение методов возмущений // Research Report DNM 91/2, –М.: ИВМ РАН, 1991.
- [10] Kurzhanskii A.B., Khapalov A.Yu. An observation theory for distributed-parameter systems // J. Math. Syst. Estim. Control. 1991. V.1, №. 4, P.389-440
- [11] Ипатова В.М. Задача усвоения данных для модели общей циркуляции океана в квазигеострофическом приближении. –М.: ИВМ РАН, 1992.– Деп. в ВИНТИ 17.07.92, №2333–1392.

- [12] Zou X., Navon I.M., Le Dimet F.X. Incomplete observations and control of gravity waves in variational data assimilation // *Tellus A*. 1992. V. 44A. P.273–296.
- [13] Agoshkov V.I., Marchuk G.I. On solvability and numerical solution of data assimilation problems // *Russ. J. Numer. Analys. Math. Modelling*. 1993. V. 8. № 1. P. 1–16.
- [14] Марчук Г.И., Агошков В.И., Шутяев В.П. Сопряженные уравнения и методы возмущений в нелинейных задачах математической физики. –М.: Наука, 1993.
- [15] Marchuk G.I., Zalesny V.B. A numerical technique for geophysical data assimilation problem using Pontryagin’s principle and splitting-up method // *Russian J. Numer. Analys. Math. Modelling*. 1993. V. 8. №4. P. 311–326.
- [16] Agoshkov V.I. Control theory approaches in data assimilation processes, inverse problems and hydrodynamics // *Computer Mathematics and its Applications*. 1994. V.1. P. 21.
- [17] Glowinski R., Lions J.L. Exact and approximate controllability for distributed parameter systems // *Acta Numerica*. 1994. V.1. P. 269.
- [18] Marchuk G.I., Shutyaev V.P. Iteration methods for solving a data assimilation problem // *Russ. J. Numer. Analys. Math. Modelling*. 1994. V. 9. №3. P. 265–279.
- [19] Венцель М., Залесный В.Б. Усвоение данных в одномерной модели конвекции-диффузии тепла в океане // *Известия РАН. Физика атмосферы и океана*. 1996. Т.32, №5. С. 613–629.
- [20] Евтушенко Ю.Г., Засухина Е.С., Зубов В.И. О численном подходе к оптимизации решения задачи Бюргера с помощью граничных условий // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 1997. Т.2. №12. С. 1449–1458.
- [21] Пармузин Е.И., Шутяев В.П. О численных алгоритмах решения одной задачи об усвоении данных // *ЖВМ и МФ*. 1997. Т.37, №7. С. 816–827.
- [22] Parmuzin E.I., Shutyaev V.P. Numerical analysis of iterative methods for solving evolution data assimilation problems // *Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling*. Vol. 14. №3. 1999. P. 265–274.
- [23] Гельфанд И.М. Некоторые задачи теории квазилинейных уравнений // *Успехи матем. наук*. 1959. Т. XIV. Вып. 2(86). С. 87–158.
- [24] Хенри Д. Геометрическая теория полулинейных параболических уравнений. –М.: Мир, 1985.

- [25] Шутяев В.П. Об усвоении данных в шкале гильбертовых пространств для квазилинейных эволюционных задач // Дифф. уравнения. 1998. Т.34, №3. С. 383–389.
- [26] Марчук Г.И., Агошков В.И. Введение в проекционно-сеточные методы. –М.: Наука, 1981.
- [27] Лебедев В.И. Функциональный анализ и вычислительная математика. –М.: ВИНТИ, 1994.
- [28] Freund R.W., Golub G.H., N.M. Nachtigal. Iterative solution of linear systems // Acta Numerica. 1992. P. 57–100.
- [29] H. van der Vorst. Bi-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems // SIAM J. Sci. Statist. Comput. 1992. V. 13. P. 631–644.

Модели и методы в задачах физики атмосферы

Метод функции Грина в нелинейных задачах физики атмосферы ¹

В. П. ДЫМНИКОВ

Институт вычислительной математики РАН

E-mail: dymnikov@inm.ras.ru

В работе рассматриваются несколько нелинейных задач физики атмосферы, в которых построение функции Грина являлось ключевым моментом. Анализируются два метода, в рамках которых строилась функция Грина: метод квазилинеаризации и метод линеаризации. Исследуется устойчивость обоих этих методов и показывается, что в методе квазилинеаризации решение сопряжённой задачи является устойчивым по Ляпунову по отношению к возмущениям начальных данных и правой части сопряжённой задачи. Вторая часть работы посвящена исследованию условий, при которых функция Грина в операторе отклика на малые внешние воздействия диссипативной климатической системы, хаотическая динамика которой рассматривается на её аттракторе, может быть определена через статистические характеристики решения.

1. МОДЕЛИ АТМОСФЕРНЫХ ПРОЦЕССОВ

В настоящей работе мы рассмотрим несколько классических задач физики атмосферы, в которых построение функции Грина было не только техническим приемом решения конкретной задачи, но и существенно повлияло на дальнейшее развитие методов исследования основных проблем физики атмосферы.

Прежде чем перейти непосредственно к конкретным задачам, определим общие характеристики объектов, которые мы будем исследовать. Речь будет идти о системах уравнений, описывающих крупномасштабную динамику атмосферных процессов. В общем виде эти системы можно записать следующим образом:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + K(\varphi) \cdot \varphi = -S\varphi + f, \quad \varphi|_{t=0} = \varphi_0, \quad (1)$$

$$\varphi \in \Phi, \quad f \in F,$$

¹Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 99-05-64038.

где Φ – некоторое вещественное гильбертово пространство со скалярным произведением (\cdot, \cdot) , $K(\varphi)$ – кососимметричный оператор, линейно зависящий от φ :

$$(K(\varphi)\varphi, \varphi) = 0, \quad K^* = -K;$$

S – положительно-определенный самосопряженный оператор (для простоты будем считать его линейным):

$$(S\varphi, \varphi) \geq \mu^2(\varphi, \varphi), \quad S = S^*.$$

Система (1) устроена таким образом, что в отсутствии диссипации, которая описывается оператором S , и внешнего возбуждения f в системе существует закон сохранения энергии:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t}(\varphi, \varphi) \equiv \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} \|\varphi\|^2 = 0. \quad (2)$$

Для конкретных систем может существовать и множество других законов сохранения, важность которых мы будем оговаривать специально. Мы будем считать, что для системы (1) существуют глобальные теоремы разрешимости, т.е. решение ее существует и единственно на любом конечном промежутке времени T .

Нетрудно видеть, что система (1) обладает поглощающим множеством, т.е. является диссипативной системой [1]. Из существования поглощающего множества и конкретного вида систем, описывающих крупномасштабную динамику атмосферы, следует существование глобального аттрактора конечной размерности [1]. Мы будем всегда предполагать, что динамика системы происходит на ее аттракторе, т.е. мы будем считать, что $\varphi_0 \in \mathcal{A}$, где \mathcal{A} – аттрактор системы (1). Важно отметить, что системы уравнений, описывающие атмосферную циркуляцию, порождают на своих аттракторах динамический хаос. Это означает, что траектория системы (1), выпущенная из почти любой $\varphi_0 \in \mathcal{A}$, неустойчива по Ляпунову. С физической точки зрения это значит, что в системе (1) реализуется либо баротропная, либо бароклиническая неустойчивость, либо они реализуются вместе. Следует, однако, заметить, что неустойчивость по Ляпунову, как и понятие аттрактора, есть понятие асимптотическое, требующее выполнения теоремы разрешимости на бесконечном промежутке времени.

Утверждение, что $\varphi(t)$ неустойчиво по Ляпунову, означает, что линеаризованный относительно $\varphi(t)$ оператор задачи (1) порождает положительные показатели Ляпунова. Пусть

$$M\varphi \equiv K(\varphi) \cdot \varphi + S\varphi.$$

Тогда линеаризация M относительно $\varphi(t)$ приводит к оператору:

$$A\varphi' \equiv K(\varphi(t)) \cdot \varphi' + K(\varphi') \cdot \varphi(t) + S\varphi'.$$

(Напомним, что $K(\varphi)$ линейно зависит от φ .) Если $\varphi = \varphi(t) + \varphi'$, то линеаризованное относительно $\varphi(t)$ уравнение для φ' будет иметь вид:

$$\frac{\partial \varphi'}{\partial t} + A(\varphi(t))\varphi' = 0, \quad \varphi'|_{t=0} = \varphi'_0. \quad (3)$$

Нетрудно видеть, что оператор A по своей структуре отличается от оператора M добавкой $K(\varphi') \cdot \varphi(t)$, которая, в принципе, и определяет характеристики неустойчивости решения $\varphi(t)$. (С физической точки зрения этот член определяет преобразование энергии из основного решения в возмущения.)

2. ПОСТРОЕНИЕ ФУНКЦИИ ГРИНА НА ОСНОВЕ МЕТОДА КВАЗИЛИНЕАРИЗАЦИИ

Ключевой задачей физики атмосферы всегда являлась задача прогноза погоды. Если говорить о краткосрочном прогнозе погоды, то в настоящее время прогресс в решении этой задачи совершенно очевиден, и достигнут он на пути все большего усложнения системы (1) (включения в f и S описания все большего числа физических процессов), увеличения пространственного и временного разрешения и применения новых численных методов решения уравнений гидротермодинамики, увеличения точности получения φ_0 и согласования φ_0 с прогностической системой уравнений. Однако из этого не следует, что первые работы по краткосрочному прогнозу погоды не стоит сейчас анализировать. Идеи, реализованные в них, по существу, используются и в настоящее время, может быть, в несколько видоизмененной форме. Впервые в задаче прогноза погоды идея построения функции Грина для нелинейной системы уравнений гидротермодинамики атмосферы на основе метода квазилинеаризации была реализована Булеевым и Марчуком [2]. В основе этого построения лежит уравнение для квазигеострофического вихря, которое было сформулировано Булеевым и Марчуком в этой работе.

Квазигеострофический вихрь можно представить в следующем виде:

$$q \equiv \Delta H + \frac{\partial}{\partial p} \frac{p^2}{m^2} \frac{\partial H}{\partial p},$$

где H – геопотенциал, p – давление, Δ – оператор Лапласа, $m^2 > 0$. С точки зрения физики атмосферы формулирование этого уравнения является большой заслугой Булеева и Марчука, поскольку оно является до настоящего времени фундаментальной основой построения теории крупномасштабной динамики атмосферы в средних широтах, в частности теории геострофической турбулентности.

Уравнение для q имеет вид

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \alpha^2 J(H, q) = \tilde{\varepsilon}. \quad (4)$$

Здесь $\tilde{\varepsilon}$ – член, описывающий источники и стоки квазигеострофического вихря, J – якобиан, $\alpha^2 = \text{const} > 0$.

Краевые условия при $p = p_0, p_1$ формулируются в виде

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial H}{\partial p} = f_1(H), \quad p = p_0, \quad p^2 \frac{\partial H}{\partial t} = 0, \quad p = p_1.$$

Определим оператор L следующим образом:

$$L \equiv \begin{cases} \Delta + \frac{\partial}{\partial p} \frac{p^2}{m^2} \frac{\partial}{\partial p} & p \in (p_1, p_0), \\ \frac{\partial}{\partial p} & p = p_0, \\ p^2. & p = p_1. \end{cases}$$

Тогда уравнение для H можно формально записать в виде

$$L \frac{\partial H}{\partial t} = F(H, \tilde{\varepsilon}).$$

Поскольку L – линейный невырожденный оператор, то его можно обратить:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = L^{-1} F(H, \tilde{\varepsilon}).$$

L^{-1} – интегральный оператор. Ядро этого оператора (функция Грина) при некоторых упрощающих предположениях может быть вычислено аналитически, что и было сделано Булеевым и Марчуком. В данном случае идея квазилинеаризации очевидна – вся нелинейная часть системы рассматривалась как заданная функция. На первый взгляд, использовать данную функцию Грина как функцию чувствительности кажется достаточно искусственным приёмом, однако это не так: при отсутствии источников и стоков квазигеострофического вихря этот вихрь есть лагранжев инвариант вдоль p -поверхностей, и, следовательно, всё взаимодействие между вихрями на различных p -поверхностях описывается оператором L .

Идея описания динамики атмосферы в терминах потенциального вихря представляется в настоящее время очень перспективной, что вызвано также и развитием так называемых полулагранжевых численных схем, которые очень эффективны для описания полей, имеющих лагранжевы инварианты. В рамках задачи для квазигеострофического вихря этот подход вместе с использованием метода расщепления выглядит очень изящным и естественным.

Второй принципиальный шаг при построении функции Грина для нелинейной системы типа (1) был сделан Марчуком также на основе метода квазилинеаризации [3].

Рассмотрим снова систему (1):

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + K(\varphi) \cdot \varphi = -S\varphi + f, \quad \varphi|_{t=0} = \varphi_0, \quad t \in [0, T]$$

и сопряженную к ней систему

$$-\frac{\partial \varphi^*}{\partial t} + K^*(\varphi) \cdot \varphi^* = -S^* + f^*, \quad \varphi^*|_{t=T} = \varphi_T^*. \quad (5)$$

В силу условия кососимметричности $K(\varphi)$ и симметричности S имеем:

$$K^*(\varphi) = -K(\varphi), \quad S^* = S,$$

так что система (5) может быть переписана в виде:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + K(\varphi)\varphi &= -S\varphi + f, & \varphi|_{t=0} &= \varphi_0, \\ -\frac{\partial \varphi^*}{\partial t} - K(\varphi) \cdot \varphi^* &= -S\varphi + f^*, & \varphi^*|_{t=T} &= \varphi_T^*. \end{aligned} \quad (6)$$

Умножим скалярно первое уравнение системы (6) на φ^* , второе на φ и вычтем второе из первого. Получим

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varphi, \varphi^*) + (K(\varphi)\varphi, \varphi^*) + (K(\varphi)\varphi^*, \varphi) = (f, \varphi^*) - (f^*, \varphi).$$

В силу тождества Лагранжа для вещественных функций

$$(K\varphi, \varphi^*) = (\varphi, K^*\varphi^*) = -(K\varphi^*, \varphi)$$

имеем

$$(\varphi, \varphi^*)_T - (\varphi, \varphi^*)_0 = \int_0^T (f, \varphi^*) dt - \int_0^T (f^*, \varphi) dt. \quad (7)$$

Это основное соотношение, полученное Марчуком, в котором φ^* играет роль функции Грина. Задавая специальным образом функции φ_T^*, f^* , можно получить целый ряд интересных соотношений. Мы, однако, остановимся только на двух моментах.

Система (6) нелинейна, однако при любом заданном $\varphi(t)$ второе уравнение системы линейно относительно φ^* . Вследствие этого можно сформулировать ряд утверждений. Например, справедливо следующее утверждение: решение сопряженного уравнения асимптотически устойчиво по Ляпунову относительно возмущений начальных данных и постоянно-действующих возмущений правой части (сопряженного уравнения).

Для доказательства этого утверждения мы должны предполагать, что решение $\varphi(t)$ существует на бесконечном промежутке времени $(0, \infty)$ и начальное условие для сопряженной задачи должно ставиться при $t = \infty$. Впрочем, само доказательство позволяет сформулировать результат для любого конечного T .

Сделаем для удобства замену переменных $t_1 = T - t$, так что уравнение для φ^* приведётся к виду:

$$\frac{\partial \varphi^*}{\partial t_1} - K(\varphi) \cdot \varphi^* = -S\varphi^* + f_1, \quad \varphi^*|_{t_1=0} = \varphi_0^*.$$

Пусть $\varphi_0^{*'} -$ возмущение начальных данных. Тогда уравнение для возмущения решения будет иметь вид

$$\frac{\partial \varphi^{*'}}{\partial t} - K(\varphi)\varphi^{*'} = -S\varphi^{*'} \quad (8)$$

Умножая (8) скалярно на $\varphi^{*'}$, получим

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \|\varphi^{*'}\|^2}{\partial t} = -(S\varphi^{*1}, \varphi^{*'}) \leq -\mu^2 \|\varphi^*\|^2,$$

то есть

$$\|\varphi^{*'}\| \leq e^{-\mu^2 t} \|\varphi_0^{*'}\|.$$

Аналогично доказывается устойчивость по отношению к постоянно-действующим возмущениям правой части. Уравнение для возмущения решения в этом случае имеет вид

$$\frac{\partial \varphi^{*'}}{\partial t_1} - K(\varphi)\varphi^{*'} = -S\varphi^{*'} + \delta f, \quad \varphi^{*'}|_{t_1=0} = 0.$$

Мы будем для простоты считать, что f , так же как и δf , не зависит от времени. Справедливы следующие соотношения:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{\partial \|\varphi^{*'}\|^2}{\partial t} &\leq -\mu^2 \|\varphi^*\|^2 + (\delta f, \varphi^{*'}) \leq \\ &\leq -\mu^2 \|\varphi^{*'}\|^2 + \|\delta f\| \cdot \|\varphi^{*'}\| \leq -\mu^2 \|\varphi^{*'}\|^2 + \frac{1}{2\varepsilon} \|\delta f\|^2 + \frac{\varepsilon}{2} \|\varphi^{*'}\|^2 = \\ &= \left(\frac{\varepsilon}{2} - \mu^2\right) \|\varphi^{*'}\|^2 + \frac{1}{2\varepsilon} \|\delta f\|^2. \end{aligned}$$

Выбирая, например, $\varepsilon = \mu^2$, окончательно получим:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \|\varphi^{*'}\|^2 &\leq -\mu^2 \|\varphi^{*'}\|^2 + \frac{1}{\mu^2} \|\delta f\|^2, \\ \|\varphi^{*'}\|^2 &\leq (1 - e^{-\mu^2 t}) \frac{1}{\mu^2} \|\delta f\|^2 \leq \frac{1}{\mu^2} \|\delta f\|^2. \end{aligned}$$

Сформулированные утверждения говорят о том, что несмотря на то, что решение основной задачи неустойчиво по Ляпунову, решение сопряженной задачи по Ляпунову устойчиво. Однако мы не должны забывать, что само решение сопряженной задачи есть функция решения исходной задачи, и проблему устойчивости в данном случае нужно изучать для совместной системы прямой и сопряженной задач, если мы хотим изучать, например, устойчивость функционала (7) по отношению к возмущениям правой части основной задачи. Эта проблема становится понятной, если мы перейдем от квазилинеаризации к линеаризации исходной системы.

3. Функция Грина для линеаризованных систем

Данную проблему мы рассмотрим в контексте одной важной практической задачи. Суть этой задачи состоит в следующем. Пусть система уравнений (1) описывает климатическую систему. Мы хотим исследовать отклик климатической системы на малые внешние воздействия – малые возмущения правой части f . Поскольку мы рассматриваем динамику этой системы на ее аттракторе, то

нас интересуют в первую очередь возмущения аттрактора как множества состояний климатической системы и возмущения инвариантной (эргодической) меры на нем. По этим характеристикам мы в принципе можем вычислить возмущения всех моментов от решения системы (1). Хотя сами решения системы

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + K(\varphi) \cdot \varphi = -S\varphi + f$$

неустойчивы по отношению к возмущениям правой части, но моменты от решения могут быть устойчивы.

Мы в данной работе рассмотрим в качестве отклика возмущение только первого момента и вначале опишем один замечательный результат, полученный Крейчнаном в 1959 г. [4] для лиувиллевых систем, обладающих квадратичным законом сохранения и находящимся в равновесии. Частным случаем таких систем являются гамильтоновы системы. Результат был сформулирован для конечномерных систем; таким образом, с точки зрения нашей задачи, мы будем рассматривать конечномерную аппроксимацию задачи (1) с $S = 0$, $f = 0$, сохраняющую условие кососимметричности и условие несжимаемости фазового потока для аппроксимации оператора $K(\varphi)$ (в дальнейшем речь будет всегда идти об этом случае). Итак, рассмотрим систему уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{du_i}{dt} &= Q_i(u), \quad i = 1, \dots, N, \quad u \in R^N, \\ u_i(0) &= u_{i0}. \end{aligned} \tag{9}$$

Пусть система (9) удовлетворяет уравнению Лиувилля

$$\sum_{i=1}^N \frac{\partial Q_i}{\partial u_i} = 0$$

и обладает квадратичным законом сохранения

$$\sum_{i=1}^N u_i^2 = C.$$

Если система находится в равновесии, то равновесная плотность функции распределения есть

$$\rho(u) = Ae^{-\sum_B \frac{u_i^2}{B}},$$

где A, B – нормировочные константы.

Рассмотрим возмущенную систему

$$\frac{du'_i}{dt} = Q_i(u') + \delta f_i, \quad u'_i(0) = u_{i0}. \tag{10}$$

Пусть $\delta u_i = u'_i - u_i$. Предположим, что $\|\delta f\|$ настолько мало, что на интервале $(0, t^*)$ $\|\delta u_i\|$ также мала, причем $\delta f \neq 0$ только при $t \geq 0$. Линеаризуем (10)

относительно u . Для δu_i справедлива формула

$$\delta u_i = \int_0^t \sum_j g_{ij}(t, t') \delta f_j dt', \quad (11)$$

или в векторном виде

$$\delta u = \int_0^t G(t, t') \delta f dt',$$

где $G(t, t')$ есть функция Грина.

Замечательный результат Крейчнана заключается в следующем: если усреднить (11) по равновесному ансамблю, задаваемому $\rho(u)$, то для усредненной функции Грина справедливо с точностью до малых второго порядка по $\|\delta u\|$ соотношение:

$$\langle G(t, t') \rangle = \langle G(\tau) \rangle = C(\tau)C^{-1}(0), \quad \tau = t' - t, \quad (12)$$

где $C(\tau) = \langle u(t+\tau) \cdot u'(t) \rangle$ – ковариационная матрица вектора при сдвиге τ . Соотношение (12) означает, что усредненная по равновесному ансамблю функция Грина может быть вычислена по статистическим характеристикам системы, а в силу эргодичности эти характеристики могут быть вычислены соответствующим усреднением вдоль траектории. Итак, мы можем написать

$$\langle \delta u \rangle = \int_0^t C(\tau)C^{-1}(0) \delta f d\tau. \quad (13)$$

При условии сходимости интеграла в правой части (13) при $t \rightarrow \infty$ для инфинитизимальных возмущений δf можно получить формулу для установившегося отклика:

$$\langle \delta u \rangle = \int_0^\infty C(\tau)C^{-1}(0) \delta f d\tau. \quad (14)$$

(Данная формула для изучения отклика климатической системы на малые внешние воздействия была впервые предложена Лейсом [5].) Мы вправе поставить вопрос: каким условиям должна удовлетворять диссипативная система (1), чтобы ее динамика на аттракторе была "квазигамильтоновой"? Под "квазигамильтоновостью" мы будем понимать на самом деле квазирегулярность, т.е. выполнение трех условий: энергия на аттракторе должна быть почти постоянной, фазовый поток почти несжимаем и стационарное статистическое решение должно быть близко к гауссовому распределению. Чтобы определить понятие "почти", мы должны определить в системе малые параметры, которые характеризуют динамику на аттракторе. Малость возмущения внешнего форсинга для диссипативной системы с внешним возбуждением определяется элементарно:

$$\frac{\|\delta f\|}{\|f\|} = \varepsilon \ll 1.$$

Определим следующие величины, характеризующие динамику системы (1) на ее аттракторе:

1. $\bar{\varphi} = \langle \varphi \rangle$ – первый момент ($\langle \cdot \rangle$ – знак усреднения по ансамблю состояний или по времени, т.к. мы предполагаем эргодичность).
 2. $\bar{E} = (\bar{\varphi}, \bar{\varphi})$ – энергия среднего состояния.
 3. $E = (\overline{\varphi}, \overline{\varphi})$ – средняя энергия.
 4. $E - \bar{E} = \overline{(\varphi - \bar{\varphi}, \varphi - \bar{\varphi})}$ – энергия отклонений от среднего.
 5. $D(E) = \overline{[(\varphi, \varphi) - (\bar{\varphi}, \bar{\varphi})]^2}$ – дисперсия энергии.
- Пусть $\varphi' = \varphi - \bar{\varphi}$. Тогда

$$\frac{\|\varphi'\|}{\|\bar{\varphi}\|} = \frac{(E - \bar{E})^{1/2}}{\bar{E}^{1/2}}.$$

Введем два параметра:

$$\varepsilon_1 = \frac{D(E)}{E^2}, \quad \varepsilon_2 = \frac{\|\varphi'\|}{\|\bar{\varphi}\|}.$$

Условие $\varepsilon_1 \ll 1$ означает, что обратная величина $1/\varepsilon_1$ велика. Хорошо известно, что $1/\varepsilon_1$ есть число эффективных независимых степеней свободы [6], которое в случае нормального распределения случайной величины φ можно представить в виде

$$N^* = \frac{1}{\varepsilon_1} = \frac{(\sum \lambda_i)^2}{\sum \lambda_i^2},$$

где λ_i – собственные числа ковариационной матрицы $C(0)$. Ясно, что справедливы неравенства: $1 \leq N^* \leq N$. Таким образом, утверждение, что в системе существует большое число эффективных независимых степеней свободы (т.е. существует большое число естественных ортогональных функций с примерно равной энергией) эквивалентно утверждению, что энергия системы на аттракторе почти постоянна. Далее, при большом числе эффективных независимых степеней свободы стационарное распределение ρ должно быть близко к нормальному (следуя центральной предельной теореме), а это означает, что в предположении выполнения на аттракторе уравнения Лиувилля для функции распределения мы имеем "почти несжимаемость" фазового потока. Другими словами, условие $\varepsilon_1 \ll 1$ есть условие применимости формулы (13) для определения линейного оператора отклика системы (1) (более точно, ее конечномерной аппроксимации) на малые возмущения правой части.

Существует, однако, другое представление динамики на аттракторе климатической системы, при котором формула (13) также справедлива.

Рассмотрим ситуацию, когда $\varepsilon_2 \ll 1$. В этом случае можно считать, что хаотическая динамика разыгрывается на аттракторе, погруженном в шар с радиусом ε_2 и центром в $\bar{\varphi}$. Разумно предположить, что стохастическая динамика на таком аттракторе может быть описана линейным уравнением [7]:

$$\frac{\partial \varphi'}{\partial t} + A_1 \varphi' = \eta', \quad (15)$$

где оператор A_1 есть оператор задачи (1), линеаризованный относительно $\bar{\varphi}$ с некоторой процедурой замыкания нелинейных членов.

Предположим, что случайная правая часть η' есть δ -коррелированный стационарный случайный процесс с ковариационной матрицей $F \equiv \langle \eta' \cdot \eta'^T \rangle$. В рамках таких предположений ковариационная матрица стационарного случайного процесса φ' : $C_0 \equiv \langle \varphi' \cdot \varphi'^T \rangle$ должна удовлетворять уравнению Ляпунова

$$A_1 C_0 + C_0 A_1^T = F$$

(то есть условию, что $\text{Re} \lambda(A_1) > 0$), а ковариационная матрица при сдвиге τ : $C(\tau) \equiv \langle \varphi'(t + \tau) \cdot \varphi'^T(t) \rangle$ есть

$$C(\tau) = e^{-A_1 \tau} C_0 \quad (\tau > 0).$$

Если в (15) внести не зависящее от времени внешнее возмущение δf , то установившийся отклик на него будет равен

$$\langle \delta \varphi' \rangle = A_1^{-1} \delta f,$$

и оператор A_1^{-1} , очевидно, может быть вычислен по формуле

$$A_1^{-1} = \int_0^{\infty} C(\tau) C_0^{-1} d\tau,$$

т.е. в рамках данного приближения мы также приходим к описанному выше диссипационно-флуктуационному соотношению.

Для гидродинамических проблем, например для уравнений, описывающих динамику двумерной баротропной атмосферы, описанные выше два режима можно получить в рамках простых линейных преобразований решения задачи.

Необходимым условием для существования первого режима является достаточно большая размерность аттрактора (очевидно, что размерность фазового пространства должна быть большой). Большое число эффективных степеней свободы есть следствие равномерного распределения "энергии" по естественным ортогональным векторам, которые для атмосферных задач характерны тем, что пространственный масштаб их уменьшается с ростом номера вектора (если векторы упорядочены по убыванию собственных чисел ковариационной матрицы). Таким образом, проблема заключается в выборе подходящего линейного оператора, который нужным образом перераспределяет "энергию" по естественным ортогональным векторам. Например, для уравнения баротропного вихря на сфере подходящим оператором является некоторая положительная степень оператора Лапласа. Отрицательная степень оператора Лапласа сводит данную задачу к случаю, когда возможно представление динамики на аттракторе линейным динамико-стохастическим уравнением.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение еще раз подчеркнем, что развитие идей и методов использования техники, связанной с построением функций Грина в задачах физики

атмосферы, неразрывно связано с именем Г.И.Марчука. В данной работе мы не упоминали работы, посвященные ассимиляции данных в задачах прогноза погоды, где техника сопряженных уравнений заняла ведущее место. Твердая вера Гурия Ивановича, которая не покидала его (и, наверное, не покинет) в течение всей его творческой жизни, в огромные возможности этого класса методов достойна восхищения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Дымников В.П., Филатов А.Н. Основы математической теории климата. –М.: ВИНТИ, 1994. –252 с.
2. Булеев Н.И., Марчук Г.И. О динамике крупномасштабных атмосферных процессов // Труды ИФА АН СССР. 1958. Т. 2. С. 66–104.
3. Марчук Г.И. Численное решение задач динамики атмосферы и океана. –Л.: Гидрометеиздат, 1974. –303 с.
4. Kraichnan R.H. Classical fluctuation-relaxation theorem // Phys. Rev. 1959. V. 109. P. 1407–1422.
5. Leith C.E. Climate response and fluctuation dissipation // J. Atmos. Sci. 1975. V. 32, № 1. P. 2022–2026.
6. Тер-Мкртчян М.Г. К определению числа независимых станций, "эквивалентных" данной системе коррелированных станций // Метеорология и гидрология. 1969. № 2. С. 24–36.
7. Дымников В.П. О предсказуемости климатических изменений // Изв. РАН. ФАиО. 1998. Т. 34, № 6. С. 741–751.

Численный анализ морской динамики ¹

В. Б. ЗАЛЕСНЫЙ, Р. Э. ТАМСАЛУ*

Институт вычислительной математики РАН

*Эстонский морской институт

E-mail: zalesny@inm.ras.ru

Рассматриваются вопросы численного моделирования морской динамики и анализа чувствительности полученного решения. Цель – разработка модели морской циркуляции, воспроизводящей крупномасштабную структуру полей, их пространственно–временную изменчивость и локальные особенности; построение экономичных гибких вычислительных алгоритмов для модельного и ретроспективного анализа расчетных данных, а также разработка методов оценки решения на основе техники сопряженных уравнений.

Модель основана на системе исходных уравнений общей термохалинной морской циркуляции. Уравнения формулируются в σ -системе координат. Используется специальная симметризованная форма дифференциальных уравнений. Оператор задачи представляется в виде суммы операторов более простой структуры. Численный алгоритм основан на неявных схемах расщепления и сеточных аппроксимациях расщепленных задач, каждая из которых удовлетворяет закону сохранения полной энергии, справедливому для исходной задачи. Аппроксимация уравнений по пространственным переменным осуществляется на сдвинутых комбинированных сетках: могут использоваться комбинации сеток A , B , и C . Модель ориентирована на персональные компьютеры и имеет эффективную программную реализацию. Рассматривается вопрос об оценке чувствительности решения. Для этого используется метод сопряженных уравнений. Для характеристики состояния системы вводится специальный функционал, зависящий от решения сопряженной задачи.

*The work deals with the numerical modelling of the marine dynamics and an analysis of the sensitivity of the obtained solutions.
Our goal is threefold:*

¹Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект №00-05-64051

– to develop numerical model of the marine general circulation that simulates the large-scale structure of the hydrological fields, its time-space variability and local peculiarities

– to construct a cost-effective flexible computational algorithms for the model and retrospective data analysis of the solution

– to develop methods for assessment of the solution on the base of adjoint equation technique.

The model is based on the primitive equation system of thermohaline sea dynamics. The governing equations are written in the bottom following system of coordinates (σ -system).

The special symmetrized form of notation of the differential equations is used in the model. The operator of the problem prior to its space approximation is represented as the sum of suboperators of a simpler structure. The numerical algorithm of the model is based on implicit splitting schemes and the grid approximations of the split problems with respect to space variables, which obey the main conservation law that holds for the original system.

The space approximation of the model equations is realized on staggered combined grids: the combinations of grids A, B, and C can be used. The model is implemented on a personal computer with rather cost-effective code.

The sensitivity of the solution is considered. Adjoint method is used for this purpose. In order to characterize state of the system a special functional depending on the solution of the adjoint problem is introduced.

ВВЕДЕНИЕ

С точки зрения численного анализа модели морской гидродинамики представляют собой весьма сложные развивающиеся системы. Их основой являются нелинейные дифференциальные уравнения, описывающие гидродинамику вращающейся жидкости – эволюцию трехмерных полей течений, температуры и солёности, а также давления и плотности. Вместе с классической основой они включают различного рода физические параметризации, изменяющиеся по мере улучшения понимания природных явлений.

В современные модели общей циркуляции наряду с гидродинамическими включаются характеристики морской экосистемы. Уравнения экосистемы – трехмерные, они имеют вид уравнений переноса-диффузии, включающих матрицу взаимодействий с сильной нелинейностью [19], [20]. Общее число переменных, описывающих совместную динамику гидроэкосистемы, сильно возрастает, анализ процессов усложняется и требует новых подходов и методов.

За последние 30 лет теория и практика моделирования морской динамики обогатилась несколькими новыми подходами и алгоритмами. Среди них прежде всего следует отметить следующие

- **метод расщепления** (см. [1], [5], [6], [7], [13], [17]): с одной стороны, как эффективный алгоритм решения сложных задач, обладающий высокой устойчивостью; с другой – как методологическую основу построения развивающейся модельной системы;
- **вариационные методы** ретроспективного анализа, управления данными и мониторинга окружающей среды.

Основная заслуга теоретического развития и обоснования этих методов и их приложения к задачам динамики морских и атмосферных процессов принадлежит Г.И.Марчуку, его ученикам и последователям [3]–[12]. В данной работе излагаются некоторые вопросы, связанные с применением указанных методов к решению задач морской динамики.

1. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ МОРСКОЙ ДИНАМИКИ

Сформулируем математическую постановку задачи морской динамики. В сферических координатах λ, θ, z ([18]) имеем

$$\frac{du}{dt} - (l - m \cos \theta) v = -\frac{m}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial \lambda} + \frac{\partial}{\partial z} \nu_u \frac{\partial u}{\partial z} + F^u, \quad (1)$$

$$\frac{dv}{dt} + (l - m \cos \theta) u = -\frac{n}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial \theta} + \frac{\partial}{\partial z} \nu_v \frac{\partial v}{\partial z} + F^v, \quad (2)$$

$$\frac{\partial p}{\partial z} = g \rho, \quad (3)$$

$$m \left[\frac{\partial u}{\partial \lambda} + n \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{v}{m} \right) \right] + \frac{\partial w}{\partial z} = 0, \quad (4)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\partial}{\partial z} \nu_T \frac{\partial T}{\partial z} + F^T, \quad (5)$$

$$\frac{dS}{dt} = \frac{\partial}{\partial z} \nu_S \frac{\partial S}{\partial z} + F^S, \quad (6)$$

$$\rho = f(T, S), \quad \text{в } D(\lambda, \theta, z) \quad (7)$$

где

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} &= \frac{\partial}{\partial t} + m u \frac{\partial}{\partial \lambda} + n v \frac{\partial}{\partial \theta} + w \frac{\partial}{\partial z}, \\ F^* &= m^2 \frac{\partial}{\partial \lambda} \mu_* \frac{\partial *}{\partial \lambda} + m n \frac{\partial}{\partial \theta} \mu_* \frac{n}{m} \frac{\partial *}{\partial \theta}. \end{aligned} \quad (8)$$

Система уравнений (1) - (7) рассматривается на интервале по времени $(0, t]$ в трехмерной области D . Область D ограничена границей ∂D , состоящей из невозмущенной поверхности моря $z = 0$, боковой (береговой) поверхности Σ и рельефа

дна $H(\lambda, \theta)$. К системе уравнений присоединяются соответствующие граничные условия

при $z = 0$:

$$\nu_u \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{\tau_\lambda}{\rho_0}, \quad \nu_v \frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{\tau_\theta}{\rho_0}, \quad w = 0, \quad (9)$$

$$\nu_T \frac{\partial T}{\partial z} = D_T(T - T_s) + Q_T, \quad \nu_S \frac{\partial S}{\partial z} = D_S(S - S_s) + Q_S, \quad (10)$$

для $z = H(\lambda, \theta)$:

$$w = m \frac{\partial H}{\partial \lambda} u + n \frac{\partial H}{\partial \theta} v, \quad (\mathbf{D}u, \mathbf{n}_H) = 0, \quad (\mathbf{D}v, \mathbf{n}_H) = 0, \quad (11)$$

$$(\mathbf{D}T, \mathbf{n}_H) = 0, \quad (\mathbf{D}S, \mathbf{n}_H) = 0 \quad (12)$$

на боковой поверхности Σ

$$(\mathbf{u}, \mathbf{n}_\Sigma) = 0, \quad (\nabla u, \mathbf{n}_\Sigma) = 0, \quad (\nabla v, \mathbf{n}_\Sigma) = 0, \quad (13)$$

$$(\nabla T, \mathbf{n}_\Sigma) = 0, \quad (\nabla S, \mathbf{n}_\Sigma) = 0, \quad (14)$$

а также начальные условия при $t = 0$

$$u = u_0, \quad v = v_0, \quad T = T_0, \quad S = S_0. \quad (15)$$

Здесь: λ – долгота, $\theta = 90^\circ + \psi$, ψ – широта, z – направленная вниз вертикаль, u, v, w – компоненты вектора скорости, T – температура, S – соленость, p – давление, ρ – плотность; $\nu_u, \nu_v, \nu_T, \nu_S$ – коэффициенты вертикальной турбулентной вязкости и диффузии; $\mu_u, \mu_v, \mu_T, \mu_S$ – коэффициенты горизонтальной турбулентной вязкости и диффузии; l – параметр Кориолиса: $l = -2\Omega \cos\theta$; $m = \frac{1}{R \sin\theta}$, $n = \frac{1}{R}$, R – радиус Земли, Ω – угловая скорость вращения Земли ;

$$\mathbf{n}_H = -m \frac{\partial H}{\partial \lambda} \mathbf{i}_\lambda - n \frac{\partial H}{\partial \theta} \mathbf{i}_\theta + \mathbf{i}_z \quad \mathbf{n}_\Sigma = \mathbf{i}_\lambda \cos(\mathbf{n}_\Sigma, \mathbf{i}_\lambda) + \mathbf{i}_\theta \cos(\mathbf{n}_\Sigma, \mathbf{i}_\theta) \quad (16)$$

$$\mathbf{D}\phi = \mu_\phi \left(m \frac{\partial \phi}{\partial \lambda} \mathbf{i}_\lambda + n \frac{\partial \phi}{\partial \theta} \mathbf{i}_\theta \right) + \nu_\phi \frac{\partial \phi}{\partial z} \mathbf{i}_z \quad \nabla \phi = \mu_\phi \left(m \frac{\partial \phi}{\partial \lambda} \mathbf{i}_\lambda + n \frac{\partial \phi}{\partial \theta} \mathbf{i}_\theta \right). \quad (17)$$

Для параметризации процесса глубокой конвекции коэффициенты ν_T, ν_S можно выбрать в виде нелинейных функций, зависящих от градиента плотности. Например, следуя [18], можно положить:

$$\nu_T = \nu_S \equiv \nu_0 + \nu_{min} \exp \left\{ a \left[1 - th \left(\gamma \frac{\partial \rho}{\partial z} \right) \right] \right\}, \quad (18)$$

где ν_0, ν_{min}, γ – положительные постоянные и $a = \frac{1}{2} \ln \left\{ \frac{\nu_{max}}{\nu_{min}} \right\}$.

Замечание. Для случая линейной зависимости плотности ρ от температуры и солёности **К.Казанцева доказала теорему о единственности сильного решения и существовании слабого решения для системы уравнений (1) – (15)** (см. [17]). Доказательство развивает результаты, ранее полученные А.А.Кордзадзе [3] и В.И.Сухоносковым [14].

2. УРАВНЕНИЯ МОРСКОЙ ДИНАМИКИ В σ -СИСТЕМЕ КООРДИНАТ И СИММЕТРИЗАЦИЯ УРАВНЕНИЙ

Выбор аппроксимации и метода решения (1) – (15) осуществляется после некоторых преобразований исходной задачи. Процедура построения вычислительного алгоритма включает несколько последовательных шагов [18]. Опишем ее кратко.

1. Первый шаг преобразований состоит **во введении σ -системы координат**. Исходные уравнения (1) – (7) переписываются в новой системе $(\lambda_1, \theta_1, z_1)$: $\lambda_1 = \lambda$, $\theta_1 = \theta$, $z_1 \equiv \sigma = z/H(\lambda, \theta)$. При этом имеем:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \lambda} &= \frac{\partial}{\partial \lambda_1} - \frac{1}{H} \frac{\partial H}{\partial \lambda_1} z_1 \frac{\partial}{\partial z_1}, \\ \frac{\partial}{\partial \theta} &= \frac{\partial}{\partial \theta_1} - \frac{1}{H} \frac{\partial H}{\partial \theta_1} z_1 \frac{\partial}{\partial z_1}, \\ \frac{\partial}{\partial z} &= \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial z_1}. \end{aligned} \quad (19)$$

Слагаемые, описывающие горизонтальный турбулентный обмен теплом и солью, F^T, F^S в новой системе координат принимают вид:

$$\begin{aligned} F_1^T &= \frac{m^2}{H} \left[\frac{\partial}{\partial \lambda_1} \mu H \frac{\partial T}{\partial \lambda_1} - \frac{\partial}{\partial \lambda_1} (\mu z_1 \frac{\partial H}{\partial \lambda_1} \frac{\partial T}{\partial z_1}) - \frac{\partial}{\partial z_1} (\mu z_1 \frac{\partial H}{\partial \lambda_1} \frac{\partial T}{\partial \lambda_1}) + \right. \\ &\frac{\partial}{\partial z_1} \left(\frac{\mu}{H} z_1^2 \left(\frac{\partial H}{\partial \lambda_1} \right)^2 \frac{\partial T}{\partial z_1} \right) \left. + \frac{mn}{H} \left[\frac{\partial}{\partial \theta_1} \mu H q \frac{\partial T}{\partial \theta_1} - \frac{\partial}{\partial \theta_1} (\mu z_1 q \frac{\partial H}{\partial \theta_1} \frac{\partial T}{\partial z_1}) - \right. \right. \\ &\left. \left. \frac{\partial}{\partial z_1} (\mu z_1 q \frac{\partial H}{\partial \theta_1} \frac{\partial T}{\partial \theta_1}) + \frac{\partial}{\partial z_1} \left(\frac{\mu}{H} z_1^2 q \left(\frac{\partial H}{\partial \theta_1} \right)^2 \frac{\partial T}{\partial z_1} \right) \right] \right], \end{aligned}$$

где $q = \frac{n}{m}$.

Граничные условия переписываются следующим образом. На твердых участках границы, параллельных оси θ_1 :

$$\mu \left[H \frac{\partial T}{\partial \lambda_1} - \frac{\partial H}{\partial \lambda_1} z_1 \frac{\partial T}{\partial z_1} \right] = 0.$$

На участках границы, параллельных оси λ :

$$\mu q \left[H \frac{\partial T}{\partial \theta_1} - \frac{\partial H}{\partial \theta_1} z_1 \frac{\partial T}{\partial z_1} \right] = 0.$$

Для $z_1 = 1$:

$$-\frac{m^2}{H}\mu[z_1\frac{\partial H}{\partial\lambda_1}\frac{\partial T}{\partial\lambda_1} - \frac{z_1^2}{H}(\frac{\partial H}{\partial\lambda_1})^2\frac{\partial T}{\partial z_1}] - \frac{mn}{H}\mu[z_1q\frac{\partial H}{\partial\theta_1}\frac{\partial T}{\partial\theta_1} - \frac{z_1^2q}{H}(\frac{\partial H}{\partial\theta_1})^2\frac{\partial T}{\partial z_1}] + \frac{1}{H^2}\nu\frac{\partial T}{\partial z_1} = 0$$

Отметим, что в σ -системе уравнение неразрывности принимает вид:

$$m[\frac{\partial Hu}{\partial\lambda_1} + n\frac{\partial}{\partial\theta_1}(\frac{Hv}{m})] + \frac{\partial w_1}{\partial z_1} = 0, \quad (20)$$

если ввести новую вертикальную скорость w_1 согласно

$$w_1 = w - mz_1\left(\frac{\partial H}{\partial\lambda_1}u + n\frac{\partial H}{\partial\theta_1}\frac{v}{m}\right). \quad (21)$$

При этом кинематическое граничное условие на дне, при $z_1 = 1$, будет таким же, как на поверхности:

$$w_1 = 0. \quad (22)$$

Замечание. Предположим, что все коэффициенты диффузии $\nu_u, \nu_v, \dots, \nu_S$ равны нулю и функция $f(T, S)$ в уравнении состояния (7) имеет ограниченные производные по T и S . В этом случае вместо двух уравнений для температуры и солёности можно ввести одно уравнение для плотности или любой функции от плотности $G(\rho)$, имеющей ограниченные производные по ρ . При этом **выполняется закон сохранения полной энергии:**

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_D [H\rho_0\frac{u^2 + v^2}{2} + \bar{z}gH^2(\sqrt{|\rho|})^2] dD = 0 \quad (23)$$

(здесь использована правая система координат, в которой $\bar{z} = -z_1$).

2. Второй шаг преобразований состоит в **симметризации** дифференциальной системы уравнений. Симметризуем уравнения морской термогидродинамики, записанные в σ -системе следующим образом. Выберем полудивергентную форму записи уравнений переноса-диффузии температуры и солёности и преобразуем уравнения движения и статики в соответствии с этим выбором. В результате эквивалентных преобразований получим:

$$H\frac{du}{dt} - H(l - m\cos\theta_1 u)v = -\frac{Hm}{\rho_0}\left[\frac{\partial}{\partial\lambda_1}(p - \frac{1}{2}gHz_1\rho)\right] - \frac{Hmg}{2\rho_0}\left[(Hz_1)\frac{\partial\rho}{\partial\lambda_1} - \frac{\partial(Hz_1)}{\partial\lambda_1}\rho\right] + \frac{\partial}{\partial z_1}\frac{\nu_u}{H}\frac{\partial u}{\partial z_1} + F_1^u, \quad (24)$$

$$H \frac{dv}{dt} + H(l - m \cos \theta_1 u) u = -\frac{Hn}{\rho_0} \left[\frac{\partial}{\partial \theta_1} \left(p - \frac{1}{2} g H z_1 \rho \right) \right] - \frac{Hng}{2\rho_0} \left[(H z_1) \frac{\partial \rho}{\partial \theta_1} - \frac{\partial (H z_1)}{\partial \theta_1} \rho \right] + \frac{\partial}{\partial z_1} \frac{\nu_v}{H} \frac{\partial v}{\partial z_1} + F_1^v, \quad (25)$$

$$\frac{\partial}{\partial z_1} \left(p - \frac{1}{2} g H z_1 \rho \right) = -\frac{g}{2} \left[(H z_1) \frac{\partial \rho}{\partial z_1} - \frac{\partial (H z_1)}{\partial z_1} \rho \right], \quad (26)$$

$$m \left[\frac{\partial H u}{\partial \lambda_1} + n \frac{\partial}{\partial \theta_1} \left(\frac{H v}{m} \right) \right] + \frac{\partial w_1}{\partial z_1} = 0, \quad (27)$$

$$H \frac{dT}{dt} = \frac{\partial}{\partial z_1} \frac{\nu_T}{H} \frac{\partial T}{\partial z_1} + F_1^T, \quad (28)$$

$$H \frac{dS}{dt} = \frac{\partial}{\partial z_1} \frac{\nu_S}{H} \frac{\partial S}{\partial z_1} + F_1^S, \quad (29)$$

$$\rho = f(T, S), \quad \text{в } D_1(\lambda_1, \theta_1, z_1) \quad (30)$$

где

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + m u \frac{\partial}{\partial \lambda_1} + n v \frac{\partial}{\partial \theta_1} + w_1 \frac{\partial}{\partial z_1}, \quad (31)$$

$$F_1^T = m^2 \left\{ \frac{\partial}{\partial \lambda_1} \mu \left(\frac{\partial H z_1}{\partial z_1} \frac{\partial T}{\partial \lambda_1} - \frac{\partial H z_1}{\partial \lambda_1} \frac{\partial T}{\partial z_1} \right) - \frac{\partial}{\partial z_1} \left[\mu \frac{z_1}{H} \frac{\partial H}{\partial \lambda_1} \left(\frac{\partial H z_1}{\partial z_1} \frac{\partial T}{\partial \lambda_1} - \frac{\partial H z_1}{\partial \lambda_1} \frac{\partial T}{\partial z_1} \right) \right] \right\} + m n \left\{ \frac{\partial}{\partial \theta_1} \mu q \left(\frac{\partial H z_1}{\partial z_1} \frac{\partial T}{\partial \theta_1} - \frac{\partial H z_1}{\partial \theta_1} \frac{\partial T}{\partial z_1} \right) - \frac{\partial}{\partial z_1} \left[\mu q \frac{z_1}{H} \frac{\partial H}{\partial \theta_1} \left(\frac{\partial H z_1}{\partial z_1} \frac{\partial T}{\partial \theta_1} - \frac{\partial H z_1}{\partial \theta_1} \frac{\partial T}{\partial z_1} \right) \right] \right\} \quad (32)$$

3. МЕТОД РАСЩЕПЛЕНИЯ ПО ФИЗИЧЕСКИМ ПРОЦЕССАМ – ВЫДЕЛЕНИЕ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ПОДСИСТЕМ

Одним из эффективных методов решения сложных систем уравнений является метод расщепления по физическим процессам [6], [7]. Его использование

состоит в сведении решения сложной исходной задачи к решению ряда элементарных подсистем, каждая из которых описывает некоторый простой физический процесс. Применяя метод к решению уравнений (24) – (30), можно выделить несколько элементарных подсистем, энергетически согласованных с точки зрения закона сохранения (23).

3.1. ПЕРЕНОС–ДИФФУЗИЯ КОЛИЧЕСТВА ДВИЖЕНИЯ

В качестве первой подсистемы выделяются уравнения переноса–диффузии количества движения с учетом слагаемых, описывающих эффект ”сферического вращения”. Имеем, опуская здесь и далее подстрочные индексы у переменных λ, θ :

$$\frac{H}{m} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2} \left[Hu \frac{\partial u}{\partial \lambda} + \frac{\partial}{\partial \lambda} (Huu) + \frac{n}{m} H v \frac{\partial u}{\partial \theta} + \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{n}{m} H v u \right) + w_1 \frac{\partial u}{\partial z_1} + \frac{\partial}{\partial z_1} (w_1 u) \right] \quad (33)$$

$$+ H \cos \theta uv = F_1^u,$$

$$\frac{H}{m} \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{1}{2} \left[Hv \frac{\partial v}{\partial \lambda} + \frac{\partial}{\partial \lambda} (Huv) + \frac{n}{m} H v \frac{\partial v}{\partial \theta} + \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{n}{m} H v v \right) + w_1 \frac{\partial v}{\partial z_1} + \frac{\partial}{\partial z_1} (w_1 v) \right] \quad (34)$$

$$- H \cos \theta uv = F_1^v,$$

Легко видеть, что оператор переноса количества движения – кососимметрический. Полудивергентная форма записи слагаемых переноса в (33)–(34) удобна, так как позволяет провести дальнейшее расщепление. Оператор 3-мерной задачи может быть представлен в виде суммы 4-х операторов: переноса–диффузии по каждой координате λ, θ, z_1 и ”сферического вращения” с сохранением свойства кососимметричности слагаемых, описывающих перенос количества движения.

3.2. БАРОТРОПНАЯ ЦИРКУЛЯЦИЯ

В качестве второй подсистемы выделяются уравнения, описывающие процесс баротропной циркуляции или адаптации полей течений и давления с учетом экмановского ветрового воздействия. Имеем:

$$H \frac{\partial u}{\partial t} - Hlv = - \frac{Hm}{\rho_0} \frac{\partial p_0}{\partial \lambda} + \frac{\partial}{\partial z_1} \frac{\nu_u}{H} \frac{\partial u}{\partial z_1}, \quad (35)$$

$$H \frac{\partial v}{\partial t} + Hlu = - \frac{Hn}{\rho_0} \frac{\partial p_0}{\partial \theta} + \frac{\partial}{\partial z_1} \frac{\nu_v}{H} \frac{\partial v}{\partial z_1}, \quad (36)$$

$$\frac{\partial(Hu)}{\partial \lambda} + n \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{Hv}{m} \right) = 0. \quad (37)$$

Здесь p_0 – функция давления на уровне $z_1 = 0$, не зависящая от вертикальной координаты.

3.3. БАРОКЛИННАЯ АДАПТАЦИЯ ПОЛЕЙ МАСС И ТЕЧЕНИЙ

Третья подсистема описывает бароклинную адаптацию гидрологических полей:

$$H \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{Hm}{\rho_0} \frac{\partial \bar{p}}{\partial \lambda}, \quad (38)$$

$$H \frac{\partial v}{\partial t} = -\frac{Hn}{\rho_0} \frac{\partial \bar{p}}{\partial \theta}, \quad (39)$$

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial z_1} = -\frac{g}{2} [(Hz_1) \frac{\partial \rho}{\partial z_1} - \frac{\partial(Hz_1)}{\partial z_1} \rho], \quad (40)$$

$$m \left[\frac{\partial Hu}{\partial \lambda} + n \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{Hv}{m} \right) \right] + \frac{\partial w_1}{\partial z_1} = 0, \quad (41)$$

$$H \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{2} \left[w_1 \frac{\partial T}{\partial z_1} + \frac{\partial w_1 T}{\partial z_1} \right] = 0, \quad (42)$$

$$H \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2} \left[w_1 \frac{\partial S}{\partial z_1} + \frac{\partial w_1 S}{\partial z_1} \right] = 0, \quad (43)$$

$$\rho = f(T, S), \quad \text{в } D_1(\lambda, \theta, z_1), \quad (44)$$

где $\bar{p} = p - \frac{1}{2}gHz_1\rho$.

3.4. НЕЛИНЕЙНЫЙ ПЕРЕНОС ВДОЛЬ ОСЕЙ λ, θ

Четвертая подсистема описывает нелинейный перенос момента, температуры и солености вдоль осей λ, θ . Вдоль оси λ имеем:

$$H \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{Hmg}{2\rho_0} [(Hz_1) \frac{\partial \rho}{\partial \lambda} - \frac{\partial(Hz_1)}{\partial \lambda} \rho], \quad (45)$$

$$H \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{m}{2} \left[Hu \frac{\partial T}{\partial \lambda} + \frac{\partial HuT}{\partial \lambda} \right] = 0, \quad (46)$$

$$H \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{m}{2} \left[H u \frac{\partial S}{\partial \lambda} + \frac{\partial H u S}{\partial \lambda} \right] = 0. \quad (47)$$

Вдоль оси θ :

$$H \frac{\partial v}{\partial t} = -\frac{H n g}{2 \rho_0} \left[(H z_1) \frac{\partial \rho}{\partial \theta} - \frac{\partial (H z_1)}{\partial \theta} \rho \right], \quad (48)$$

$$H \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{n}{2} \left[H v \frac{\partial T}{\partial \theta} + \frac{\partial H v T}{\partial \theta} \right] = 0, \quad (49)$$

$$H \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{n}{2} \left[H v \frac{\partial S}{\partial \theta} + \frac{\partial H v S}{\partial \theta} \right] = 0. \quad (50)$$

3.5. ДИФФУЗИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ И СОЛЕННОСТИ В ПЛОСКОСТИ (λ, z_1)

Пятая подсистема описывает плоскую диффузию температуры и солёности в σ -системе координат. В плоскости (λ, z_1) имеем:

$$\begin{aligned} \frac{H}{m^2} \frac{\partial T}{\partial t} &= \left\{ \frac{\partial}{\partial \lambda} \mu \left(\frac{\partial H z_1}{\partial z_1} \frac{\partial T}{\partial \lambda} - \frac{\partial H z_1}{\partial \lambda} \frac{\partial T}{\partial z_1} \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{\partial}{\partial z_1} \left[\mu \frac{z_1}{H} \frac{\partial H}{\partial \lambda} \left(\frac{\partial H z_1}{\partial z_1} \frac{\partial T}{\partial \lambda} - \frac{\partial H z_1}{\partial \lambda} \frac{\partial T}{\partial z_1} \right) \right] \right\}, \\ \frac{H}{m^2} \frac{\partial S}{\partial t} &= \left\{ \frac{\partial}{\partial \lambda} \mu \left(\frac{\partial H z_1}{\partial z_1} \frac{\partial S}{\partial \lambda} - \frac{\partial H z_1}{\partial \lambda} \frac{\partial S}{\partial z_1} \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{\partial}{\partial z_1} \left[\mu \frac{z_1}{H} \frac{\partial H}{\partial \lambda} \left(\frac{\partial H z_1}{\partial z_1} \frac{\partial S}{\partial \lambda} - \frac{\partial H z_1}{\partial \lambda} \frac{\partial S}{\partial z_1} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (51)$$

3.6. ДИФФУЗИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ И СОЛЕННОСТИ В ПЛОСКОСТИ (θ, z_1)

В плоскости (θ, z_1) имеем:

$$\begin{aligned} \frac{H}{m n} \frac{\partial T}{\partial t} &= \left\{ \frac{\partial}{\partial \theta} \mu q \left(\frac{\partial H z_1}{\partial z_1} \frac{\partial T}{\partial \theta} - \frac{\partial H z_1}{\partial \theta} \frac{\partial T}{\partial z_1} \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{\partial}{\partial z_1} \left[\mu q \frac{z_1}{H} \frac{\partial H}{\partial \theta} \left(\frac{\partial H z_1}{\partial z_1} \frac{\partial T}{\partial \theta} - \frac{\partial H z_1}{\partial \theta} \frac{\partial T}{\partial z_1} \right) \right] \right\}, \\ \frac{H}{m n} \frac{\partial S}{\partial t} &= \left\{ \frac{\partial}{\partial \theta} \mu q \left(\frac{\partial H z_1}{\partial z_1} \frac{\partial S}{\partial \theta} - \frac{\partial H z_1}{\partial \theta} \frac{\partial S}{\partial z_1} \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{\partial}{\partial z_1} \left[\mu q \frac{z_1}{H} \frac{\partial H}{\partial \theta} \left(\frac{\partial H z_1}{\partial z_1} \frac{\partial S}{\partial \theta} - \frac{\partial H z_1}{\partial \theta} \frac{\partial S}{\partial z_1} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (52)$$

3.7. ВЕРТИКАЛЬНАЯ ДИФФУЗИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ И СОЛЕННОСТИ

Седьмая подсистема описывает вертикальную диффузию температуры и солености с фоновым коэффициентом ν_0 :

$$H \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z_1} \frac{\nu_0}{H} \frac{\partial T}{\partial z_1}, \quad (53)$$

$$H \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z_1} \frac{\nu_0}{H} \frac{\partial S}{\partial z_1}. \quad (54)$$

3.8. КОНВЕКТИВНОЕ ПЕРЕМЕШИВАНИЕ

Восьмая подсистема описывает процесс вертикальной конвекции при гидростатической неустойчивости по плотности. Этот процесс параметризуется с помощью нелинейной зависимости коэффициента вертикального перемешивания от градиента плотности вида (18). Имеем на данном этапе:

$$H \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z_1} \frac{\nu_T - \nu_0}{H} \frac{\partial T}{\partial z_1}, \quad (55)$$

$$H \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z_1} \frac{\nu_S - \nu_0}{H} \frac{\partial S}{\partial z_1}. \quad (56)$$

3.9. РЕАЛИЗАЦИЯ ЧИСЛЕННОГО АЛГОРИТМА

Процедура численного решения задачи основана на комбинации методов расщепления по физическим процессам и отдельным координатам. В модели могут использоваться сдвинутые сетки различной пространственной структуры [16]: В, С, и комбинированная сетка А–С [1]. Представим один из возможных вариантов численной реализации модели морской циркуляции.

- **1. Перенос–диффузия количества движения**
 - 1.1. Решение локально-одномерных уравнений переноса–диффузии по каждой координате λ, θ, z_1 . Используется неявная схема расщепления и конечно-разностная аппроксимация по пространству. Аппроксимация производится на сетках А, В, С.
 - 1.2. Решение уравнений, описывающих ”сферическое вращение”
- **2. Адаптация полей течений, температуры и солености**

- 2.1. Решение локально–одномерных уравнений переноса–диффузии температуры и солёности по каждой координате λ, θ, z_1 . Используется неявная схема расщепления и конечно-разностная аппроксимация по пространству. Аппроксимация производится на сетках В, С.
- 2.2. Вычисление плотности по уравнению состояния.
- 2.3. Вычисление горизонтальных бароклинных составляющих скорости u, v . Используется неявная аппроксимация кориолисовых слагаемых, аппроксимация по пространству – конечно-разностная. Аппроксимация производится на сетках А, С. При аппроксимации на сетке С применяется процедура диагонализации кориолисовых слагаемых [1].
- 2.4. Расчет баротропной циркуляции. Задача сводится к решению уравнения для функции тока (в случае односвязной акватории) или уровневой поверхности. Используется неявная схема, конечно-разностная или конечно-элементная аппроксимация по пространству, итерационный метод последовательной блочной релаксации. Аппроксимация производится на сетке С.

4. АНАЛИЗ РЕШЕНИЯ НА ОСНОВЕ МЕТОДА СОПРЯЖЕННЫХ УРАВНЕНИЙ

Помимо решения задачи моделирования гидрологических полей рассматривается задача оценки загрязнения некоторой подобласти моря или океана пассивной примесью. Применяя метод сопряженных уравнений [8], эта задача может быть сведена к вычислению функции чувствительности для трехмерного уравнения переноса–диффузии пассивной примеси. Предположим, что задача расчета трехмерного поля морских течений решена. Предположим также, что пассивный загрязнитель, источник которого находится на поверхности морского бассейна, распространяется в вычисленном бездивергентном поле течений. В этом случае процесс загрязнения морского бассейна D может быть описан уравнением переноса – диффузии для пассивной примеси φ :

$$\left\{ \begin{array}{l} H \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{1}{2} \left[H m u \frac{\partial \varphi}{\partial \lambda} + \frac{\partial}{\partial \lambda} (H m u \varphi) + H n v \frac{\partial \varphi}{\partial \theta} + \frac{\partial}{\partial \theta} (H n v \varphi) \right. \\ \left. + w_1 \frac{\partial \varphi}{\partial z_1} + \frac{\partial}{\partial z_1} (w_1 \varphi) \right] = F_1^\varphi \\ \frac{v}{H} \frac{\partial \varphi}{\partial z_1} = Q \quad \text{при} \quad z_1 = 0, \\ \frac{\partial \varphi}{\partial n_1} = 0 \quad \text{при} \quad z_1 = 1, \\ \frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0 \quad \text{на} \quad \Sigma, \\ \varphi = \varphi^0 \quad \text{при} \quad t = 0, \end{array} \right. \quad (57)$$

где n_1 и n – векторы конормали и нормали соответственно.

Пусть требуется изучить чувствительность следующего функционала:

$$\mathbf{J} = \int_0^{\hat{t}} \int_{D_\eta} \varphi \cdot \eta \cdot dDdt, \quad (58)$$

где η – весовая функция, выделяющая пространственно–временную подобласть, в которой изучается изменение функционала \mathbf{J} . Оценку функционала \mathbf{J} удобно провести с помощью метода сопряженных уравнений [8]. В этом случае имеем:

$$\mathbf{J} = \int_0^{\hat{t}} \int_{D_0} \varphi^* \cdot Q \cdot dD_0dt + \int_{D_1} H \cdot \varphi^0 \cdot \varphi^{*0} \cdot dD, \quad (59)$$

где D_0 – проекция D_1 на поверхность $z_1 = 0$, а φ^* – решение соответствующей сопряженной задачи (с правой частью, равной η , и нулевыми граничными условиями):

$$\left\{ \begin{array}{l} -H \frac{\partial \varphi^*}{\partial t} - \frac{1}{2} \left[Hmu \frac{\partial \varphi^*}{\partial \lambda} + \frac{\partial}{\partial \lambda} (Hmu \varphi^*) + Hnv \frac{\partial \varphi^*}{\partial \theta} + \right. \\ \left. \frac{\partial}{\partial \theta} (Hnv \varphi^*) + w_1 \frac{\partial \varphi^*}{\partial z_1} + \frac{\partial}{\partial z_1} (w_1 \varphi^*) \right] = \eta \\ \frac{\nu}{H} \frac{\partial \varphi^*}{\partial z_1} = 0 \quad \text{при} \quad z_1 = 0, \quad z_1 = 1, \\ \frac{\partial \varphi^*}{\partial n} = 0 \quad \text{на} \quad \Sigma, \\ \varphi^* = 0 \quad \text{при} \quad t = \hat{t}. \end{array} \right. \quad (60)$$

Если предположить, что в начальный момент времени загрязнение отсутствует, т.е. $\varphi^0 = 0$, получим

$$\delta \mathbf{J} = \int_0^{\hat{t}} \int_{D_0} \varphi^* \cdot \delta Q \cdot dD_0dt. \quad (61)$$

Предполагая, что

$$Q = Q_0 \text{ при } t \in (0, t_1], \quad (62)$$

$$Q = 0 \text{ при } t \in (t_1, \hat{t}], \quad (63)$$

имеем

$$\delta \mathbf{J} = \int_{D_0} \delta Q_0 \left(\int_0^{t_1} \varphi^* dt \right) dD. \quad (64)$$

Используя (64), можно ввести **функцию чувствительности**

$$\Phi(\lambda, \theta, z_1) = \int_0^{t_1} \varphi^*(\lambda, \theta, z_1) dt, \quad (65)$$

которая характеризует вклад каждой точки в общее загрязнение рассматриваемой подобласти. При этом **функция чувствительности** зависит только от характеристик "охраняемой акватории" (функции η) и морской динамики и **не зависит от расположения источника загрязнения**.

Заметим, что Φ может рассматриваться в качестве меры различия между двумя разными полями течений, вычисленными при разных входных внешних и внутренних параметрах модели.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Делеклюз П., Залесный В.Б. *Вопросы численного моделирования экваториальной динамики* // Океанология, 1996, Т. 36, №1. С. 26–42.
- [2] Дьяконов Е.Г. *О построении разностных схем с расщепляющимся оператором для многомерных нестационарных задач* // УМН. 1962. Т. 17, №4.
- [3] Кордзадзе А.А. *Математические вопросы решения задач динамики океана*. – Новосибирск: ВЦ СО АН СССР. 1982. – 148 с.
- [4] Marchuk G.I. *Some application of the splitting-up methods to the solution of mathematical physics problems* // Applik. mat. 1968. V.13, №2.
- [5] Марчук Г.И. *О численном решении задачи Пуанкаре для океанских циркуляций* // ДАН СССР. 1969. Т.185, №5. 1041–1044.
- [6] Марчук Г.И. *Методы вычислительной математики*. – М.: Наука, 1980. – 536 с.
- [7] Марчук Г.И. *Методы расщепления*. – М.: Наука, 1988. – 264 с.
- [8] Марчук Г.И. *Сопряженные уравнения и анализ сложных систем*. – М.: Наука, 1992.
- [9] Марчук Г.И., Дымников В.П., Залесный В.Б., Лыков В.Н., Галин В.Я. *Математическое моделирование общей циркуляции атмосферы и океана*. – Л.: Гидрометеиздат, 1984. – 320 с.
- [10] Марчук Г.И., Дымников В.П., Залесный В.Б. *Математические модели геофизической гидродинамики и численные методы их реализации*. – Л.: Гидрометеиздат, 1987. – 296 с.

-
- [11] Marchuk G.I., Kuzin V.I. *On the combination of the finite element and splitting-up methods in the solution of the parabolic equations* // J. Comp. Phys. 1982. V.52, №2. P. 237–272.
- [12] Марчук Г.И., Саркисян А.С. *Математическое моделирование циркуляции океана*. –М.: Наука, 1988. –303 с.
- [13] Самарский А.А. *О сходимости метода дробных шагов для уравнений теплопроводности* // ЖВМ и МФ. 1962. Т. 2, №6. С. 1117–1121.
- [14] Сухонос В.И. *О корректности в целом краевых задач для моделей динамики атмосферы и океана* // ДАН СССР. 1983. №3. С. 556–560.
- [15] Яненко Н.Н. *Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики*. –Новосибирск: Наука, 1967. – 196 с.
- [16] Arakawa A., Lamb V.R. *Computational design of the basic dynamical processes of the UCLA general circulation model* // Methods Comput. Phys. 1977. V. 17. P. 173–265.
- [17] Kazantsev Ch., Moshonkin S.N., Zalesny V.B. *Mathematical modelling of the global ocean dynamics: solvability, numerical algorithm, calculations* // Proceedings of 4-th conf. "Variability and predictability of atmospheric and oceanic circulations. Moscow, Russia, 1998, 81–95.
- [18] Schmidt G.A., Mysak L.A. *The stability of a zonally averaged thermohaline circulation model* // Tellus. 1996. V. 48 A. P. 158–178.
- [19] Tamsalu R., Myrberg K. *Ecosystem modelling in the Gulf of Finland. I. General features and the hydrodynamic prognostic Model FINEST* // Estuar. Coast. Shelf Sci. 1995. V. 41. P. 249–273.
- [20] Tamsalu R., Ennet P., Kullas T. *An equatic ecosystem model for large water bodies* // Nordic Hydrobiological Conference 1996. V. 2. Proceedings of an International Symposium, Akureyri, Iceland, 13-15 August 1996. P. 506–515.
- [21] Zalesny V.B. *Numerical simulation and analysis of the sensitivity of large-scale ocean dynamics* // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. 1996. V. 11, №6. P. 421–443.

**Численные эксперименты
по модели динамики Черного моря,
учитывающей поглощение солнечной радиации**

А. А. Кордзадзе, Д. И. Деметрашвили

Институт геофизики АН Грузии

С помощью нестационарной бароклинной модели динамики моря, учитывающей поглощение солнечной радиации водой, воспроизводятся среднегодовой гидрологический режим Черного моря и его сезонные изменения. Оценивается роль радиации в формировании гидрофизического режима.

The mean annual hydrological regimen of the Black Sea and its seasonal changes are reproduced on the basis of nonstationary baroclinic sea dynamic model taking into account absorption of short-wave solar radiation by water. The contribution of radiation to the formation of hydrophysical regimen is estimated.

Корректное описание и изучение термического режима верхнего слоя Черного моря представляет значительный интерес, в первую очередь, из-за его активной роли во взаимодействии моря и атмосферы. Именно этот слой является связующим звеном между атмосферой и глубинными слоями Черного моря, и его состояние во многом определяет температурный режим нижних слоев атмосферы. Та часть солнечной радиации, которая проникает в водную толщу до определенной глубины в зависимости от оптических свойств морской среды (мутность воды, биомассы фито- и зоопланктона), поглощаясь и рассеиваясь водой, может играть определенную роль в формировании структуры температурного поля и внести значительный вклад в аккумуляцию дополнительных запасов тепла морем.

В настоящей статье предпринята попытка учесть в модели динамики моря [1–5] поглощение морской водой коротковолновой радиации и оценить вклад этого фактора в формирование гидрофизического режима.

В основе модели лежат следующие уравнения гидротермодинамики океана:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial u}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{u}u - \ell v + \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial P'}{\partial x} &= \nabla \mu \nabla u + \frac{\partial}{\partial z} \nu \frac{\partial u}{\partial z}, \\
\frac{\partial v}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{u}v + \ell u + \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial P'}{\partial y} &= \nabla \mu \nabla v + \frac{\partial}{\partial z} \nu \frac{\partial v}{\partial z}, \\
\frac{\partial P'}{\partial z} &= g\rho', \quad \operatorname{div} \vec{u} = 0, \\
\frac{\partial T'}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{u}T' + \gamma_T w &= \nabla \mu_T \nabla T' + \frac{\partial}{\partial z} \nu_T \frac{\partial T'}{\partial z} + \frac{\partial \nu_T \gamma_T}{\partial z} - \frac{1}{c\rho_0} \frac{\partial I}{\partial z} - \frac{\partial \bar{T}}{\partial t}, \\
\frac{\partial S'}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{u}S' + \gamma_S w &= \nabla \mu_S \nabla S' + \frac{\partial}{\partial z} \nu_S \frac{\partial S'}{\partial z} + \frac{\partial \nu_S \gamma_S}{\partial z} - \frac{\partial \bar{S}}{\partial t}, \\
\rho' &= \alpha_T T' + \alpha_S S', \quad \gamma_T = \frac{\partial \bar{T}}{\partial z}, \quad \gamma_S = \frac{\partial \bar{S}}{\partial z}, \\
\alpha_T &= -10^{-3} [0.0035 + 0.00938 \bar{T} + 0.0025 \bar{S}], \\
T &= \bar{T}(z, t) + T', \quad S = \bar{S}(z, t) + S', \quad \rho = \bar{\rho}(z, t) + \rho', \quad P = P(z, t) + P', \\
\nabla \mu \nabla &= \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \mu \frac{\partial}{\partial y}
\end{aligned} \tag{1}$$

с краевыми условиями

$$\begin{aligned}
\frac{\partial u}{\partial z} &= -\frac{\tau_{zx}}{\rho_0 \nu}, \quad \frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{\tau_{zy}}{\rho_0 \nu}, \quad w = 0, \\
T' &= T^* - \bar{T}(0, t), \quad S' = S^* - \bar{S}(0, t) \quad \text{при } z = 0, \\
u = 0, \quad v = 0, \quad \frac{\partial T'}{\partial n} &= 0, \quad \frac{\partial S'}{\partial n} = 0 \quad \text{на } \sigma, \\
u = 0, \quad v = 0, \quad w = 0, \quad \frac{\partial T'}{\partial z} &= -\gamma_T, \quad \frac{\partial S'}{\partial z} = -\gamma_S, \quad \text{при } z = H, \\
u = u^0, \quad v = v^0, \quad T' = T'^0, \quad S' &= S'^0 \quad \text{при } t = 0.
\end{aligned} \tag{2}$$

$$\tag{3}$$

Здесь: u, v, w – компоненты вектора скорости течения \vec{u} вдоль осей x, y, z соответственно (ось x направлена на восток, ось y на север, ось z – с поверхности моря вертикально вниз); T', S', P', ρ' – отклонения температуры, солёности, давления и плотности от осредненных по горизонтали профилей соответствующих величин $\bar{T}, \bar{S}, \bar{P}, \bar{\rho}$; $\ell = \ell_0 + \beta y$ – параметр Кориолиса; H, g, ρ_0, c – глубина бассейна, ускорение силы тяжести, средняя плотность и удельная теплоемкость морской воды соответственно; $\mu, \mu_{T,S}, \nu, \nu_{T,S}$ – горизонтальный и вертикальный коэффициенты турбулентности для импульса, тепла и солей соответственно; n – внешняя нормаль к боковой поверхности σ ; $\tau_{zx}, \tau_{zy}, T^*, S^*$ – компоненты тангенциального напряжения ветра вдоль осей x и y , температура и солёность на поверхности моря соответственно.

Предпоследнее слагаемое в правой части уравнения притока тепла выражает поглощение морской водой суммарной солнечной радиации, где поток радиации является экспоненциально затухающей функцией с глубиной

$$\begin{aligned}
I &= \eta(1 - A)I_0 e^{-\alpha z}, \\
I_0 &= a \sin h_{\odot} - b \sqrt{\sin h_{\odot}}, \\
\sin h_{\odot} &= \sin \varphi \sin \psi + \cos \varphi \cos \psi \cos \frac{\pi}{12} \cdot t.
\end{aligned} \tag{4}$$

Здесь: I_0 – поступающий на поверхность моря поток суммарной радиации, определенный формулой Альбрехта [6]; α – показатель поглощения коротковолновой радиации морской водой; A – альbedo морской поверхности; h_{\odot} – зенитный угол Солнца; φ – географическая широта; ψ – склонение Солнца; η – коэффициент, учитывающий влияние облачности на радиацию и определенный формулой [7]

$$\eta = 1 - (\tilde{A} + \tilde{b}\tilde{n}) \cdot \tilde{n}. \tag{5}$$

Входящие в формулы (4) и (5) a , b , \tilde{a} , \tilde{b} – эмпирические коэффициенты, а \tilde{n} – балл общей облачности в единицах.

Следует отметить, что после присоединения атмосферного блока и уравнения теплового баланса поверхности моря к модели окажется возможным рассчитать суточный ход температурного поля при $z = 0$ или потоков тепла у морской поверхности. Полученные значения поверхностной температуры или потоков тепла будут использованы в задаче динамики моря в качестве верхнего граничного условия.

В работе [8] установлено, что задача (1)–(3) имеет единственное решение. Для численного решения задачи (1)–(3) использован предложенный Г.И. Марчуком [1] двуциклический метод расщепления основной задачи как по физическим процессам, так и по пространственным координатам и вертикальным сечениям, позволяющий существенно упрощать реализацию сложных физических моделей. Как и в [4], коэффициенты горизонтальной и вертикальной турбулентности рассчитывались в процессе решения задачи.

Модель реализована для бассейна Черного моря с учетом квазиреальной топографии дна. Поверхность моря покрывалась регулярной сеткой с постоянными шагами Δx и Δy , равными 37 км. Количество точек по горизонтальным координатам x и y – 30 и 16 соответственно. По вертикали было 34 уровня, из них 32 расчетных (1, 3, 5, 7, 11, 15, 25, 35, 55, 85, 135, 205, 305, ..., 2205 м).

С помощью модели были воспроизведены среднегодовой гидрологический режим Черного моря и его сезонные изменения. В первом численном эксперименте для получения среднегодовых гидрофизических полей использовались те же среднегодовые климатические входные данные о функциях τ_{zx} , τ_{zy} , T^* , S^* , \bar{T} и \bar{S} , как и в [4]. Согласно [9] среднегодовые значения альbedo, общей облачности и потока суммарной радиации при $z = 0$ были $A = 0.15$, $\tilde{n} = 0.55$, $I_0 = 0,252 \frac{\text{КВт}}{\text{м}^2}$. Такое значение I_0 соответствует условиям безоблачного неба для 40° с. ш. Согласно [7] эмпирические коэффициенты $\tilde{a} = \tilde{b} = 0,38$. В численном эксперименте по моделированию сезонной изменчивости гидрофизических полей применялась та же интерполяция для воспроизведения сезонного хода

τ_{zx} , τ_{zy} , T^* , S^* , \bar{T} и \bar{S} , как и в [10]. Суточный ход поступающей к поверхности радиации рассчитывался по формуле (4), где $a = 1,54 \frac{\text{кВт}}{\text{м}^2}$, $b = 0,22 \frac{\text{кВт}}{\text{м}^2}$. Зависимость альбедо от зенитного угла в основном имела такой же характер, какой указан в таблице, приведенной в [11], при волнении морской поверхности 1–3 балла и нижней облачности 0.2 балла. Согласно этой таблице $A(h_{\odot})$ претерпевает значительные суточные изменения. Например, при $h_{\odot} = 60^{\circ}$ $A = 0,039$, а при $h_{\odot} = 5^{\circ}$ $A = 0,26$. Сезонный ход общей облачности над бассейном Черного моря воспроизводили интерполяцией по среднесезонным величинам балла облачности, приведенным в [9]. Показатель поглощения радиации α в обоих экспериментах принимали равным $0,0023 \text{ м}^{-1}$. Такое значение α соответствует обычной океанской воде, в которой около 10% поступившей радиации достигает глубины 10 м [12]. Удельная теплоемкость $c = 4,09 \text{ Дж} \cdot \text{г}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$, которая соответствует морской воде с соленостью примерно 18‰. Остальные параметры, используемые в обоих экспериментах, имели следующие значения:

$$\rho_0 = 1 \text{ г} \cdot \text{см}^{-3}, \quad \ell = 0,95 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}, \quad \beta = 10^{-13} \text{ см}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}, \quad \Delta t = 1 \text{ ч}.$$

В численном эксперименте по моделированию среднегодовых полей интегрирование системы уравнений (1) начиналось с нулевых начальных условий и продолжалось до установления квазистационарного состояния. Достижение такого состояния контролировалось по поведению во времени кинетической и потенциальной энергий. В численном эксперименте сезонного хода начальный момент интегрирования соответствовал значению потока радиации I_0 к моменту 12 ч среднепоясного времени 15 января, вычисленного по формуле (4), а в качестве начального состояния принимались среднегодовые климатические поля u , v , T' , S' , полученные в первом эксперименте. Результаты расчетов анализировались на четвертом году модельного времени после начала интегрирования.

На рис. 1 и 2 показаны осредненные по горизонтам профили температур, соответствующих 15-м числам января, апреля, июля и октября, а также среднегодовым условиям в глубоководной ($H > 2000$ м) и восточной частях акватории. Восточный район моря был расположен между $39^{\circ}03'$ в. д. и береговой линией. Анализ этих профилей показывает их определенную изменчивость в зависимости от сезона и района. Результаты модели подтверждают известные из наблюдений основные особенности вертикальной термической структуры Черного моря [13–15]. В верхнем слое, в глубоководной области моря при среднегодовых климатических условиях и по всем сезонам года кроме зимы, четко выделяются верхний квазиоднородный слой, сезонный термоклин и холодный промежуточный слой (ХПС). Абсолютный минимум температуры в этом слое находится на глубине 55 м. Ниже этого слоя температура незначительно возрастает примерно до 9°C . Из рис. 1. видно, что термоклин особенно сильно выражен летом в обеих частях акватории. Понижение температуры в этом слое составляет примерно $14 - 15^{\circ}\text{C}$, что хорошо согласуется с экспериментальными данными [15]. Зимой вертикальное распределение температуры имеет совершенно иной вид. Охлаждение поверхности моря из-за отдачи тепла атмосфере приводит к интенсивному развитию процессов конвективного перемешивания, способствующих выравниванию температур. Зимой охлаждение суши оказывает заметное влияние на температуру прибрежных вод. Поэтому в глубоководной части моря

зимой температура в верхних слоях выше, чем в прибрежной восточной зоне. Как видно из рис.16, в восточном районе моря, в отличие от глубоководной части, ХПС отсутствует летом и при среднегодовых климатических условиях. На рис. 3 представлены вертикальные сечения температуры вдоль параллели $43^{\circ}18'$ с. ш., соответствующие 15 июля и 15 октября.

Сезонные изменения проявляются больше всего в температурном поле. На рис.4 показаны сезонные изменения осредненной по глубоководной акватории температуры на разных глубинах. Амплитуды сезонных колебаний с глубиной уменьшаются и ниже 85 м практически отсутствуют. Поглощение морской водой солнечной радиации приводит к прогреву воды примерно на $0.1 - -0.3^{\circ}\text{C}$ и к малым суточным колебаниям температуры верхнего слоя моря. На рис. 5 показаны суточные колебания осредненной по глубоководному району бассейна температуры 15 и 16 июля на глубинах 3 и 11 м. Проведенные нами оценки показали, что несмотря на малость изменения температуры воды под влиянием поглощения радиации из-за ее большой теплоемкости, поверхностные слои Черного моря могут аккумулировать значительные запасы тепла, а этот фактор будет играть не второстепенную роль в процессе взаимодействия моря и атмосферы. Нами вычислялось теплосодержание

$$Q = c \int \int \int \rho T dx dy dz$$

поверхностного слоя толщиной 55 м как с учетом, так и без учета поглощения коротковолновой радиации. На рис. 6 показано изменение разности $Q' = Q_1 - Q_2$ по месяцам, где Q_1 и Q_2 – значения теплосодержания поверхностного слоя, рассчитанные нами с учетом и без учета радиации соответственно. Из рисунка видно, что энергетическое влияние радиации больше всего проявляется в августе, и за этот период верхний слой моря, вследствие поглощения солнечной радиации, может накопить значительное количество тепловой энергии. Элементарные оценки показывают, что если бы эту энергию море отдало атмосфере, то это было бы достаточно для прогрева на 10°C слоя воздуха толщиной примерно 600 м, лежащего над акваторией Черного моря.

Анализ результатов модельных расчетов показал, что поглощение радиации вызывает незначительные изменения в циркуляции и распределении плотности и солености.

На рис. 7 показаны рассчитанные течения на глубине 25 м, соответствующие 15 октября и 15 января, а на рис. 8 – рассчитанное поле условной плотности на той же глубине и в те же моменты времени. Согласно экспериментальным данным о поверхностной циркуляции вся акватория Черного моря охвачена циклоническим круговоротом с двумя основными циклоническими круговоротами в западной и восточной частях акватории [13–16]. Кроме того, экспериментальные данные говорят об интенсификации циклонической циркуляции в зимний период [15]. Наши расчеты подтверждают эти выводы. В них, как видно из рис. 7, в юго-восточной части бассейна имеет место антициклоническая циркуляция, которая более отчетливо выражена осенью. Такая циркуляция в этой части моря существовала в течение всего года с некоторыми внутrigодовыми изменениями ее структуры, интенсивности и местоположения. Следует отме-

тить, что этот результат находится в хорошем согласии с результатом, полученным по численной модели [17]. Кроме того, экспериментальные исследования указывают на существование антициклонического вихря в этой части моря [14, 15]. Анализ рассчитанных полей солёности и плотности показывает, что они хорошо коррелируют между собой, а это подтверждает вывод, сделанный в [3, 5] о том, что плотность определяется в основном солёностью. Из рис. 8 видно, что поле плотности находится в хорошей корреляции с циркуляцией. Зимой, когда циклоническая циркуляция интенсивна, изопикнические поверхности имеют четко выраженную куполообразную форму с двумя выпуклостями в западной и восточной частях бассейна, центры которых примерно совпадают с центрами циклонических круговоротов. Аналогичной особенностью характеризуется поле солёности. Полученные основные особенности полей плотности и солёности находятся в хорошем согласии с данными наблюдений [13–16].

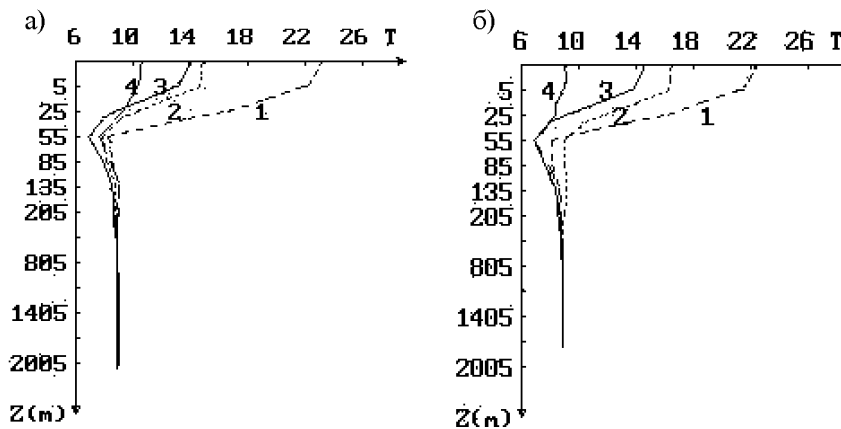


Рис. 1. Осредненные профили температуры ($^{\circ}\text{C}$): а – в глубоководной части моря; б – в восточной части моря; 1 – 15 июля, 2 – среднегодовой, 3 – 15 апреля, 4 – 15 октября

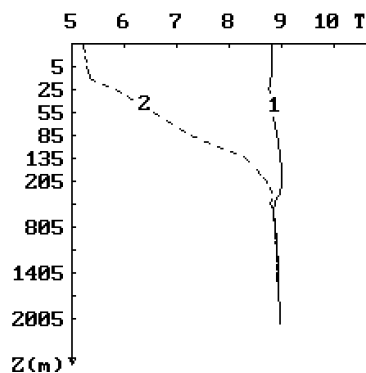


Рис. 2. Осредненные профили температуры (15 января): 1 – в глубоководной части моря; 2 – в восточной части моря

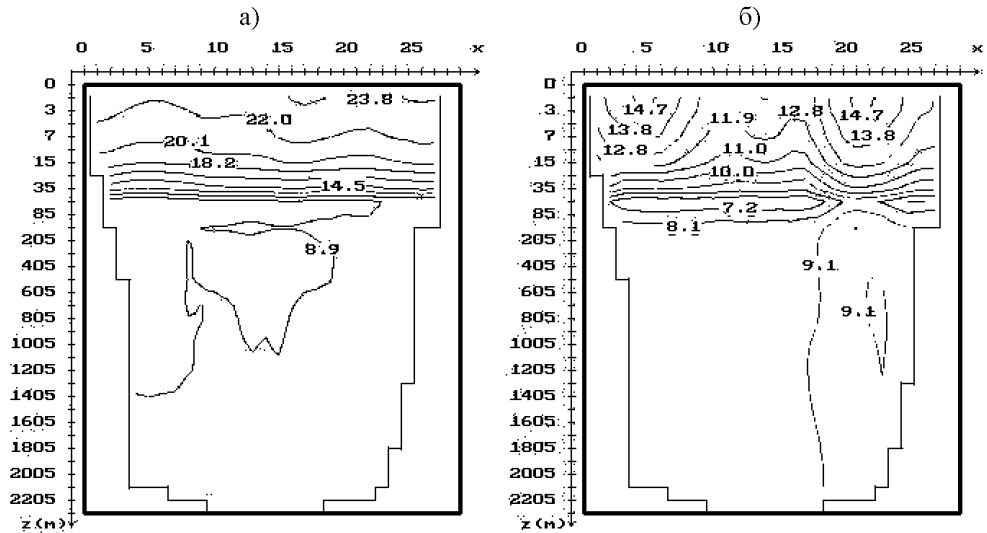


Рис. 3. Распределение температуры в вертикальном сечении по параллели $43^{\circ}18'$ с. ш.: а – 15 июля, б – 15 октября

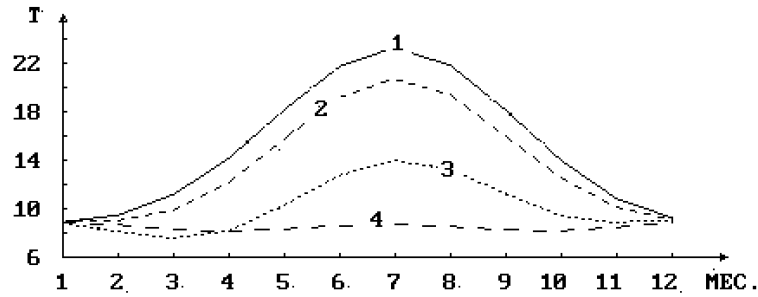


Рис. 4. Годовой ход осредненной в глубоководной части температуры на глубинах: 1 – 1 м; 2 – 11 м; 3 – 35 м; 4 – 85 м



Рис. 5. Суточный ход осредненной в глубоководной части моря температуры 15 и 16 июля на глубинах: 1 – 3 м; 2 – 11 м



Рис. 6. Годовой ход прироста теплосодержания верхнего 55-метрового слоя, обусловленного поглощением солнечной радиации (в единицах 10^7 ГДж)

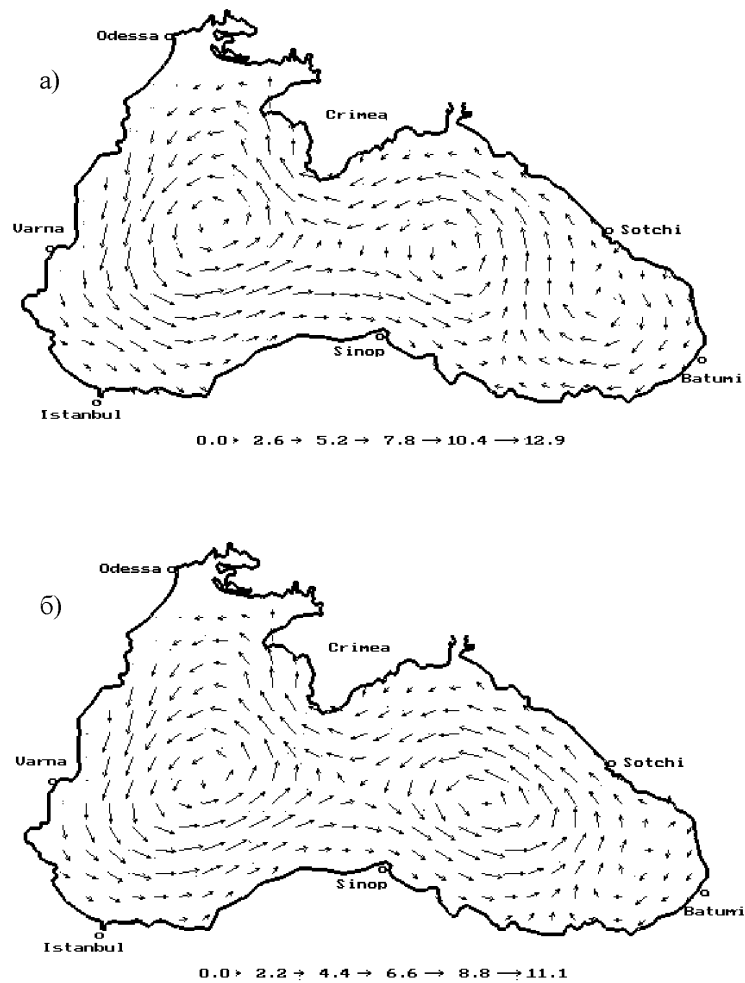


Рис. 7. Поле течения на глубине 25 м: а – 15 октября; б – 15 января

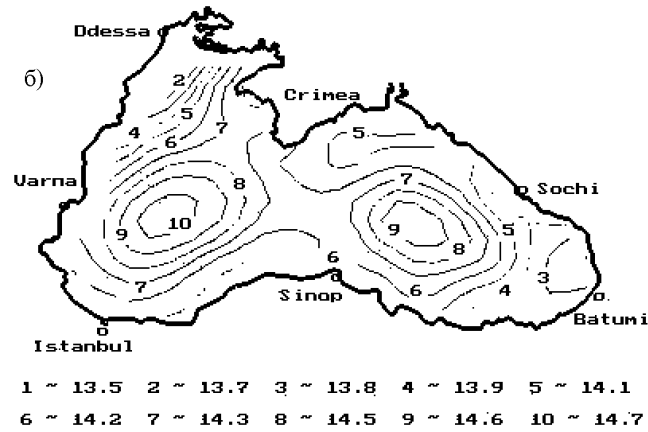
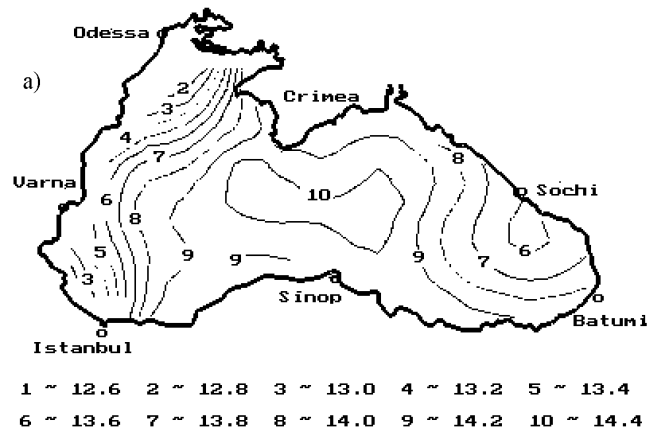


Рис. 8. Распределение условной плотности на глубине 25 м: а – 15 октября; б – 15 января

ЛИТЕРАТУРА

1. Марчук Г.И. Численное решение задач динамики атмосферы и океана. –Л.: Гидрометеиздат, 1974. –303 с.
2. Марчук Г.И., Кордзадзе А.А. Численное моделирование динамики моря на основе метода расщепления // Численное моделирование климата Мирового океана. –М.: ОВМ АН СССР, 1986. С. 151–163.
3. Кордзадзе А.А. Математическое моделирование динамики морских течений (теория, алгоритмы, численные эксперименты). –М.: ОВМ АН СССР, 1989. –218 с.

4. Kordzadze A. Demetrashvili D. Numerical modeling of annual mean hydrophysical fields in the Black Sea // *J. of Georgian Geophys. Soc.*, 1998. Vol 3. P. 36–49.
5. Kordzadze A.A. Mathematical modelling of the Black Sea dynamics // *Computations and Applications / Proc. of the International Conference AMCA-95. Novosibirsk, Russia, 20–24 June 1995.* P. 337–342
6. Будыко М.И. Тепловой баланс земной поверхности. –Л.: Гидроиздат, 1956. –254 с.
7. Берлянд Г.Г. Методика климатологических расчетов суммарной радиации // *Метеорология и гидрология*, 1960. №6. С. 9–12.
8. Кордзадзе А.А. Математические вопросы решения задач динамики океана. –Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, 1982. –148 с.
9. Справочник по климату Черного моря / Под ред. А.И. Соркиной. –М.: Гидрометеиздат, 1974. –404 с.
10. Kordzadze A.A. Demetrashvili D. Numerical modeling of seasonal variability of large-scale hydrophysical processes in the Black Sea // *J. of Georgian Geophys. Soc.* 1998. Vol. 36. P. 50–62.
11. Кондратьев К.Я., Жвалов В.Ф. Корзов В.И., Тер-Маркарянц Н.Е. Альbedo и вопросы его параметризации для климатических расчетов // *Тр. ГГО.* –Л.: Гидрометеиздат, 1987. Вып. 507. С. 24–50.
12. Гарвей Дж. Атмосфера и океан. –М.: Прогрес, 1986. –183 с.
13. Блатов А.С., Булгаков Н.П. и др. Изменчивость гидрофизических полей Черного моря. –Л.: Гидрометеиздат, 1984. –238 с.
14. Филиппов Д.М. Циркуляция и структура вод Черного моря. –М.: Наука, 1968. –134 с.
15. Станев Е., Трухчев Д., Русенов В. Циркуляция вод и численное моделирование течений Черного моря. –София: Климент охридски, 1988. –220 с.
16. Богатко О.Н., Богуславский С.Г., Беяков Ю.М., Ивашов Р.И. Поверхностные течения Черного моря // *Комплексные исследования. Черного моря.* –Севастополь: Изд-во МГИ АН УССР, 1979. С. 25–33.
17. Демышев С.Г., Коротаев Г.К. Численное моделирование сезонного хода синоптической изменчивости в Черном море // *Изв. РАН. Физика атмосферы и океана.* 1966. Т. 32. №1. С. 108–116.

Вариационные принципы и оптимизация во взаимосвязанных задачах экологии и климата ¹

В. В. ПЕНЕНКО

Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН
E-mail: penenko@sscc.ru

Излагается методика построения с помощью вариационных принципов численных моделей и методов их совместного использования с данными мониторинга для решения задач экологии и климата. Основное внимание уделяется многокомпонентным обратным задачам дистанционного зондирования. Обсуждается организация методов прямого и обратного моделирования для целей диагностики, проектирования, мониторинга и прогнозирования.

ВВЕДЕНИЕ

В работах Г.И.Марчука и его научной школы создана методология математического моделирования, исследованы ее фундаментальные вопросы и разработаны оригинальные конструктивные подходы к изучению циркуляции атмосферы и океана и к решению с помощью математических моделей задач прогноза погоды, теории климата и охраны окружающей среды [1–8].

Настоящая статья посвящена изложению некоторых аспектов методологии моделирования, а именно разработке вариационных принципов и методов оптимизации для совместного использования численных моделей и данных мониторинга. По содержанию она представляет развитие работ по методам прямого и обратного моделирования для решения взаимосвязанных задач экологии и климата [7–18].

Накопленный в мире опыт решения научных и практических задач природоохранного направления показывает, что математические модели и данные натурных исследований и наблюдательных экспериментов являются равноправными и дополняющими друг друга инструментами для изучения природных

¹Работа выполняется при поддержке РФФИ (гранты №98–05–65318, №99–07–90422) и Программы перспективных информационных технологий Миннауки России (грант 0201.06.269/349).

процессов. В последние годы в этих исследованиях обозначилась тенденция к расширению набора специальных приборов, с помощью которых производятся наблюдения. Наиболее отчетливо она проявляется при изучении экологически значимых последствий антропогенных воздействий. При этом активно используются методы дистанционного зондирования [4, 19–22] в сочетании с различными методами контактных измерений. В результате сбора данных к исследователям попадает разнородная информация, с разных сторон характеризующая наблюдаемые явления. В этом случае естественно возникает задача совместного использования этой информации и математических моделей с целью усвоения данных, восстановления пространственно-временной структуры полей функций состояния, оценки параметров моделей и источников внешних воздействий, диагностики качества моделей и планирования наблюдений. Технологию решения подобных задач дает разрабатываемая нами методика обратного моделирования [10, 12, 16, 18].

1. Постановка задачи

Будем рассматривать задачи четырех типов: диагностики, мониторинга, проектирования и прогнозирования. В задачах первых трех типов предполагается наличие фактической информации, распределенной в пространственно-временной области, так что модели в ней могут все время работать совместно с данными. Для их решения строится комбинация методов прямого и обратного моделирования. В задачах четвертого типа обычно задается некоторый момент времени, когда поступление фактической информации об изучаемых процессах "отсекается" и модель начинает работать по времени самостоятельно в режиме прямого моделирования. Но при наличии целевых функционалов и ограничений и в прогностических задачах необходимо включать комбинацию прямого и обратного моделирования, чтобы обеспечивать взаимодействие между функционалами и моделями, например через функции чувствительности к вариациям параметров и источников.

Для определенности представим задачи, связанные с оценками характеристик атмосферы с использованием данных дистанционного зондирования и контактных наблюдений за компонентами функций состояния. В данном случае типичной является задача о нахождении распределения температуры и концентраций оптически активных субстанций в атмосфере. Специфика методов дистанционного зондирования состоит в том, что их результаты в общем случае представляют собой значения некоторых функционалов на множестве функций состояния. Они, как правило, недоопределены по отношению к оцениваемым функциям, т.е. число наблюдений меньше числа внутренних степеней свободы моделей наблюдений в дискретном представлении. Под моделью наблюдений мы понимаем математическое описание преобразования, ставящего в соответствие функции состояния образ той величины, которая измеряется наблюдательным прибором. Возникает вопрос, как ввести дополнительные связи, чтобы уменьшить число внутренних степеней свободы, и тем самым сделать процесс решения обратных задач для моделей наблюдений более корректным. Для этих целей мы будем использовать в качестве связей математические модели исследуемых процессов и априорные сведения об искомым функциях и оцени-

ваемых параметрах. Естественно, деление на модели процессов и модели наблюдений чисто условное. Например, модель гидротермодинамики в диагностических и прогностических задачах используется для описания формирования соответствующих процессов в атмосфере. А в обратных задачах усвоения данных наблюдений эта же модель помимо своей основной роли выступает в качестве пространственно-временного интерполянта, т.е. становится элементом модели наблюдений. Модели дистанционных наблюдений также можно использовать для описания процессов распространения излучения в атмосфере. Модель наблюдений можно считать квазистационарной, параметрически учитывающей время, если продолжительность каждого измерения мала по сравнению с шагом дискретизации, принятым в моделях процессов. В этом случае отсчет времени ведется по модели процесса, а результаты наблюдений приписываются к соответствующему интервалу "модельного" времени.

Определим основные элементы постановки задачи: модели процессов, модели измерений и функционалы для организации методов моделирования и усвоения данных наблюдений. Для описания процессов и их математических моделей введем три типа объектов:

- функции состояния $\vec{\varphi} = \{\varphi_i, i = \overline{1, n\varphi}\} \in Q(D_t, D_{t\nu})$,
- параметры моделей $\vec{Y} = \{Y_i, i = \overline{1, np}\} \in R(D_t, D_{t\nu})$,
- сопряженные функции $\vec{\varphi}^* = \{\varphi_i^*, i = \overline{1, n\varphi}\} \in Q^*(D_t, D_{t\nu})$.

Функциональное пространство $Q^*(D_t, D_{t\nu})$ сопряжено по отношению к пространству функций состояния $Q(D_t, D_{t\nu})$, $R(D_t, D_{t\nu})$ – область допустимых значений параметров, $D_t, D_{t\nu}$ – области изменения пространственно-временных координат \vec{x}, t и частот ν . Например, $D_t = D \times [0, \bar{t}]$; D – область изменения пространственных координат \vec{x} , а $[0, \bar{t}]$ – интервал изменения времени; $Q(D_t)$ – пространство функций состояния, удовлетворяющих краевым условиям на границе области D_t . Область D рассматривается в трех вариантах: сфера, полусфера и ограниченная территория на сфере. Структура областей, выбор системы координат, основные обозначения и их смысл, постановки задач, краевых и начальных условий, описание функций состояния и параметров, структура функционалов, в зависимости от целей исследований, и способы построения интегрального тождества для вариационных формулировок моделей описаны в [7, 8, 11, 15].

Для задания вертикальной структуры моделей используется принцип декомпозиции по областям [15]. Область D условно разбивается на два слоя: "свободная" атмосфера $D_1(p_T \leq p \leq p_B)$ и нижний слой, включая пограничный, $D_2(p_B \leq p \leq p_S(\vec{x}, t))$, где p – давление, p_S, p_B, p_T – давление на поверхности Земли, на границе раздела слоев и на верхней границе атмосферы. Введем гибридную систему координат, позволяющую объединить преимущества реализации моделей в изобарических координатах в свободной атмосфере (в случае постоянных p_B, p_T) с удобствами сигма-координат для учета рельефа поверхности Земли:

$$\begin{aligned} \sigma &= (p - p_T)/\pi, & \pi &= (p_B - p_T)/\varepsilon & \text{в } D_1; \\ \sigma &= (p - p_S)/\pi + \varepsilon, & \pi &= (p_S - p_B)/(1 - \varepsilon) & \text{в } D_2; \end{aligned}$$

Параметр ε ($0 \leq \varepsilon \leq 1$) вводится так, чтобы поверхность $p = p_B$ была выше уровня "модельного" рельефа поверхности Земли. Если в модели предполагается наличие ошибок, то описывающие их выражения формально включаются в состав функций источника как дополнительные слагаемые [10, 12].

Структуры функций $\vec{\varphi}$ и $\vec{\varphi}^*$ идентичны, хотя информационное содержание их различается. В наших построениях сопряженные функции являются обобщенными множителями Лагранжа. Они вводятся для построения вариационного принципа, чтобы исследовать поведение целевых функционалов в пространствах функций состояния и параметров. С их участием реализуются обратные связи от функционалов и данных наблюдений к моделям и их входным параметрам.

С позиций вариационного принципа численные модели являются ограничениями на класс функций и связями между параметрами и функциями состояния. Часть параметров задается по принципу внешнего дополнения и рассматривается как входная информация. Она определяет число внешних степеней свободы. В обратных задачах некоторые параметры являются искомыми и находятся по измеренным данным о функции состояния. Так как они не увеличивают число внутренних степеней свободы в процессе моделирования, их можно рассматривать как внутренние параметры модели. В качестве первого приближения для них задаются их априорные оценки по доступной фактической информации.

2. МОДЕЛИ ПРОЦЕССОВ

Мы будем работать с моделями гидротермодинамики в климатической системе, моделями переноса и трансформации влаги, химически и оптически активных загрязняющих примесей в газовом и аэрозольном состояниях. Функции источников в моделях параметрически учитывают действия естественных и антропогенных факторов. Чтобы рассматривать совместно модели процессов и систему мониторинга с целью организации между ними взаимодействия в режиме прямых и обратных связей, будем предполагать, что все элементы комплекса (т.е. модели и наблюдения) могут содержать ошибки. В этом случае естественно ставить вопрос о конструировании алгоритмов для реализации таких связей, исходя из условий минимизации ошибок.

Общую структуру моделей для данного класса задач можно записать в следующей операторной форме:

$$L_0(\vec{\varphi}) \equiv B \frac{\partial \vec{\varphi}}{\partial t} + G(\vec{\varphi}, \vec{Y}) - \vec{f} - \vec{\varepsilon} = 0, \quad (1)$$

где B – диагональная матрица, $G(\vec{\varphi}, \vec{Y})$ – нелинейный матричный дифференциальный оператор, основным элементом в нем – адвективно-диффузионный оператор, действующий на различные компоненты функции состояния; \vec{f} – функции источников, $\vec{\varepsilon}$ – ошибки моделей. Операторы переноса в моделях процессов симметризируются с помощью уравнения неразрывности [7].

Мы не будем в деталях описывать все элементы комплекса и построения алгоритмических конструкций. Их различные аспекты представлены в работах

[7–18]. Здесь рассмотрим только те модели, из входящих в состав комплекса моделей климатической системы, которые непосредственно связаны с процессами распространения тепла, излучения и переноса оптически и химически активных субстанций в атмосфере.

1. Модель термодинамики атмосферы

$$L_1(\vec{\varphi}) \equiv \frac{\partial \pi \theta}{\partial t} + \operatorname{div}(\pi(\theta \vec{u} - \mu_\theta \operatorname{grad} \theta)) - \pi Q_\theta - \varepsilon_\theta = 0. \quad (2)$$

2. Модели переноса и трансформации влаги и оптически и химически активных примесей в газовом и аэрозольном состояниях

$$L_2(\vec{\varphi}) \equiv \frac{\partial \pi \varphi_i}{\partial t} + \operatorname{div}(\pi(\varphi_i \vec{u} - \mu_{\varphi_i} \operatorname{grad} \varphi_i)) - \pi (R_t(\vec{\varphi}))_i - \pi Q_{\varphi_i} - \varepsilon_{\varphi_i} = 0, \quad (3)$$

$$i = \overline{1, na}.$$

Здесь θ – потенциальная температура, \vec{u} – вектор скорости, $\mu_\theta, \mu_{\varphi_i}$ – коэффициенты турбулентного обмена, π – функция, зависящая от давления, φ_i – отношения смеси для характеристик атмосферной влаги и концентрации примесей в атмосфере, na – общее число субстанций, Q_θ, Q_{φ_i} – источники тепла, влаги и примесей, $(R_t(\vec{\varphi}))_i$ – операторы, описывающие процессы трансформации, $\varepsilon_\theta, \varepsilon_{\varphi_i}$ – функции, учитывающие ошибки и меру неопределенностей моделей процессов. Функции θ и $\varphi_i, i = \overline{1, na}$ включаются в число компонентов функции состояния $\vec{\varphi}$, а $\mu_\theta, \mu_{\varphi_i}, Q_\theta, Q_{\varphi_i}$ и входные данные начальных и краевых условий – в компоненты вектора параметров \vec{Y} .

Если в модели учитывается аэрозолеобразование, то в этом случае добавляется еще одна независимая переменная – размер частиц, и по этой переменной оператор трансформации становится интегро-дифференциальным. Содержательное и конструктивное описание операторов трансформации примесей осуществляется с помощью автоматизированной системы построения кинетических моделей атмосферной химии [13].

3. МОДЕЛИ ДИСТАНЦИОННЫХ НАБЛЮДЕНИЙ

1. Модель расчета спектральной интенсивности $I_{1\nu}$, измеряемой со спутника [19]:

$$M_1(\vec{\varphi}) \equiv I_{1\nu} - B_\nu(T(1))\tau(\nu, 1) - \int_0^1 B_\nu(T(\sigma)) \frac{\partial \tau(\nu, \sigma)}{\partial \sigma} d\sigma - \varepsilon_{I1} = 0, \quad (4)$$

где $B_\nu(T) = a\nu^3[\exp(b\nu/T) - 1]^{-1}$ – функция Планка, зависящая от частоты ν и температуры $T(\sigma)$, a и b – заданные постоянные, σ – вертикальная координата, $\tau(\nu, \sigma)$ – функция пропускания слоя атмосферы от эффективной верхней границы до уровня σ .

2. Модель дистанционного зондирования длинноволнового излучения со спутников [4,20]:

$$M_2(\vec{\varphi}) \equiv I_{2\nu} - \int_0^h dz \int_0^\infty d\nu \int_{-1}^1 \chi_\nu(\vec{x}, t) \eta d\mu - \varepsilon_{I2} = 0, \quad (5)$$

где функция η является решением задачи

$$\mu \frac{\partial \eta}{\partial z} + \alpha_\nu \eta - 0,5 \int_{-1}^1 \eta \alpha_{S\nu} \gamma_\nu(\mu, \mu') d\mu' - f_\nu - \varepsilon_\eta = 0. \quad (6)$$

Здесь $\mu = \cos \theta$, θ – высотный угол, η – интенсивность излучения с частотой ν , z – вертикальная координата, отсчитываемая от поверхности Земли, h – эффективная верхняя граница атмосферы, $\gamma_\nu(\mu, \mu')$ – индикатрисса рассеяния, $\chi_\nu(\vec{x}, t)$ – заданная функция, характеризующая условия измерения излучения $I_{2\nu}$; функция источника

$$f_\nu = S_\nu \delta(\mu - \mu_\Theta) \delta(z - h) \mu_\Theta + 0,5 \alpha_{c\nu} B_\nu(T); \quad (7)$$

S_ν – спектр солнечного излучения; $\alpha_\nu = \alpha_{S\nu} + \alpha_{c\nu}$, $\alpha_{S\nu}$, $\alpha_{c\nu}$ – коэффициенты рассеяния и поглощения; $\mu_\Theta = \cos \theta_\Theta$, θ_Θ – высота Солнца.

Для замыкания этой модели задаются краевые условия. На верхней границе предполагается, с учетом вида функции источников (7), отсутствие приходящего извне излучения. На нижней границе принимается условие диффузного отражения излучения от земной поверхности с учетом ее собственного излучения.

Для вычисления функционала $I_{2\nu}$ используется вариационный принцип с множителями Лагранжа, позволяющий построить для него соотношения чувствительности и в линейном случае исключить непосредственное вычисление функции η из решения уравнения (6) при соответствующих краевых условиях.

3. Модель расчета яркостных температур. Для случая наземного дистанционного зондирования атмосферного радиоизлучения в микроволновых окнах прозрачности эту модель можно использовать в виде [22]

$$M_3(\vec{\varphi}) \equiv T_{b\nu} - \int_0^H T(l) \beta_\nu(l) \exp\left\{-\int_0^l \gamma_\nu(l' dl')\right\} dl - \varepsilon_b = 0, \quad (8)$$

где $T_{b\nu}$ – яркостная температура, $\beta_\nu(l)$ – коэффициент поглощения микроволнового излучения на частоте ν , T – температура атмосферы, l – обобщенная вертикальная координата, зависящая от высоты над поверхностью Земли, коэффициент преломления и зенитного угла зондирования, H – высота атмосферы.

4. Модель лазерного зондирования атмосферы. Для примера возьмем уравнения лазерного зондирования в форме [21]

$$M_4(\vec{\varphi}) \equiv S(r) - Cb(r)\alpha(r) \exp\left\{-2 \int_0^r \alpha(r') dr'\right\} - \varepsilon_S = 0, \quad (9)$$

где C – константа калибровки лазера, $S(r)$ – лидарная S-функция, представляющая собой величину измеренного сигнала, скорректированного на квадрат расстояния и геометрическую функцию лидара, $b(r)$ – лидарная функция, $\alpha(r)$ – коэффициент аэрозольного ослабления сигнала в атмосфере. Обозначим $S(r) + \varepsilon_S = \tilde{S}(r)$. Уравнение (9) можно преобразовать к виду

$$\alpha(r) = \frac{\tilde{S}(r)}{Cb(r)} \left[1 - 2 \int_0^r \frac{\tilde{S}(r')}{cb(r')} dr'\right]^{-1}. \quad (10)$$

Если предположить, что структура функций $C, S(r), b(r)$ известна, то в зависимости от целей исследования и наличия информации можно использовать обе формы уравнений – либо совместно, либо по отдельности. Отметим, что при совместном использовании совокупность уравнений (9)–(10) составляет алгоритмическую основу лазерной томографии атмосферных аэрозолей. Функции $I_{1\nu}, I_{2\nu}, T_{b\nu}, S(r)$ в (4)–(10) можно рассматривать как дополнительные компоненты функции состояния атмосферы $\vec{\varphi}$. Функции $B_\nu(T), \tau(\nu, \sigma), \alpha(r), \beta_l(l)$ в моделях наблюдений зависят от функции состояния моделей процессов, которые и должны оцениваться с помощью решения обратных задач. Символом ε с соответствующими индексами мы, как и ранее, обозначаем ошибки моделей. Они подлежат оценке по результатам измерений. Их количественные значения характеризуют меру качества моделей на множестве данных наблюдений.

4. ФУНКЦИОНАЛЫ ДЛЯ ОРГАНИЗАЦИИ МОДЕЛИРОВАНИЯ И УСВОЕНИЯ ДАННЫХ НАБЛЮДЕНИЙ

1. Целевые функционалы для оценок обобщенных характеристик процессов и моделей, качества атмосферы и информативности наблюдений. Общий вид этих функционалов:

$$\Phi_k(\vec{\varphi}) = \int_{D_t} F_k(\vec{\varphi}) \chi_k(\vec{x}, t) dD dt, \quad k = \overline{1, K}, \quad \vec{\varphi} \in Q(D_t), \quad (11)$$

где $F_k(\vec{\varphi})$ – функции заданного вида, ограниченные и дифференцируемые относительно $\vec{\varphi}$ в $Q(D_t)$.

2. "Рабочие" функционалы для организации алгоритмов моделирования и усвоения данных.

2.1. Функционалы качества дистанционных наблюдений

$$\Psi_{1\alpha}(\vec{\varphi}) = \int_{D_t} (I_{\nu\alpha} - I_{\nu\alpha m})^T \chi_{1\alpha}(\vec{x}, t) (I_{\nu\alpha} - I_{\nu\alpha m}) dD dt d\nu, \quad \alpha = \overline{1, 4}. \quad (12)$$

Здесь используются обозначения: индекс α – номер модели наблюдения, соответственно сделаны переобозначения измеряемых функций, $I_{\nu\alpha}$ – рассчитанные с помощью моделей наблюдений (4)–(9) образы наблюдаемых величин, $I_{\nu\alpha m}$ – данные наблюдений, индекс T обозначает операцию транспонирования.

2.2. Функционалы качества для контактных наблюдений за функциями состояния моделей процессов (1)–(3)

$$\Psi_{2i}(\vec{\varphi}) = \int_{D_t} [([\vec{\varphi}]_m - \vec{\varphi}_m)^T \chi_{1\alpha}(\vec{x}, t) ([\vec{\varphi}]_m - \vec{\varphi}_m)]_i dD dt, \quad i = \overline{1, n\varphi}, \quad (13)$$

где индексом m отмечены данные наблюдений, а символом $[\]_m$ – операции сноса (интерполяции) функции состояния на множество точек $(\vec{x}, t)_m \in D_t^m \subset D_t$, где производятся наблюдения, $n\varphi$ – число функций состояния, учитываемых в моделях процессов (1)–(3).

2.3. Функционалы качества моделей или меры ошибок моделей

$$\Psi_{3i}(\vec{\varphi}) = \int_{D_{i\nu}} (\vec{\varepsilon}_\varphi^T \chi_{3\varphi}(\vec{x}, t) \vec{\varepsilon}_\varphi)_i dD dt, \quad i = \overline{1, n\varphi m}, \quad (14)$$

где npt – общее число моделей процессов и моделей наблюдений, участвующих в работе.

2.4. "Регуляризирующие" функционалы для учета априорной информации об оцениваемых функциях и параметрах

$$\Psi_{4i}(\vec{\varphi}) = \int_{D_t} (\vec{\varphi}_i - \vec{\varphi}_{ia})^T \chi_{4i}(\vec{x}, t) (\vec{\varphi}_i - \vec{\varphi}_{ia}) dD dt, \quad i = \overline{1, n\varphi}, \quad (15)$$

$$\Psi_{5i}(\vec{\varphi}) = \int_{D_t} |\text{grad}\varphi_i^0|^2 \chi_{5i}(\vec{x}, t) dD dt, \quad i = \overline{1, n\varphi}, \quad (16)$$

$$\Psi_{6i}(\vec{\varphi}) = \int_{D_t} (\vec{Y} - \vec{Y}_a)^T \chi_{6i}(\vec{x}, t) (\vec{Y} - \vec{Y}_a) dD dt, \quad i = \overline{1, n\varphi}. \quad (17)$$

Здесь нижним индексом a отмечены априорные оценки, а верхним индексом (0) – начальные значения соответствующих объектов. Функционалы этого типа вводятся для уменьшения числа степеней свободы в обратных задачах и для регуляризации процесса вычислений. При решении обратных задач в функционале (17) учитываются только те компоненты вектора параметров, которые необходимо уточнять. При оценке чувствительности целевых функционалов (11) в вариационном принципе участвуют все параметры моделей и источников, которые могут варьироваться.

3. Функционалы ограничений на функции состояния в задачах управления

Функционалы этого типа вводятся для решения задач оптимизации природоохранной деятельности, управления качеством природной среды и экологического проектирования [9]. Запишем их общую форму, используя определение (11):

$$\Psi_{8i}(\vec{\varphi}) = \int_{D_t} F_{8i}(\vec{\varphi}) \chi_{8i}(\vec{x}, t) dD dt \leq 0, \quad i = \overline{1, n\psi}. \quad (18)$$

где функции $F_{8i}(\vec{\varphi})$ определяются так, чтобы с помощью (18) можно было учесть все интегральные и локальные ограничения на функции состояния, $n\psi$ – общее число ограничений. Эти ограничения вытекают из условий устойчивого развития и экологической безопасности индустриальных регионов. Строгое равенство в (18) имеет место тогда, когда надо учитывать распределенные в D_t ограничения типа неравенств

$$\psi_i(\vec{\varphi}, \vec{x}, t) \leq 0, \quad i = \overline{1, n\psi}. \quad (19)$$

В этом случае функции F_{8i} определяем с помощью выражений

$$F_{8i}(\vec{\varphi}, \vec{x}, t) = \begin{cases} |\tilde{\psi}_i + |\tilde{\psi}_i|| \\ (\tilde{\psi}_i + |\tilde{\psi}_i|)^2, \end{cases} \quad (20)$$

где $\tilde{\psi}_i = \psi_i + \xi_i$. Здесь ξ_i – малые положительные параметры. Они вводятся для того, чтобы при численном решении задач ослабить влияние неопределенностей в окрестности границ неотрицательных значений функций ψ_i с учетом их дискретных аппроксимаций на $D_t^h, Q^h(D_t^h)$. При построении алгоритмов теории чувствительности для функционалов (18) специальным образом определяются

операции дифференцирования функций F_{8i} относительно компонент функций состояния на сетке D_t^h .

Для удобства построения алгоритмических конструкций все функционалы определяются по одному принципу, т.е. записываются в виде интегралов с неотрицательными подынтегральными выражениями типа невязок из пространства функций состояния и неотрицательными весовыми функциями из соответствующих сопряженных пространств. Эти функции мы обозначаем через $\chi(\vec{x}, t)$, $\chi(\nu, \vec{x}, t)$, нижние индексы в них отмечают их информационную принадлежность к соответствующим объектам. Выражения $\chi(\vec{x}, t)dD dt$, $\chi(\nu, \vec{x}, t)dD dt d\nu$ обозначают меры Радона и Дирака [23] в областях $D_t, D_{t\nu}$ соответственно. В общем случае это векторные весовые функции и меры. Их структура согласована со структурой скалярных произведений в функционалах (11)–(18).

Теперь, следуя [7,10,12], для организации методов прямого и обратного моделирования определим основной функционал:

$$\tilde{\Phi}_k^h(\vec{\varphi}, \vec{\varphi}^*, \vec{\varepsilon}, \vec{Y}) = \{\Phi_k(\vec{\varphi}) + I(\vec{\varphi}, \vec{\varphi}^*, \vec{\varepsilon}, \vec{Y}) + \sum_{\langle \alpha \rangle} \omega_\alpha \Psi_\alpha(\vec{\varphi})\}^h, \quad (21)$$

$$I(\vec{\varphi}, \vec{\varphi}^*, \vec{\varepsilon}, \vec{Y}) = \sum_{q=0}^2 \int_{D_t} (L_q(\vec{\varphi}) \cdot \vec{\varphi}^*)_q dD dt + \sum_{q=1}^4 \int_{D_{t\nu}} (M_q(\vec{\varphi}) \cdot \vec{\varphi}^*)_q d\nu dD dt \quad (22)$$

$$\omega_\alpha \geq 0, \quad \sum_{\langle \alpha \rangle} \omega_\alpha = 1, \quad k = \overline{1, K}.$$

В (21) первое слагаемое представляет собой целевой функционал из (11), второе учитывает модели процессов (1)–(3) и модели измерений (4)–(9), а в третьем собраны все функционалы (11)–(18). Индекс α пробегает упорядоченное множество этих функционалов, переименованных подряд, ω_α – весовые коэффициенты.

Формула (22) представляет собой определение интегрального тождества для вариационной формулировки совокупности моделей. Скалярные произведения в нем выбираем так, чтобы при $\vec{\varphi}^* = \vec{\varphi}$ оно давало соотношения баланса энергии системы в целом. Верхний индекс h обозначает дискретизацию по пространству, времени и частоте в $D_t, D_{t\nu}$. Соотношения (21), (22) составлены по максимальному числу действующих в системе элементов. В реальных ситуациях, в зависимости от целей исследований и постановок задач, возможны различные сочетания этих элементов – от минимального состава – одна модель + один функционал, до максимального.

Использование мер Радона и Дирака при формировании структуры функционалов обусловлено спецификой применения вариационных принципов для организации численного моделирования. Во-первых, точечные и распределенные наблюдения и ограничения учитываются единообразно, что унифицирует алгоритмические конструкции. Во-вторых, упрощается формализм построения сопряженных задач, так как и сопряженные функции, учитывающие модели процессов и наблюдений, и весовые функции функционалов находятся в сопряженных пространствах.

Дискретизацию функционалов (21), (22) осуществляем с использованием методов слабой аппроксимации, расщепления и декомпозиции. Все кубатурные формулы для интегралов строятся на одних и тех же сетках. В рамках метода расщепления основной элемент дискретизации моделей процессов по пространственным переменным строится на базе соотношений вида

$$\int_{x_{\alpha-1}}^{x_{\alpha}} (\Lambda_x \varphi - f) \varphi^* dx = \int_{x_{\alpha-1}}^{x_{\alpha}} \Lambda_x^* \varphi \varphi dx - (A_x \varphi, \varphi^*)|_{x_{\alpha-1}}^{x_{\alpha}} - \int_{x_{\alpha-1}}^{x_{\alpha}} f \varphi^* dx, \quad (23)$$

где φ – одна из компонент функции состояния, x – одна из пространственных переменных, Λ_x – часть оператора Λ модели в терминах метода расщепления, действующая в направлении x , $[x_{\alpha-1}, x_{\alpha}]$ – ячейка сеточной области по x , Λ_x^* – оператор, сопряженный по отношению к Λ_x , $(A_x \varphi, \varphi^*)$ – соотношение на границах ячеек по x . Вид оператора A_x определяется структурой оператора Λ_x . Способ дискретизации зависит от способа задания функций φ^* в (23). Мы выбираем их так, чтобы они были решениями локальных сопряженных задач [16]

$$\Lambda_x^* \varphi^* = 0, \quad x_{\alpha-1} \leq x_{\alpha} \leq x, \quad \alpha = \overline{1, M}. \quad (24)$$

Такая процедура построения обеспечивает свойство монотонности и транспортности дискретных аппроксимаций адвективно-диффузионных операторов по пространственным переменным.

Окончательно дискретные аппроксимации моделей и алгоритмы моделирования получаются из условий стационарности функционалов Φ_k^h [7,12]:

- 1) для основных задач и методов прямого моделирования – из условий стационарности к вариациям компонент сопряженной функции φ^* ;
- 2) для сопряженных задач и методов обратного моделирования – из условий стационарности к вариациям компонент функции состояния φ ;
- 3) если в моделях учитываются ошибки, то условия стационарности к вариациям компонент функций ошибок дают систему уравнений для расчета этих ошибок по фактической информации, заложенной в функционалах (11)–(18) через соответствующие функции чувствительности;
- 4) условия стационарности к вариациям параметров модели, включая источники внешних воздействий, приводят к системам уравнений для нахождения этих параметров по фактической информации, учитываемой в функционалах (11)–(18). По существу, это алгоритмы реализации обратных связей от функционалов к параметрам моделей.

Конструктивно эти условия реализуются с помощью производных Гато функционалов (21), (22) относительно всех их функциональных аргументов в дискретном представлении. Выбранный способ дискретизации этих функционалов приводит к тому, что полученные с помощью вариационного принципа дискретные аналоги основных и сопряженных задач 1) и 2) представляют собой взаимно согласованные схемы расщепления.

В сопряженных задачах градиенты функционалов (11)–(13) относительно компонент функции состояния в узлах сеточной области выступают в качестве функций источников при организации процедур усвоения данных дистанционных и контактных наблюдений, а при учете ограничений (18) – в оптимизационных задачах управления и проектирования. Так как функции состояния

входят практически во все слагаемые в (21), (22), то сопряженные задачи по структуре и функциональному содержанию замыкают на себя все внутренние связи между различными элементами системы моделирования, учитываемыми в основном функционале. При этих условиях оценки вариаций целевых функционалов получаются оптимальными в том смысле, что они имеют точность второго порядка малости относительно вариаций $\vec{\varphi}^*$, $\vec{\varphi}^*$, $\vec{\varepsilon}$.

Связи между вариациями $\delta\Phi_k^h(\vec{\varphi})$ и вариациями параметров моделей реализуются посредством функций чувствительности. Их выражения определяются коэффициентами при вариациях соответствующих параметров в основном соотношении чувствительности для $\tilde{\Phi}_k^h(\vec{\varphi})$, записанном с учетом указанных выше трех условий стационарности [7, 12]:

$$\delta\Phi_k^h(\vec{\varphi}) = \frac{\partial}{\partial\xi} I^h(\vec{\varphi}, \vec{\varphi}_k^*, \vec{\varepsilon}, \vec{Y} + \xi, \delta\vec{Y})|_{\xi=0} \equiv \left(\frac{\partial I^h}{\partial\vec{Y}}, \delta\vec{Y} \right), \quad (25)$$

где ξ – вещественный параметр, $\delta\vec{Y}$ – вектор вариаций параметров, $\vec{\varphi}_k^*$ – решение сопряженной задачи из 2), соответствующей функционалу Φ_k^h . Алгоритмы построения основного соотношения и функций чувствительности в задачах рассматриваемого класса описаны в работах [11, 12, 14, 18].

Наиболее эффективные алгоритмы для решения обратных задач получаются в том случае, когда направление зондирования в моделях наблюдений совпадает с координатными линиями в дискретных аналогах моделей процессов, а процедуры усвоения данных организуются на отдельных этапах расщепления. Это наглядно демонстрируют задачи вертикального зондирования атмосферы.

В качестве примера можно привести модификацию алгоритма для определения вертикальных профилей температуры. Предположим, что зондирование производится в надире и направление измерений совпадает с координатными линиями сетки по вертикали. Алгоритм получается с помощью описанного здесь вариационного принципа в комбинации с методом расщепления. Выпишем определяющую систему уравнений, которая следует из условий минимума функционала ошибок относительно температуры на этапе расщепления в направлении вертикальной координаты. Как обычно, на каждом шаге по времени рассматриваются линеаризованные задачи относительно искомых функций состояния или относительно отклонений этих функций от их соответствующих значений с предыдущего момента времени. Окончательно система уравнений имеет структуру

$$\{L_{1z}^* L_{1z}(T) + \sum_q \int_{(\nu)} (M_{qz}^* M_{qz}(T))_{\nu} \chi_q d\nu + \sum_{(\alpha)} \omega_{\alpha} \frac{\partial \Psi_{\alpha}(\vec{\varphi})}{\partial T}\}_{im}^h = 0. \quad (26)$$

Здесь индексом z отмечены операторы моделей процессов и наблюдений по вертикали, учитываемых в (22) и явно содержащих температуру, im – совокупность точек сеточной области по горизонтальным переменным, в которых производится зондирование по вертикали, звездочками отмечены соответствующие сопряженные операторы. Система (26) представляет собой совокупность независимых одномерных задач по вертикали относительно температуры. Эти

задачи решаются методом прямого обращения. Аналогичным образом строятся алгоритмы и для нахождения других компонент функции состояния.

Первое слагаемое в (26) порождается аппроксимацией адвективно-диффузионного оператора в модели процессов. По построению она обладает свойствами монотонности и транспортности, поэтому особых проблем с решением системы (26) не возникает.

Учет ошибок в моделях и введение функционалов меры этих ошибок (14) в функционал (21) расширяет возможности совместного использования моделей и данных наблюдений. В частности, такой подход позволяет с единых позиций в рамках одного и того же вариационного принципа строить как процедуры усвоения данных с использованием сопряженных задач, так и процедуры типа калмановской фильтрации. Заметим, что расчетная схема последних получается формальным исключением из схемы алгоритма 1)–4) сопряженных функций [12]. Но, пожалуй, что важнее всего, так это возможность построения конструктивного алгоритма диагностики качества моделей по фактической информации. Этот алгоритм является следствием условия 3) из отмеченных выше условий стационарности функционала (21).

В последнее время наметилось новое направление применений разрабатываемой нами методики для организации сценариев моделирования с использованием данных Reanalysis NCEP/NCAR [24]. Это задачи, связанные с оценками экологической перспективы при различных вариантах антропогенных воздействий и масштабов взаимодействий в климатической системе типа источник-детектор, детектор-источник. Создаваемая нами для этих целей система моделирования [17] позволяет оперативно восстанавливать пространственно-временную структуру атмосферной циркуляции с заданным разрешением в режиме усвоения данных реанализа. В этом случае базовая модель гидротермодинамики работает как интерполянт.

Вопросы реализации описанной схемы вычислений в разных аспектах обсуждаются в работах [7–18]. Там же приводятся и результаты сценариев моделирования. На этих принципах создается многофункциональный комплекс моделей. Он представляет собой открытую и развиваемую систему моделирования.

Отметим, дополнительно, только некоторые способы повышения эффективности алгоритмов за счет распараллеливания. Функционал (21) построен так, что все модели и все функционалы в нем участвуют на принципах аддитивности. Выбранный нами способ дискретизации с помощью вариационного принципа и метода расщепления обеспечивает конструирование численных моделей для основных и сопряженных задач в виде схем расщепления, взаимно согласованных на всех этапах вычисления через функционалы (21), (22). Как следствие этого возможна многоуровневая схема распараллеливания алгоритмов: а) по совокупности целевых функционалов (11) и функционалов ограничений (18); б) по внутренней структуре расширенного функционала (21). На верхнем системном уровне оценки всех целевых функционалов могут осуществляться параллельно. Следующий уровень – работа с расширенными функционалами (21) для каждого целевого функционала. Каждый этап технологии моделирования, индуцированный отдельными элементами этого функционала, а именно решение прямых и сопряженных задач для каждой модели, расчет функций чувствительности и

т.д., может реализоваться параллельно. Окончательно, на нижнем системном уровне, покоординатное расщепление по пространственным переменным также может быть выстроено в параллельную структуру.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, использование вариационных принципов в задачах экологии и климата обеспечивает внутреннее согласование всех элементов системы моделирования, позволяет сформулировать эффективные способы организации взаимодействий между математическими моделями и фактической информацией и построить замкнутую систему алгоритмов прямого и обратного моделирования. Методы обратного моделирования имеют широкий спектр применений для целей диагностики, проектирования, мониторинга и прогнозирования. Центральное звено в них – решение сопряженных задач для совокупности функционалов различного информационного содержания и целевого назначения и расчет функций чувствительности этих функционалов к вариациям параметров моделей, начальных и граничных условий, источников внешних воздействий и т.д.

ЛИТЕРАТУРА

1. Марчук Г.И. Численные методы в прогнозе погоды. –Л.: Гидрометеиздат, 1967.
2. Марчук Г.И. Численное решение задач динамики атмосферы и океана. –Л.: Гидрометеиздат, 1974.
3. Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. –М.: Наука, 1982.
4. Марчук Г.И. Сопряженные уравнения и анализ сложных систем. –М.: Наука, 1992.
5. Марчук Г.И., Дымников В.П. и др. Математическое моделирование общей циркуляции атмосферы и океана. –Л.: Гидрометеиздат, 1984.
6. Марчук Г.И., Дымников В.П., Залесный В.Б. Математические модели в геофизической гидродинамике и численные методы их реализации. –Л.: Гидрометеиздат, 1987.
7. Пененко В.В. Методы численного моделирования атмосферных процессов. –Л.: Гидрометеиздат, 1981.
8. Пененко В.В., Алоян А.Е. Модели и методы для задач охраны окружающей среды. –Новосибирск: Наука, 1985.
9. Пененко В.В. Численные модели и методы для решения задач экологического прогнозирования и проектирования // Обозрение прикладной и промышленной математики. 1994. Т. 1, №6. С. 917–941.
10. Penenko V.V. Methodology of inverse modeling for the problems of climate changes and environmental protection // Advanced mathematics: computations and applications. 1995. –Novosibirsk: NCC Publisher. P. 358–367.
11. Penenko V.V., Tsvetova E.A. The adjoint problems and sensitivity algorithms for the model of atmospheric hydrodynamics in sigma-coordinates // Bull NCC: Num. Model. in Atmosph. 1995(2). P. 53–74.

12. Penenko V.V. Some aspects of mathematical modelling using the models together with observational data // Bull NCC: Num. Model. in Atmosph. 1996(4). P. 31–52.
13. Пененко В.В., Цветова Е.А., Скубневская Г.И. и др. Численное моделирование химической кинетики и переноса загрязняющих примесей в атмосфере индустриальных регионов // Химия в интересах устойчивого развития. 1997. №5. С. 535–539.
14. Пененко В.В. Теоретические основы совместного использования данных наблюдений и моделей для исследования процессов гидротермодинамики и переноса примесей в атмосфере // Оптика атмосферы и океана. 1999. Т. 12, №5. С. 458–462.
15. Пененко В.В., Цветова Е.А. Математические модели для исследования взаимодействий в системе озеро Байкал – атмосфера региона // ПМТФ. 1999. Т. 40, №2. С. 137–147.
16. Пененко В.В., Цветова Е.А. Моделирование процессов переноса примесей в прямых и обратных задачах климато-экологического мониторинга // Оптика атмосферы и океана. 1999. Т. 12, №6. С. 482–487.
17. Пененко В.В., Цветова Е.А. Подготовка данных для экологических исследований с использованием Reanalysis // Оптика атмосферы и океана. 1999. Т. 12, №5. С. 463–465.
18. Пененко В.В., Цветова Е.А. Об оценке информативности наблюдательных экспериментов // Оптика атмосферы и океана. 2000. Т. 13, №4.
19. Малкевич М.С. Оптические исследования атмосферы со спутников. –М.: Наука, 1973.
20. Кондратьев К.Я., Тимофеев Ю.М. Метеорологическое зондирование атмосферы из космоса. –Л.: Гидрометеиздат, 1978.
21. Зуев Е., Кауль Б.В., Самохвалов И.В. и др. Лазерное зондирование индустриальных аэрозолей. –Новосибирск: Наука, 1986.
22. Наумов А.П., Ошарина Н.Н. Восстановление высотных распределений влажности из измерений нисходящего атмосферного радиоизлучения в микроволновых окнах прозрачности // Изв. АН. ФАО. 1999. Т. 35, №6. С. 762–772.
23. Шварц Л. Анализ. –М.: Мир, 1982.
24. Kalnay E., Kanamitsu M., Kistler R. et al. The NCEP/NCAR 40-year reanalysis project // Bull. Amer. Meteor. Soc. 1996. V. 77. P. 437–471.

Методы расщепления и сопряженных уравнений в задачах динамики океана ¹

А. С. САРКИСЯН, В. Б. ЗАЛЕСНЫЙ

Институт вычислительной математики РАН
E-mail: ocean@inm.ras.ru, zalesny@inm.ras.ru

Рассматриваются вопросы, связанные с применением методов расщепления и сопряженных уравнений к решению задач динамики океана. Особое внимание уделяется выбору формы записи исходной дифференциальной задачи – симметризации уравнений.

Для задачи, сформулированной в σ -системе координат, в двухмерном случае, строится расщепленная система уравнений. Устанавливается закон сохранения полной энергии; производится симметризация уравнений; выделяются простые подсистемы, каждая из которых удовлетворяет закону сохранения.

Рассматривается обобщенная задача о совместном эффекте бароклинности и рельефа дна (СЭБИР). Обсуждается вопрос о выборе формы записи уравнений и регуляризации задачи. Формулируются осредненные по вертикали уравнения в терминах функции тока – плотность. Для оценки чувствительности решения, следуя Г.И. Марчуку, вводится в рассмотрение сопряженная система уравнений. С точки зрения сопряженной задачи делается вывод о существенной роли СЭБИР в механизме формирования изменчивости решения.

ВВЕДЕНИЕ

Основным методом изучения процессов формирования и изменчивости океанской циркуляции является математическое моделирование. Современные модели динамики океана имеют несколько специфических особенностей. Они описываются системами нестационарных нелинейных уравнений, решение которых ищется в многосвязных областях сложной формы. Задачи требуют высокого пространственного разрешения, а некоторые из них – длительного интегрирования по времени до достижения установившегося состояния. Модельное решение

¹Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты №99-05-64920, 98-05-64451).

имеет сложный характер и широкий диапазон изменчивости по пространству и времени; количество данных наблюдений для верификации моделей – мало. В этой связи приобретают особое значение два основных вопроса:

- Как построить эффективную численную модель динамики океана – экономичную в расчетах и устойчивую при $t \rightarrow \infty$?
- Как оценить адекватность решения по отношению к данным наблюдений? Как найти простые характеристики, описывающие поведение решения сложной системы в условиях неточного задания внешних сил и малого количества данных наблюдений?

Среди фундаментальных математических методов, позволяющих преодолеть многие трудности при решении указанных проблем, выделим два: **метод расщепления** и **метод сопряженных уравнений** как основу анализа сложных систем.

Значительная роль в создании и развитии этих методов численного анализа и математического моделирования принадлежит академику Г.И. Марчуку и его ученикам. Ими опубликовано несколько основополагающих работ в данном направлении. Среди работ, связанных с решением задач динамики атмосферы и океана, можно отметить [5], [6], [11], [3], [9], [10], [7], [12], [8].

В нашей работе мы обсудим некоторые вопросы, связанные с применением методов расщепления и сопряженных уравнений к решению задач общей циркуляции океана. Особое внимание при этом мы уделим вопросу, возникающему при численном моделировании динамики океана. Это – вопрос выбора формы записи модельных дифференциальных уравнений, или симметризации уравнений. Он важен как при построении модели на основе метода расщепления, так и при формулировке сопряженной модели.

1. МОДЕЛЬ ОБЩЕЙ ЦИРКУЛЯЦИИ ОКЕАНА НА ОСНОВЕ МЕТОДА РАСЩЕПЛЕНИЯ

1.1. МЕТОД РАСЩЕПЛЕНИЯ КАК МЕТОДОЛОГИЧЕСКАЯ ОСНОВА ПОСТРОЕНИЯ ЧИСЛЕННОЙ МОДЕЛИ СЛОЖНОГО ФИЗИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА

Метод расщепления для решения широкого круга задач математической физики был разработан советскими математиками Е.Г. Дьяконовым [1], Г.И. Марчуком [5], [6], [7], Н.Н. Яненко [17], А.А. Самарским [13] и др. Суть метода состоит в следующем.

Предположим, что имеется следующая нестационарная задача:

$$\begin{cases} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + A\varphi = f, & t \in (0, T], \\ \varphi = g, & t = 0, \end{cases} \quad (1)$$

где A – положительный оператор, который может быть представлен в виде суперпозиции более простых операторов A_i

$$A = A_1 + A_2 + \dots + A_N, \quad A_i \geq 0, \quad \forall i. \quad (2)$$

Для решения (1) применим следующий метод [6]. Сведем решение исходной задачи со сложным оператором A к решению серии задач с более простыми операторами A_i . Например, если $A = A_1 + A_2$, то для того чтобы решить уравнение (1), можно использовать следующую систему двухциклического расщепления [5]:

$$\begin{aligned} (E + \frac{\tau}{2}A_1)\varphi^{j-1/2} &= (E - \frac{\tau}{2}A_1)\varphi^{j-1}, \\ (E + \frac{\tau}{2}A_2)(\varphi^j - \tau f^j) &= (E - \frac{\tau}{2}A_2)\varphi^{j-1/2}, \\ (E + \frac{\tau}{2}A_2)\varphi^{j+1/2} &= (E - \frac{\tau}{2}A_2)(\varphi^j + \tau f^j), \quad j = \overline{1, J-1}, \\ (E + \frac{\tau}{2}A_1)\varphi^{j+1} &= (E - \frac{\tau}{2}A_1)\varphi^{j+1/2}, \quad \varphi^0 = g, \quad \tau = T/J. \end{aligned} \quad (3)$$

Схема (3) абсолютно устойчива и аппроксимирует задачу (1) со 2-м порядком точности при условии $\frac{\tau}{2}\|A_i\| < 1$.

Для решения (1) можно также использовать простую неявную схему расщепления:

$$\begin{aligned} (E + \tau A_1)\varphi^{j+1/2} &= \varphi^j, \\ (E + \tau A_2)\bar{\varphi}^{j+1} &= \varphi^{j+1/2}, \\ \varphi^{j+1} &= \bar{\varphi}^{j+1} + \tau f^j \end{aligned} \quad (4)$$

Схема (4) абсолютно устойчива и аппроксимирует (1) с первым порядком точности по времени. Она более экономична, чем (3), но менее точна по времени.

Отметим следующие характерные особенности метода расщепления.

1. Процесс решения исходной задачи сводится к решению серии отдельных задач более простой структуры. Реализация метода расщепления присущ модульный принцип: отдельная задача – отдельный модуль. Каждый модуль может иметь свой ”сопряженный аналог”.

2. Схемы расщепления, основанные на неявной аппроксимации, например такой, как (3), безусловно устойчивы. Это дает возможность проводить интегрирование прямой и сопряженной задачи на больших интервалах по времени.

3. Каждый модуль может иметь аппроксимацию разного типа и точности. Например, можно комбинировать схемы конечных разностей и конечных элементов; аппроксимировать отдельные задачи с повышенным порядком точности и т.д.

Отметим, что метод расщепления определен для решения систем уравнений с положительными операторами. Данное свойство должно быть априори установлено для сформулированной задачи. Часто это выражается в нахождении некоторого интегрального инварианта или закона сохранения.

Важнейшим моментом формулировки алгоритма расщепления является разбиение исходной задачи на сумму простых подзадач с положительными операторами. В некоторых случаях выбор такого разбиения является нетривиальным и неединственным.

С методологической точки зрения метод расщепления можно рассматривать более широко, формулируя на его основе численную модель сложного физического процесса. Можно обогатить исходную модель за счет включения дополнительных этапов расщепления в цепочку (3). Можно изменить исходную модель. Например, после расщепления задачи на цепочку подзадач, можно изменить (упростить или регуляризовать) задачу на отдельном этапе. Рассмотрим вопрос о применении метода расщепления для построения модели динамики океана, записанной в σ -системе координат.

1.2. МОДЕЛЬ ОБЩЕЙ ЦИРКУЛЯЦИИ ОКЕАНА В σ -СИСТЕМЕ КООРДИНАТ. ЗАКОН СОХРАНЕНИЯ

При формулировке задачи динамики океана в системе координат, следующей изолиниям рельефа дна, часто возникают проблемы с построением эффективного вычислительного алгоритма. Это связано с появлением дополнительных слагаемых в уравнениях, т.е. усложнением вида дифференциального оператора задачи. Однако данная система координат во многих случаях более удобна с физической точки зрения. Главное ее достоинство состоит в адекватном воспроизведении динамики над сложным рельефом дна. Она позволяет моделировать режимы маловязкостного обтекания рельефа, конвекции над наклонным дном; хорошо разрешать структуру придонного слоя.

Проблему построения эффективно реализуемой модели динамики океана в σ -системе координат можно решить в рамках метода расщепления. Существенным элементом построения такой модели является выбор формы записи исходных уравнений. Для простоты ограничимся двумерной постановкой задачи в плоскости (x, z) . Имеем

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} - lv + \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial x_r} &= \frac{\partial}{\partial z_r} \nu_u \frac{\partial u}{\partial z_r}, \\ \frac{\partial v}{\partial t} + lu &= \frac{\partial}{\partial z_r} \nu_u \frac{\partial v}{\partial z_r}, \\ \frac{\partial p}{\partial z_r} &= g\rho, \\ \frac{\partial u}{\partial x_r} + \frac{\partial w_r}{\partial z_r} &= 0, \\ \frac{d\rho}{dt} &= \frac{\partial}{\partial z_r} \nu \frac{\partial \rho}{\partial z_r} + \frac{\partial}{\partial x_r} \mu \frac{\partial \rho}{\partial x_r}, \end{aligned} \tag{5}$$

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x_r} + w_r \frac{\partial}{\partial z_r}.$$

Здесь u, v, w_r, p, ρ – три компоненты скорости, давление и плотность морской воды. Решение (5) – вектор-функция с компонентами u, v, w_r, p, ρ , определено в замкнутой области D . Область D имеет кусочно-гладкую границу ∂D , состоящую из невозмущенной поверхности $z_r = 0$, боковых отрезков $x_r = 0, x_r = L$ и рельефа дна $z_r = H(x_r) \geq H_0 > 0$. Граничными условиями для (5) являются следующие:

$$\begin{aligned} u = 0, \quad \mu \frac{\partial \rho}{\partial x_r} = 0, \quad \text{при } x_r = 0 \quad x_r = L; \\ w_r = 0, \quad \nu_u \frac{\partial u}{\partial z_r} = -\tau_1 / \rho_0, \quad \nu_v \frac{\partial v}{\partial z_r} = -\tau_2 / \rho_0, \quad \nu \frac{\partial \rho}{\partial z_r} = Q \quad \text{при } z_r = 0; \quad (6) \\ w_r = u \frac{\partial H}{\partial x_r} \quad \nu_u \frac{\partial u}{\partial z_r} = 0, \quad \nu_v \frac{\partial v}{\partial z_r} = 0, \quad \nu \frac{\partial \rho}{\partial n} = 0 \text{ при } z_r = H(x_r), \end{aligned}$$

n – нормаль к $H(x_r)$.

Задача (5)–(6) записана в "реальной" системе координат (x_r, z_r) , в которой вертикальная координата изменяется от невозмущенной поверхности океана до дна. Преобразуем систему переменных (x_r, z_r) и введем новые координаты (x, z) следующим образом [16]: $x = x_r, \quad z = z_r / H(x_r)$. При этом область $D(x_r)$ с нижней криволинейной границей преобразуется в прямоугольную область $D(x)$. В новой системе координат задача (5)–(6) примет вид:

$$\begin{aligned} H \frac{\partial u}{\partial t} - Hlv + \frac{H}{\rho_0} \left(\frac{\partial p}{\partial x} - gH_x z \rho \right) &= \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial z} \nu_u \frac{\partial u}{\partial z}, \\ H \frac{\partial v}{\partial t} + Hlu &= \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial z} \nu_u \frac{\partial v}{\partial z}, \\ \frac{\partial p}{\partial z} &= gH\rho, \\ \frac{\partial u H}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial z} &= 0, \\ H \frac{\partial \rho}{\partial t} + uH \frac{\partial \rho}{\partial x} + w \frac{\partial \rho}{\partial z} &= \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial z} \nu \frac{\partial \rho}{\partial z} + \\ + \left[\frac{\partial}{\partial x} \mu H \frac{\partial \rho}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \mu H_x z \frac{\partial \rho}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} \mu H_x z \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} \mu \frac{(H_x)^2}{H} z^2 \frac{\partial \rho}{\partial z} \right]. \end{aligned} \quad (7)$$

Граничные условия запишутся в виде

$$\begin{aligned} u = 0, \quad \mu \frac{\partial \rho}{\partial x} - \frac{H_x}{H} z \frac{\partial \rho}{\partial z} = 0, \quad \text{при } x = 0 \quad x = L \\ w = 0, \quad \frac{\nu_u}{H} \frac{\partial u}{\partial z} = -\tau_1 / \rho_0, \quad \frac{\nu_v}{H} \frac{\partial v}{\partial z} = -\tau_2 / \rho_0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\nu}{H} \frac{\partial \rho}{\partial z} = Q \quad \text{при } z = 0 \\
& w = 0, \quad \frac{\nu_u}{H} \frac{\partial u}{\partial z} = 0, \quad \frac{\nu_v}{H} \frac{\partial v}{\partial z} = 0, \\
& \frac{\nu}{H} \frac{\partial \rho}{\partial z} - \mu H_x \frac{\partial \rho}{\partial x} + \mu \frac{(H_x)^2}{H} \frac{\partial \rho}{\partial z} = 0 \quad \text{при } z = 1.
\end{aligned} \tag{8}$$

Здесь

$$\begin{aligned}
& w = w_r + H_x z u \\
& \frac{\partial}{\partial x_r} = \frac{\partial}{\partial x} - \frac{H_x}{H} z \frac{\partial}{\partial z}, \\
& \frac{\partial}{\partial z_r} = \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial z}
\end{aligned} \tag{9}$$

Покажем, что для задачи (7)–(8) выполняется закон сохранения полной энергии. Умножим уравнения (7) соответственно на $\rho_0 u$, $\rho_0 v$, w , p , $-gzH$, проинтегрируем по всей области D и сложим все уравнения. Предполагая, что источники отсутствуют, т.е. $\tau_1 = \tau_2 = Q = 0$, получим

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_D [\rho_0 H \frac{u^2 + v^2}{2} - gzH^2 \rho] dD = - \int_D \frac{\rho_0}{H} [\nu_u ((u_z)^2 + (v_z)^2) - gH\nu \frac{\rho_z}{\rho_0}] dD. \tag{10}$$

Полученное соотношение можно переписать в следующем виде:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_D [\rho_0 H \frac{u^2 + v^2}{2} - gzH^2 \rho] dD = - \int_D \frac{\rho_0}{H} [(u_z)^2 + (v_z)^2] \nu \left(\frac{\nu_u}{\nu} - Ri \right) dD, \tag{11}$$

где Ri – число Ричардсона в σ -системе координат:

$$Ri = \frac{gH}{\rho_0} \frac{\rho_z}{(u_z)^2 + (v_z)^2}. \tag{12}$$

Из (11) следует, что при выполнении условия

$$Ri \leq \frac{\nu_u}{\nu}, \quad (\nu \geq 0, \quad \nu_u \geq 0), \tag{13}$$

полная энергия системы с течением времени **не возрастает**.

Если предположить, что диссипация и диффузия по вертикали отсутствуют, т.е. положить $\nu_u = \nu = 0$, то из (10) следует закон сохранения

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_D [\rho_0 H \frac{u^2 + v^2}{2} - gzH^2 \rho] dD = 0. \tag{14}$$

Замечание 1.1. Слагаемые, описывающие горизонтальную диффузию плотности, – группа в квадратных скобках в последнем уравнении (7) – при выводе формулы (10) исчезают. Это означает, что оператор горизонтальной диффузии плотности является в данном случае энергетически нейтральным. Это свойство должно выполняться и при численной аппроксимации задачи (7)–(8).

Замечание 1.2. В правой системе координат (right-handed system) (x, \bar{z}) , $\bar{z} = -z$, закон сохранения (14) принимает вид

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_D \rho_0 H \left[\frac{u^2 + v^2}{2} + g\bar{z}H \frac{(\sqrt{\rho})^2}{\rho_0} \right] dD = 0. \quad (15)$$

Замечание 1.3. Полная энергия системы не возрастает, если выбрать (при $Ri \geq 0$) коэффициент вертикальной турбулентной вязкости в виде

$$\nu_u = \nu Ri + \epsilon, \quad \epsilon \geq 0.$$

1.3. СИММЕТРИЗАЦИЯ ЗАДАЧИ

Потребуем, чтобы для дискретной аппроксимации задачи (7)–(8) выполнялись дискретные аналоги интегральных соотношений (10), (14) и свойство энергетической нейтральности оператора горизонтальной диффузии. Выполнение этих свойств потребуем для каждого оператора **на каждом этапе расщепления**.

Наиболее просто добиться выполнения указанных свойств, если перед тем, как аппроксимировать задачу по пространственным переменным, преобразовать уравнения к **симметризованной форме**. Смысл преобразования состоит в том, чтобы найти удобную форму записи уравнений, удовлетворяющую следующим условиям:

- из формы записи естественным образом следует разложение оператора задачи на сумму простых положительных операторов;
- из формы записи просто следует разностная аппроксимация, сохраняющая основные свойства, присущие исходным дифференциальным операторам (симметрии, кососимметрии, положительности);
- симметризованная форма дает близкую к исходной форму сопряженного оператора.

Простейший пример такого рода симметризации можно привести для уравнения переноса субстанции φ , в бездивергентном поле течений в плоскости (x, y) , т.е. при

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0.$$

Известны три основные формы записи уравнения переноса:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + u \frac{\partial \varphi}{\partial x} + v \frac{\partial \varphi}{\partial y} = 0, \quad (16)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial u \varphi}{\partial x} + \frac{\partial v \varphi}{\partial y} = 0, \quad (17)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{1}{2} \left[u \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{\partial u \varphi}{\partial x} \right] + \frac{1}{2} \left[v \frac{\partial \varphi}{\partial y} + \frac{\partial v \varphi}{\partial y} \right] = 0. \quad (18)$$

Сформулированным выше требованиям в данном случае будет удовлетворять третья, последняя форма записи – полудивергентная. Действительно:

- в квадратных скобках – разложение оператора задачи на сумму двух простых неотрицательных операторов переноса по координатам x, y ;
- форма допускает простую разностную аппроксимацию, которая сохраняет свойства кососимметрии для каждого исходного дифференциального оператора переноса по координатам x и y [6];
- оператор сопряженного уравнения совпадает с исходным.

Следуя этому простому примеру, преобразуем задачу (7)–(8) по следующей схеме:

- выберем полудивергентную форму записи уравнения переноса-диффузии плотности;
- представим дифференциальный оператор переноса-диффузии плотности в виде декомпозиции четырех простейших операторов: переноса плотности вдоль оси x , переноса плотности вдоль оси z , диффузии плотности с коэффициентом ν по оси z , диффузии плотности с коэффициентом μ по оси в плоскости (x, z) ;
- преобразуем первые три уравнения (7) в соответствии с выбором формы записи уравнения переноса-диффузии плотности. Выделенным ранее операторам переноса плотности по координатам x и z поставим в соответствие их кососимметрические аналоги (в смысле энергетических соотношений (10), (14)).

После простых преобразований, с учетом того что $\rho \geq \rho_0 > 0$, система (7) примет вид

$$H \frac{\partial u}{\partial t} - Hlv + \frac{H}{\rho_0} \left[\frac{\partial}{\partial x} (p - \frac{1}{2} gHz\rho) \right] + \frac{H}{2\rho_0} g [(Hz)\rho_x - (Hz)_x\rho] = \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial z} \nu_u \frac{\partial u}{\partial z},$$

$$H \frac{\partial v}{\partial t} + Hlu = \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial z} \nu_u \frac{\partial v}{\partial z},$$

$$\frac{\partial}{\partial z} (p - \frac{1}{2} gHz\rho) + \frac{1}{2} g [(Hz)\rho_z - (Hz)_z\rho] = 0,$$

$$\frac{\partial uH}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0,$$

$$\begin{aligned} H \frac{\partial \sqrt{\rho}}{\partial t} + \frac{1}{2} [uH(\sqrt{\rho})_x + \frac{1}{2\sqrt{\rho}} (uH\rho)_x] + \frac{1}{2} [w(\sqrt{\rho})_z + \frac{1}{2\sqrt{\rho}} (w\rho)_z] = \\ = \frac{1}{H\sqrt{\rho}} \frac{\partial}{\partial z} \nu \sqrt{\rho} \frac{\partial \sqrt{\rho}}{\partial z} + \frac{1}{\sqrt{\rho}} \left[\frac{\partial}{\partial x} \mu H \sqrt{\rho} \frac{\partial \sqrt{\rho}}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \mu (Hz)_x \sqrt{\rho} \frac{\partial \sqrt{\rho}}{\partial z} \right. \\ \left. - \frac{\partial}{\partial z} \mu (Hz)_x \sqrt{\rho} \frac{\partial \sqrt{\rho}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} \mu \frac{((Hz)_x)^2}{H} \sqrt{\rho} \frac{\partial \sqrt{\rho}}{\partial z} \right] \end{aligned} \quad (19)$$

Замечание 1.4. Уравнение для плотности (19) выписано в терминах функции $\sqrt{\rho}$. Для получения интегральных соотношений (10), (11), (14) в данном случае последнее уравнение (19) следует умножить на $(-gHz\sqrt{\rho})$. Эта форма уравнения для плотности удобна при построения сопряженного аналога системы (19).

1.4. РАСЩЕПЛЕНИЕ УРАВНЕНИЙ НА ПРОСТЫЕ ПОДСИСТЕМЫ

В системе (19) можно выделить несколько подсистем энергетически согласованных с точки зрения (10). Каждая подсистема имеет ясный физический смысл, описывая простой физический процесс. Каждая подсистема может рассматриваться как отдельный этап расщепления полной задачи. В качестве первой подсистемы выделим уравнения, описывающие процесс инерционных колебаний

$$\begin{aligned} H \frac{\partial u}{\partial t} - Hlv &= 0, \\ H \frac{\partial v}{\partial t} + Hlu &= 0. \end{aligned} \quad (20)$$

Вторая подсистема описывает вертикальную турбулентную диссипацию и диффузию

$$\begin{aligned}
H \frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial z} \nu_u \frac{\partial u}{\partial z}, \\
H \frac{\partial v}{\partial t} &= \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial z} \nu_u \frac{\partial v}{\partial z}, \\
H \frac{\partial \sqrt{\rho}}{\partial t} &= \frac{1}{H \sqrt{\rho}} \frac{\partial}{\partial z} \nu \sqrt{\rho} \frac{\partial \sqrt{\rho}}{\partial z}.
\end{aligned} \tag{21}$$

Третья подсистема описывает адаптацию гидрологических полей

$$\begin{aligned}
H \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{H}{\rho_0} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x} &= 0, \\
\frac{\partial \bar{p}}{\partial z} + \frac{1}{2} g [(Hz) \rho_z - (Hz)_z \rho] &= 0, \\
\frac{\partial u H}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial z} &= 0,
\end{aligned}$$

$$H \frac{\partial \sqrt{\rho}}{\partial t} + \frac{1}{2} [w(\sqrt{\rho})_z + \frac{1}{2\sqrt{\rho}} (w\rho)_z] = 0, \tag{22}$$

где $\bar{p} = p - \frac{1}{2} g H z \rho$.

Четвертая подсистема описывает нелинейный перенос вдоль оси x

$$\begin{aligned}
H \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{H}{2\rho_0} g [(Hz) \rho_x - (Hz)_x \rho] &= 0, \\
H \frac{\partial \sqrt{\rho}}{\partial t} + \frac{1}{2} [u H (\sqrt{\rho})_x + \frac{1}{2\sqrt{\rho}} (u H \rho)_x] &= 0.
\end{aligned} \tag{23}$$

Пятая подсистема описывает горизонтальную диффузию плотности в σ -системе координат

$$\begin{aligned}
H \frac{\partial \sqrt{\rho}}{\partial t} &= \frac{1}{\sqrt{\rho}} \left[\frac{\partial}{\partial x} \mu H \sqrt{\rho} \frac{\partial \sqrt{\rho}}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \mu (Hz)_x \sqrt{\rho} \frac{\partial \sqrt{\rho}}{\partial z} \right. \\
&\quad \left. - \frac{\partial}{\partial z} \mu (Hz)_x \sqrt{\rho} \frac{\partial \sqrt{\rho}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} \mu \frac{((Hz)_x)^2}{H} \sqrt{\rho} \frac{\partial \sqrt{\rho}}{\partial z} \right].
\end{aligned} \tag{24}$$

Совокупность систем (20)–(24) может служить основой метода расщепления вида (3) для полной системы (19) при $A = \Sigma_{i=1}^5 A_i$ на интервале $t_{j-1} \geq t \leq t_{j+1}$, или (4) – на интервале $t_j \geq t \leq t_{j+1}$. В этом случае следует добавить уравнения

$$H \frac{\partial u}{\partial t} = 0, \quad H \frac{\partial v}{\partial t} = 0, \quad H \frac{\partial \sqrt{\rho}}{\partial t} = 0$$

к тем подсистемам, где отсутствуют соответствующие эволюционные уравнения.

Замечание 1.5. Первые два этапа (20)–(21) можно объединить в один.

Замечание 1.6. Систему уравнений (23) можно расщепить еще на два этапа:

$$\begin{aligned} H \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{H}{2\rho_0} g H z \rho_x &= 0, \\ 2H \frac{\partial \sqrt{\rho}}{\partial t} + u H (\sqrt{\rho})_x &= 0 \end{aligned} \quad (25)$$

и

$$\begin{aligned} H \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{H}{2\rho_0} g (H z)_x \rho &= 0, \\ 2H \frac{\partial \sqrt{\rho}}{\partial t} + \frac{1}{2\sqrt{\rho}} (u H \rho)_x &= 0. \end{aligned} \quad (26)$$

Замечание 1.7. Любой из этапов (25), (26) можно из модели исключить. Это будет означать, что каждый раз функция \bar{p} и система (22) будут иметь разный вид. В силу уравнения неразрывности, допустимы четыре варианта выбора модели. Модель может содержать: уравнения (23); уравнения (25); уравнения (26); уравнения (25)–(26).

2. СРЕДНЯЯ ПО ГЛУБИНЕ ЦИРКУЛЯЦИЯ ОКЕАНА. ОБОВЩЕННАЯ ЗАДАЧА СЭБИР

2.1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим задачу о взаимодействии средних по глубине полей течений и плотности. В отличие от предыдущей, данная задача рассматривается в плоскости (x, y) . Осредненные по глубине уравнения динамики океана имеют вид [18]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} - l \bar{v} + \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x} &= -R \bar{u} + \frac{g}{\rho_0} \bar{\rho} H_x + f_1, \\ \frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + l \bar{u} + \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \bar{p}}{\partial y} &= -R \bar{v} + \frac{g}{\rho_0} \bar{\rho} H_y + f_2, \\ \frac{\partial \bar{u} H}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v} H}{\partial y} &= 0, \end{aligned} \quad (27)$$

$$H \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + (\bar{u} H \bar{\rho})_x + (\bar{v} H \bar{\rho})_y = -\frac{\nu}{H} (\rho_H - \rho_s). \quad (28)$$

Здесь

$$\bar{u} = \int_0^1 u dz, \quad \bar{v} = \int_0^1 v dz, \quad \bar{\rho} = \int_0^1 z \rho dz, \quad (29)$$

R – коэффициент придонного трения; f_1, f_2 – заданные внешние силы, зависящие от ветра; ρ_H, ρ_s – заданные значения плотности на дне и на поверхности.

Замечание 2.1. Система (27)–(28) может быть получена из трехмерной задачи типа (7), записанной в σ -системе координат (x, y, z) , $x = x_r, y = y_r, z = z_r/H(x_r, y_r)$. При этом положено $\mu = 0$ и учтен эффект трения о дно.

Уравнения (27)–(28) рассматриваются в области D_0 , с гладкой границей ∂D_0 . Граничные условия для (27)–(28) имеют вид

$$(\bar{u}, \eta) = 0, \quad (30)$$

где \bar{u} – вектор с компонентами \bar{u}, \bar{v} , а η – нормаль к ∂D_0 .

Задача (27)–(30) выписана в исходных переменных – в терминах $\bar{u}, \bar{v}, \bar{p}, \bar{\rho}$. Ее можно представить также в других формах, например в виде давление – плотность; функция тока – плотность.

Легко видеть, что если в (27)–(28) положить $H = \text{const}$, либо $\rho = \text{const}$, то нелинейная задача распадается на две линейные. Первой задачей будет задача баротропной циркуляции океана, включающая уравнения для $\bar{u}, \bar{v}, \bar{p}$. Вторая задача будет описывать перенос плотности вдоль заданных траекторий. Траектории определяются из решения первой задачи и **не зависят** от поля плотности.

Впервые, в несколько иной постановке, подобная задача была поставлена и изучена в работах А.С. Саркисяна с соавторами (см. например [16], [14], [15]). Авторы отметили важное свойство задачи – взаимную нелинейную зависимость полей течений, давления и плотности, которая возникает при наличии градиентов рельефа дна и плотности. Этому эффекту они дали название СЭБИР (совместный эффект бароклинности и рельефа).

По аналогии с введенной терминологией назовем (27)–(30) обобщенной задачей СЭБИР. Термин ”обобщенная” подчеркивает тот факт, что вместе с (27) рассматривается также уравнение для плотности специального вида (28).

В литературе было достаточно много дискуссий по поводу выбора постановок подобных задач и методов их численного решения. Здесь возникает несколько интересных вопросов, среди которых можно выделить следующие.

- Задача (27)–(30) – вырождена. Как ее регуляризовать для улучшения свойств и построения эффективных алгоритмов ее решения?
- В какой форме наиболее удобно формулировать уравнения (27)?
- Как оценить чувствительность решения задачи по отношению к изменению внешних и внутренних параметров? Как выбрать информативный функционал, характеризующий чувствительность решения?

- В чем состоит СЭБИР с точки зрения оценки чувствительности решения с помощью сопряженной задачи?

Первые два вопроса ранее изучались в различных работах, и ниже будут отмечены некоторые полученные здесь результаты. Последние два вопроса – достаточно новые. Мы их кратко прокомментируем на основе нашего опыта решения подобных задач.

2.2. РЕГУЛЯРИЗАЦИЯ ЗАДАЧИ

- Возможным приемом регуляризации задачи (27) является добавление к правым частям всех уравнений слагаемых, описывающих горизонтальную вязкость с малыми коэффициентами $\mu_1 > 0$, $\mu_2 \geq 0$:

$$\mu_1 H \Delta \bar{u}, \quad \mu_1 H \Delta \bar{v}, \quad \mu_2 H \Delta \bar{p}. \quad (31)$$

При этом требуется переформулировка граничных условий для \bar{u} , \bar{v} и, если $\mu_2 \neq 0$, то постановка условий для \bar{p} .

- Одним их эффективных методов регуляризации задачи является метод искусственной сжимаемости, предложенный Н.Н.Яненко для решения уравнений вязкой несжимаемой жидкости [17]. В линейном случае суть метода состоит в замене уравнения неразрывности нестационарным уравнением

$$\epsilon \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u} H}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v} H}{\partial y} = 0, \quad (32)$$

где $\epsilon > 0$ – достаточно мало.

- Для решения стационарной задачи Стокса Г.М. Кобельков [2] предложил регуляризацию, существенно повышающую эффективность вычислительного алгоритма. Смысл регуляризации близок к регуляризации Н.Н. Яненко. В предположении $\bar{\rho} = \text{const}$, $H = \text{const}$, $l = 0$ метод сводится к решению следующих уравнений:

$$\begin{aligned} C_1 \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial x} &= \mu \Delta u + \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + f_1, \\ C_2 \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial y} &= \mu \Delta v + \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + f_2, \\ \tau \beta \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} &= 0. \end{aligned} \quad (33)$$

Здесь операторы C_1 , C_2 и параметры τ , β выбираются некоторым специальным образом [2].

Замечание 2.2. Упомянутые методы регуляризации можно рассматривать также с физической точки зрения.

– Первая регуляризация (при $\mu_2 = 0$) означает введение в модель эффекта турбулентной вязкости.

– Уравнение неразрывности в виде (32) может быть выбрано исходя из физической постановки задачи. Это будет иметь место, если в исходной постановке задачи в качестве граничного условия на поверхности вместо условия твердой крышки $w = 0$ использовать условие $w = -\frac{1}{g\rho_0} \frac{\partial \bar{p}}{\partial t}$.

2.3. ВЫБОР ФОРМЫ ЗАПИСИ УРАВНЕНИЙ

При решении задач циркуляции океана и подобных задач динамики несжимаемой жидкости используются различные формы записи уравнений (27). Это – исходная формулировка уравнений в терминах скорость – давление; постановка в терминах функции тока; в терминах давления или уровенной поверхности; в терминах вихрь – функция тока. Запись уравнений в терминах функции тока имеет вид

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} + R\right) \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{H} \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{1}{H} \frac{\partial \phi}{\partial y}\right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{l}{H} \frac{\partial \phi}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{l}{H} \frac{\partial \phi}{\partial x}\right) \\ = \frac{g}{\rho_0} \left(\frac{\partial \bar{p}}{\partial y} \frac{\partial H}{\partial x} - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x} \frac{\partial H}{\partial y}\right) + \frac{\partial f_1}{\partial y} - \frac{\partial f_2}{\partial x}, \end{aligned} \quad (34)$$

$$H \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial \phi}{\partial y} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x} - \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial \bar{p}}{\partial y} = -\frac{\nu}{H} (\rho_H - \rho_0), \quad (35)$$

$$\bar{u}H = \frac{\partial \phi}{\partial y}, \bar{v}H = -\frac{\partial \phi}{\partial x}. \quad (36)$$

В качестве граничных условий для односвязной области D_0 имеем

$$\phi = 0 \quad \text{на } \partial D_0. \quad (37)$$

Формулировку в терминах давления можно получить, выражая из первых двух уравнений (27) \bar{u} , \bar{v} и подставляя их в уравнение неразрывности. В этом случае граничные условия (30) переходят в условия Пуанкаре (условия наклонной производной) для давления. Численный алгоритм решения задачи Пуанкаре предложен в работе Г.И. Марчука [4].

В настоящее время имеется несколько эффективных алгоритмов решения уравнений плоской циркуляции (при заданном поле плотности) для различных форм записи уравнений. Выбор формы записи часто определяется не эффективностью алгоритма, а практическими условиями. Например, для односвязных областей D_0 удобнее ставить задачу в терминах функции тока. Для сравнения результатов расчета с измерениями – в терминах давления. Давление пропорционально уровню океана, который измеряется на береговых станциях и со спутников. Для сложных условий: сложной формы D_0 и рельефа дна $H(x, y)$ –

целесообразнее использовать уравнения в терминах скорость – давление с регуляризацией. С теоретической точки зрения удобной является постановка задачи в терминах функция тока – плотность, которая и рассматривается ниже.

2.4. ОЦЕНКА ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ РЕШЕНИЯ.

СЭБИР с точки зрения решения сопряженной задачи

Одной из интересных задач океанологии является задача расчета и анализа равновесных режимов океана. Численные эксперименты с моделью общей циркуляции Мирового океана показывают существование нескольких равновесных режимов при идентичном внешнем воздействии [19]. Если сравнить, например, два квазиравновесных решения, полученных при двух разных начальных условиях, то можно отметить следующее.

- Через несколько тысяч лет модельного времени расчета трехмерной бароклинной модели глобальной циркуляции устанавливается квазиравновесное состояние. Равновесное состояние зависит от начального условия и сопровождается наличием автоколебаний по времени с периодами от нескольких лет до сотен лет.
- В верхнем слое океана, глубиной около 100–400 м, разница между двумя решениями локализована в нескольких подобластях. Их можно определить как энергоактивные зоны океана (ЭАЗО). Они связаны с зонами глубокой конвекции и областями сильной изменчивости внешних сил на поверхности океана, в частности солёности. Отметим, что проблема изучения ключевой роли ЭАЗО в динамике океана и климатической изменчивости была поставлена и изучена в программе "Разрезы", проводившейся в СССР под научным руководством Г.И. Марчука в 80-е годы.
- В слое термоклина и в глубоком океане (от 400–800 м и ниже) разница между решениями в полях плотности, температуры и солёности приобретает глобальный характер.
- Различные равновесные режимы заметно отличаются друг от друга средними по глубине течениями или функциями тока.
- Одной из наиболее ярких характеристик, определяющих характер и изменчивость по времени двух решений, является расход Антарктического кругового течения (АКТ).

Расход АКТ может служить объективной характеристикой поведения решений. Это дает основание, следуя Г.И. Марчуку [8], сформулировать задачу оценки чувствительности решения на основе теории сопряженных уравнений в следующем виде

- Оценить чувствительность функционала J от решения задачи динамики океана, где

$$J = (\phi, \eta) \equiv \int_{D_0} \phi \eta dD_0. \quad (38)$$

Здесь η – характеристическая функция, равная единице на контуре L_0 и нулю в остальной области D_0 , L_0 – замкнутый контур обхода Антарктиды, например круг широты 60° .

Функционал (38) можно переписать в виде

$$J = \int_{L_0} \phi dL_0. \quad (39)$$

Для оценки вариаций J , согласно [8], наряду с основной рассмотрим сопряженную систему. Выбирая удобную форму записи уравнений (34)–(35), имеем

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} + R\right) \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{H} \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{1}{H} \frac{\partial \phi}{\partial y}\right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{l}{H} \frac{\partial \phi}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{l}{H} \frac{\partial \phi}{\partial x}\right) \\ - 2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho \frac{\partial \rho}{\partial y} H\right) + 2 \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho \frac{\partial \rho}{\partial x} H\right) = \frac{\partial f_1}{\partial x} - \frac{\partial f_2}{\partial y}, \end{aligned} \quad (40)$$

$$H^2 \frac{\partial \rho}{\partial t} + H \frac{\partial \phi}{\partial y} \frac{\partial \rho}{\partial x} - H \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial \rho}{\partial y} = f_3, \quad (41)$$

$$\begin{aligned} - \left(\frac{\partial}{\partial t} - R\right) \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{H} \frac{\partial \phi^*}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{1}{H} \frac{\partial \phi^*}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{l}{H} \frac{\partial \phi^*}{\partial y}\right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{l}{H} \frac{\partial \phi^*}{\partial x}\right) \\ + 2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho^* \frac{\partial \rho}{\partial y} H\right) - 2 \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho^* \frac{\partial \rho}{\partial x} H\right) = \eta, \end{aligned} \quad (42)$$

$$\begin{aligned} - H^2 \frac{\partial \rho^*}{\partial t} - H \frac{\partial \phi}{\partial y} \frac{\partial \rho^*}{\partial x} + H \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial \rho^*}{\partial y} + \\ + \left(\frac{\partial H}{\partial y} \frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{\partial H}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial y}\right) \rho^* - \underbrace{\left(\frac{\partial H}{\partial y} \frac{\partial \phi^*}{\partial x} - \frac{\partial H}{\partial x} \frac{\partial \phi^*}{\partial y}\right) \rho}_{\text{СЭБИР}} = 0. \end{aligned} \quad (43)$$

Здесь

$$\rho = \sqrt{\frac{g}{\rho_0}} \bar{\rho}, \quad f_3 = -\frac{g\nu}{2\rho_0} \frac{\rho_H - \rho_0}{\sqrt{\frac{g\bar{\rho}}{\rho_0}}}, \quad (44)$$

f_1, f_2, f_3 – предполагаются заданными.

Сопряженные уравнения для ϕ^*, ρ^* получены из прямых уравнений для ϕ, ρ в результате стандартной процедуры. Она состоит в скалярном умножении уравнений (40)–(41) на $\phi^*/2, \rho^*$ и их варьирования по ϕ, ρ . Для простоты

предположим, что область D_0 – полоса, ограниченная двумя кругами широты L_1, L_2 , где L_2 – контур Антарктиды, на котором $H = \text{const}$. Тогда граничными условиями для ϕ, ϕ^* будут

$$\begin{aligned} \phi &= 0, & \phi^* &= 0 & \text{на } L_1, \\ \phi &= C, & \phi^* &= 1 & \text{на } L_2. \end{aligned} \quad (45)$$

Постоянная C определяется следующим образом:

$$C = \frac{\int_{L_2} [f_1 - (\frac{\partial}{\partial t} + R) \frac{1}{H} \frac{\partial \phi^0}{\partial y}] dx}{\int_{L_2} (\frac{\partial}{\partial t} + R) \frac{1}{H} \frac{\partial \phi^1}{\partial y} dx}, \quad (46)$$

где $\phi = \phi^0 + C\phi^1$, ϕ^0 – решение неоднородного уравнения (40) с правой частью и нулевыми условиями Дирихле на контурах L_1, L_2 ; ϕ^1 – решение задачи с нулевой правой частью и условием $\phi^1 = 1$ на контуре L_2 .

Из формулы (46) видно, что вариация δC связана с вариацией функционала $J(\phi^0)$.

Умножим скалярно уравнения (40)–(43) соответственно на $\phi^*/2$, $\rho^* - \phi/2$, $-\rho$ и сложим. После преобразований получим

$$J = \left(\rho(H_x \rho_y - H_y \rho_x) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial f_1}{\partial x} - \frac{\partial f_2}{\partial y} \right), \phi^* \right) + (H(\rho_x \phi_y - \rho_y \phi_x) - f_3, \rho^*). \quad (47)$$

Прокомментируем полученные выражения с точки зрения чувствительности решения обобщенной задачи СЭБИР. Из уравнения (43) видно, что действие СЭБИР выражается последним слагаемым

$$\left(\frac{\partial H}{\partial y} \frac{\partial \phi^*}{\partial x} - \frac{\partial H}{\partial x} \frac{\partial \phi^*}{\partial y} \right) \rho. \quad (48)$$

Если СЭБИР отсутствует, то из (43) получим

$$\rho^* = 0 \quad (49)$$

и чувствительность функционала δJ по отношению к вариациям f_1, f_2 определяется функцией ϕ^* . Последняя может быть вычислена априори как решение сопряженной задачи для функции тока. Ее решение локализовано в окрестности контура L_2 . Учет СЭБИР приводит к значительному изменению характера решения задачи чувствительности. Решение сопряженной задачи приобретает **глобальный характер**, т.к. в этом случае $\rho^* \neq 0$ и зависит от ρ, ϕ . Согласно (47) **возникает нелинейная зависимость функционала J от фазовой траектории системы.**

В прямой задаче при определенных условиях СЭБИР может быть малым эффектом. Однако в сопряженной задаче СЭБИР играет существенную роль. Он во многом определяет механизм изменчивости решения и усложняет задачу оптимального управления.

Отметим, что если рассматривать задачу о чувствительности осредненной по глубине циркуляции океана без учета уравнения для плотности, то оценка роли СЭБИР может быть занижена. Это связано с тем, что сопряженное уравнение для ϕ^* (с точностью до знака) совпадает с исходным и сохраняет вид и при $H = const$. Если анализ ограничить рассмотрением только одного сопряженного уравнения для ϕ^* , то может сложиться впечатление о незначительной роли СЭБИР. Этот эффект проявляется в поведении функции ρ^* и лишь затем, опосредованно, влияет на структуру ϕ^* .

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Дьяконов Е.Г. *О построении разностных схем с расщепляющимся оператором для многомерных нестационарных задач* // УМН. 1962. Т. 17, №4.
- [2] Кобельков Г.М. *О численных методах решения уравнений Навье-Стокса в переменных скорость-давление* // Вычислительные процессы и системы. Вып. 8 – М.: Наука, 1991. С. 204–236.
- [3] Кордзадзе А.А. *Математические вопросы решения задач динамики океана.* – Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, 1982 – 148 с.
- [4] Марчук Г.И. *О численном решении задачи Пуанкаре для океанских циркуляций* // ДАН СССР. 1969. Т. 185, №5. С. 1041–1044.
- [5] Marchuk G. *Some application of the splitting-up methods to the solution of mathematical physics problems* // Applik. mat. 1968. V. 13, №2.
- [6] Марчук Г.И. *Методы вычислительной математики.* – М.: Наука, 1980.
- [7] Марчук Г.И. *Методы расщепления.* – М.: Наука, 1988. – 264 с.
- [8] Марчук Г.И. *Сопряженные уравнения и анализ сложных систем.* – М.: Наука, 1992.
- [9] Марчук Г.И., Дымников В.П., Залесный В.Б., Лыкосов В.Н., Галин В.Я. *Математическое моделирование общей циркуляции атмосферы и океана.* – Л.: Гидрометеоздат, 1984. – 320 с.
- [10] Марчук Г.И., Дымников В.П., Залесный В.Б. *Математические модели геофизической гидродинамики и численные методы их реализации.* – Л.: Гидрометеоздат, 1987. – 296 с.

-
- [11] Marchuk G.I., Kuzin V.I. *On the combination of the finite element and splitting-up methods in the solution of the parabolic equations* // J. Comp. Phys. 1982. V. 52, №2. P. 237–272.
- [12] Марчук Г.И., Саркисян А.С. *Математическое моделирование циркуляции океана*. – М.: Наука, 1988. – 303 с.
- [13] Самарский А.А. *О сходимости метода дробных шагов для уравнений теплопроводности* // ЖВМ и МФ. 1962. Т. 2, №6. С. 1117–1121.
- [14] Саркисян А.С. *Численный анализ и прогноз морских течений*. – Л.: Гидрометеиздат, 1977 – 183 с.
- [15] Sarkisyan A.S. *The diagnostic calculations of large-scale oceanic circulation* // *The Sea*. 1997. V. 6. P. 362–458.
- [16] Sarkisyan A.S. *Theory and computation of ocean currents* // Israeli Program for Scientific Translations, Jerusalem, 1969.
- [17] Яненко Н.Н. *Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики*. – Новосибирск: Наука, 1967. – 196 с.
- [18] Zalesny V.B. *Numerical simulation and analysis of the sensitivity of large-scale ocean dynamics* // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. 1996. V. 11, №6. P. 421–443.
- [19] Zalesny V.B. *Variability and equilibrium states of the World ocean circulation* // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. 1997. V. 12, №6. P. 547–567.

О сферической модели излучения Земли

Т. А. СУШКЕВИЧ

Институт прикладной математики имени М.В. Келдыша РАН

ВВЕДЕНИЕ

Двадцатый век в истории земной цивилизации — это век научно-технической революции (НТР), связанной с тремя великими открытиями: проникновение в тайны и овладение ядерной энергией, покорение космического пространства и выход человека в космос, изобретение электронно-вычислительных машин (ЭВМ) и создание информационных технологий. ЭВМ явилась главным действующим лицом, основным двигателем НТР: использование ядерной энергии, полет в космос, информационные технологии были бы невозможны без ЭВМ.

Научно-исследовательская и научно-организационная деятельность Гурия Ивановича Марчука многие десятилетия была активно связана с триадой "ядерная энергия—космос—ЭВМ". Подтверждением, в частности, служит присуждение Госпремии 1979 года "За цикл работ по развитию и применению метода статистического моделирования для решения многомерных задач теории переноса излучения" коллективу ученых в составе Г.И. Марчука (руководителя работы), Г.А. Михайлова, С.М. Ермакова, В.Г. Золотухина, Н.Н. Ченцова.

В 1965 году Г.И. Марчук пригласил Г.А. Михайлова — специалиста по методу Монте-Карло в области атомной энергетики — работать в организованный им Вычислительный центр Сибирского отделения Академии наук СССР и предложил заняться задачами атмосферной оптики. Это был поворотный момент: впервые в мировой практике метод Монте-Карло применялся для моделирования переноса солнечного излучения в атмосфере Земли. Евграф Сергеевич Кузнецов (1901–1966 гг.) — первый специалист и создатель ведущей отечественной научной школы по численному решению задач теории переноса излучения — пессимистично относился к возможностям статистического моделирования. В настоящее время уже нет сомневающихся в результативности и эффективности метода Монте-Карло, который покорил современные суперкомпьютеры с параллельной архитектурой.

В первых же работах Г.И. Марчука и Г.А. Михайлова [1, 2] — математиков по образованию, окончивших математико-механический факультет Ленинградского государственного университета, рассматривалась самая сложная модель

формирования излучения Земли — это перенос излучения в сферической неоднородной газовой-аэрозольной оболочке, освещаемой внешним параллельным потоком солнечных лучей. Эти публикации явились первыми в мире работами по численному имитационному моделированию условий проведения первых космических фотосъемок и спектрографии зари и сумерек. В сущности, в них впервые были предложены алгоритмы решения прямых и обратных задач теории переноса излучения в поисках ответа на вопрос об интерпретационной ценности радиационной информации [3].

Сферические многомерные модели переноса излучения, несмотря на их сложность и громоздкость численной реализации на первых поколениях ЭВМ (М-20, БЭСМ-4, БЭСМ-6), в 60–70-е годы имели исключительную актуальность в связи с проектированием и созданием ракетно-космических систем, освоением ближнего и дальнего космического пространства, организацией и проведением космических исследований и наблюдений из космоса. Параллельно развивались исследования по научно-фундаментальным проблемам метеорологии, океанологии, физики атмосферы, изучения природных ресурсов, дистанционного зондирования атмосферы, суши, океана, облачности, гидрометеоров с привлечением космических данных.

К ИСТОРИИ АТМОСФЕРНО-ОПТИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ ИЗ КОСМОСА

В течение тысячелетий человечество изучает звезды и планеты солнечной системы путем визуальных, а позднее фотографических и фотоэлектрических наблюдений. Только планета Земля до конца 50-х годов оставалась недоступной. Лишь по отраженному свету от поверхности Луны (пепельный свет) [4] представлялось возможным оценить интегральное излучение Земли. Широкие возможности исследований радиационных характеристик нашей планеты появились в результате создания и развития ракетной и космической техники [5].

Опыт осуществления в СССР космической программы подтвердил реальность тех перспектив, которые связаны с использованием пилотируемых космических кораблей (ПКК), долгосрочных орбитальных станций (ДОС), автоматических межпланетных станций (АМС), космических аппаратов (КА), искусственных спутников Земли (ИСЗ) для исследования природной среды и природных ресурсов Земли из космоса [6–10]. 20 ноября 1998 г. состоялся запуск первого модуля "Заря" (Россия) первой Международной космической станции (МКС) "Альфа" — космической лаборатории будущего.

Важной составной частью первых научных космических программ являлись оптические исследования: визуальные наблюдения, фотометрические и спектральные исследования сумеречной и дневной атмосферы с целью изучения вертикальных профилей оптически активных компонентов (аэрозоль, озон, газовые примеси), исследования спектров отражения различных типов природных образований на поверхности Земли и оценка влияния атмосферы на спектральные яркости и контрасты природных объектов при наблюдениях (съемке) из космоса. Анализ космических спектров природных образований (спектральных яркостей, коэффициентов спектральных яркостей, спектральных контрастов) показал принципиальную возможность решения ряда фундаментальных и практических задач "космического земледения" [11].

В достижениях советской космонавтики огромную роль сыграли ПКК и ДОС с экипажами космонавтов [10]. Полет Ю.А. Гагарина 12 апреля 1961 г. на ПКК "Восток", который совершил один виток за 108 мин. вокруг Земли, — это был первый взгляд из космоса на Землю, т.е. первые визуальные наблюдения поверхности и ореола Земли. Полеты Г.С. Титова на ПКК "Восток-2" (август 1961 г.), А.Г. Николаева на ПКК "Восток-3" и П.Р. Поповича на ПКК "Восток-4" (август 1962 г.) расширили представления о возможностях визуальных наблюдений. Г.С. Титов 6 августа 1961 г. в начале второго витка ПКК "Восток-2" впервые в мире провел киносъемку Земли из космоса.

В.Ф. Быковский на ПКК "Восток-5" и В.В. Терешкова на ПКК "Восток-6" (июнь 1963 г.) впервые сфотографировали дневной и сумеречный горизонты Земли. Было положено начало инструментальным исследованиям оптически активных компонентов атмосферы с ПКК. Теоретическое обоснование этого эксперимента провел Г.В. Розенберг [12, 13]. С ПКК "Союз-5" (январь 1969 г.) под руководством К.Я. Кондратьева начались спектрографические эксперименты. Были получены первые в мире спектры излучения атмосферы и поверхности Земли в видимой области спектра [14]. Фотографирование и спектрографирование космической зари позволили одновременно получать дополняющие друг друга сведения о пространственной и спектральной структуре излучения и атмосферы Земли, в частности об аэрозольных и озоновых слоях. А.В. Филипченко и Н.Н. Рукавишников с ПКК "Союз-16" (декабрь 1974 г.) впервые провели фотографирование земной поверхности и атмосферы в поляризованном свете на трассе протяженностью около 30 тыс. км. По программе "Союз-Аполлон" с ПКК "Союз-19" (июль 1975 г.) оптические исследования проводились А.А. Леоновым и В.Н. Кубасовым [10, 15].

16 марта 1962 г. запуск первого ИСЗ серии "Космос" положил начало осуществлению комплексной научной программы оптических исследований околоземного космического пространства и Земли. После запуска в апреле 1971 г. первой ДОС "Салют" значительно расширилась программа визуально-инструментальных оптических наблюдений Земли. 24 апреля 1971 г. произошла первая стыковка ПКК "Союз-10" (В.А. Шаталов, А.С. Елисеев, Н.Н. Рукавишников) с ДОС "Салют". Начиная с ДОС "Салют-3" (июнь 1974 г.) и на всех последующих ДОС "Салют-4" (декабрь 1974 г.), "Салют-5" (июнь 1976 г.), "Салют-6" (сентябрь 1977 г.), "Салют-7" (апрель 1982 г.), "Мир" (1986 г.) выполнялась программа "космического землеобзора" [7-10].

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Космические исследования — это такая область фундаментальных и прикладных работ, которая с первых шагов своего становления не могла развиваться без использования ЭВМ. Освоение космического пространства послужило значительным фактором совершенствования ЭВМ и формирования новых научных направлений, связанных с математическим моделированием радиационного поля Земли, теорией переноса изображения, теорией видения, теорией обработки и распознавания образов и т.д. Информационно-математическое обеспечение — обязательная составная часть любого космического проекта.

Теоретико-расчетные исследования при проектировании и реализации первых КА, в частности, их систем навигации, ориентации, стабилизации, а также первых космических оптических экспериментов осуществлялись тремя ведущими коллективами специалистов по (математическому) моделированию переноса излучения в природных средах на ЭВМ. В Ленинградском государственном университете и Главной геофизической обсерватории работало несколько групп под руководством В.В. Соболева и К.Я. Кондратьева. В.В. Соболев, И.Н. Минин и О.И. Смоктий разработали первую комбинированную плоско-сферическую модель земной атмосферы в приближении В.В. Соболева [16–29]. В Вычислительном центре СО АН СССР под руководством Г.И. Марчука и Г.А. Михайлова были разработаны первые алгоритмы метода Монте-Карло для сферической модели Земли [1–3, 30–37]. Весомую роль в эффективности этих алгоритмов сыграл математический аппарат сопряженных уравнений, предложенный Г.И. Марчуком [38–41] и развитый в работах Г.А. Михайлова, М.А. Назаралиева, В.С. Антюфеева, Р.А. Дарбиняна [1–3, 30, 33–37, 42–47]. Т.А. Сушкевич (Институт прикладной математики АН СССР) впервые сформулировала и реализовала итерационным методом характеристик глобальную сферическую модель радиационного поля системы атмосфера–Земля (САЗ) в масштабах планеты [48–58]. Приближенные подходы разрабатывал О.А. Авасте [59–61]. Метод В.В. Соболева развивался Л.Г. Титарчуком [62–65]. Сферические модели излучения планетных атмосфер вошли в диссертации И.Н. Минина [66], О.И. Смоктия [67], Г.А. Михайлова [68], Т.А. Сушкевич [69, 70], Л.Г. Титарчука [71], М.А. Назаралиева [72, 73], В.С. Антюфеева [74, 75]. В постановке задач исследований и обсуждении результатов принимали участие Т.А. Гермогенова, М.В. Масленников, А.М. Обухов, М.С. Малкевич, Г.В. Розенберг, А.Б. Сандомирский, А.И. Лазарев, Е.О. Федорова, В.П. Козлов, В.Н. Сергеевич, И.И. Кокшаров, Ч.Й. Виллман, О.А. Авасте, В.Е. Плюта, Г.М. Гречко и др.

Попытки решения сферической задачи за рубежом (США) были предприняты Секерой и Ленобль [76], которые предложили использовать метод последовательных приближений, соответствующих разложению решения по малому параметру, взяв в качестве первого приближения решение плоской задачи, а в качестве малого параметра — отношение эффективной высоты однородной атмосферы к радиусу Земли. Большинство работ за рубежом выполняется методом Монте-Карло [77–81] или приближенными численными методами [82–84]. На уровне теории без практической реализации остался метод инвариантного погружения [85–87].

До начала космической эры сферические модели планетных атмосфер рассматривались в теории сумеречных явлений [88], в астрофизических исследованиях [21, 22, 89] и в связи с проблемой лучистого теплообмена и равновесия [90]. По мнению С. Чандрасекара [89, 393 с.], задача лучистого переноса в планетных атмосферах с учетом их сферичности анализировалась в ранних работах W. McCrea (1928 г.), Н.А. Козырева (1934 г.), S. Chandrasekhar (1934 г.), L. Gratton (1937 г.). Это были модели однородной консервативной сферы с изотропным рассеянием. Астрофизики обычно предпочитали приближенные явные способы решения задач теории переноса излучения. Численные методы, предложенные Е.С. Кузнецовым [90] и В.С. Владимировым [91], позволили существенно услож-

нить сферические модели и приблизить их к натурным условиям. Эти публикации оказали заметное влияние на мои работы по математическому моделированию переноса излучения в природных средах, в которых итерационный метод характеристик является базовым.

В истории космических исследований Земли, проводимых с участием человека, особое положение занимает первый научный эксперимент по дистанционному зондированию земной атмосферы путем фотографирования сумеречного горизонта [12, 13]. Проблема использования сумеречных явлений для оптического зондирования атмосферы впервые, после Альгазена (XI век) и Кеплера (1604 г.), была выдвинута в 1923 году В.Г. Фесенковым [92]. Первые построения теории яркости, поляризации и рефракции света в атмосфере Земли основаны на геометрической картине освещения планеты солнечными лучами в условиях наблюдения с земной поверхности дневного и сумеречного неба. По мнению Г.В. Розенберга [88, 179 с.], пожалуй, впервые такая задача была сформулирована схематически Р. Grunher в 1919 году. Приближения однократного рассеяния солнечного света в сферически симметричной земной атмосфере разрабатывались В.Г. Фесенковым (1923 г.), F. Link (1933 г.), Н.М. Штауде (1936 г.), И.А. Хвостиковым (1936 г.), Г.В. Розенбергом (1942 г.) для обоснования и применения фотометрических наблюдений сумерек как метода изучения стратосферы и верхней атмосферы [88, 92, 93].

Второй этап формирования сумеречного метода (с 1945 г.) связан с выяснением роли вторично рассеянного света и началом ракетных исследований верхней атмосферы [95–102].

Эпохальным оказался третий этап — этап становления и совершенствования сумеречных исследований планетных атмосфер с КА. Г.В. Розенберг не только первым сформулировал такую задачу, но и впервые реализовал теоретические построения [12] в первом инструментальном исследовании земной атмосферы с ПКК [13]: 17 июня 1963 г. с борта с ПКК "Восток-6" были получены космонавтом первые в мире фотографические снимки края Земли с окружающим ее сумеречным и заревым ореолом, позволившие впервые установить и обосновать существование динамичных стратосферных аэрозольных слоев оптическими методами и средствами дистанционного зондирования с космических орбит [1–3, 12, 13, 103–106]. Анализ и интерпретацию первых космических черно-белых, а позже цветных фотографических снимков независимо проводили три группы: К.Я. Кондратьев, О.И. Смоктий [14, 28, 29]; Г.И. Марчук, Г.А. Михайлов, М.А. Назаралиев [1–3, 31, 37, 103]; Г.В. Розенберг, А.Б. Сандомирский, Т.А. Сушкевич [15, 104–113]. Космические оптические наблюдения, сопровождающиеся репрезентативным математическим моделированием, позволили не только обнаружить, но и впервые исследовать оптическую структуру стратосферных аэрозольных и озоновых слоев методами дистанционного зондирования [31, 114]. Эти пионерские работы подтвердили достоверность разработанных сферических моделей поля излучения Земли.

Запуск советской АМС "Зонд-5" впервые в мире позволил увидеть планету Земля с большого расстояния и осуществить ее фотометрирование, которое было продолжено затем с АМС "Зонд-6, 7, 8". Одним из важных результатов научного фотографического (в нескольких спектральных интервалах) эксперимента

было определение фотометрических характеристик планеты, коэффициентов яркости ее объектов и определение звездной величины Земли [4]. При проектировании съемочной аппаратуры и фотометрическом анализе изображений Земли использовались результаты Т.А. Сушкевич по математическому моделированию яркостного поля сферической Земли с разными типами подстилающей поверхности (суша, океан, разноярусная облачность).

Созданный в Институте прикладной математики имени М.В. Келдыша АН СССР (с 1992 г. РАН) в 60–70-е годы вычислительный аппарат использовался преимущественно для фундаментально-поисковых научных исследований по разработке методов и средств космических наблюдений, дистанционного зондирования из космоса, ориентации, стабилизации, астронавигации КА и ракет, для интерпретации и анализа данных космических и комплексных экспериментов, проводимых на пилотируемых космических кораблях и орбитальных станциях, а также аэростатных, самолетных и наземных наблюдений. Впервые были получены оригинальные теоретико-расчетные результаты по моделям излучения Земли для проектов: астронавигации по визированию восходящих и заходящих звезд; космических систем фиксирования стартов ракет; датчиков ориентации лунных аппаратов и космического комплекса "Луна-9", обеспечивающего возвращение ракеты с Луны на Землю, по яркостному лимбу Земли и планете Земля (впервые в мире были рассчитаны звездные величины и фазовые кривые планеты Земля для характерных состояний атмосферы и подстилающих поверхностей: суша, океан, облака); приборов автоматической и ручной ориентации и стабилизации КА по яркостному горизонту Земли в ближнем космосе; фотосъемок и картографии Антарктиды ("Космос-2000"); оптико-электронных систем наблюдений и т.д.

В исследованиях по физике атмосферы и оптических свойствах различных компонентов атмосферы (аэрозоль, влажность, газовые примеси) с помощью космических экспериментов, проводимых на ПКК ("Восток-6", "Восход", "Союз-3, 4, 5, 6, 7, 8, 16", ДОС "Салют", "Мир", комплекс "Союз-Аполлон"), а также спектрофотометрии с ракет "Зонд-5, 7, 8" использованы численные результаты по глобальным моделям излучения сферической Земли и математическому моделированию для решения обратных задач восстановления высотной стратификации аэрозоля в атмосфере Земли.

Впервые были оценены условия применимости (в частности, размытие за счет многократного рассеяния и подсветки от подстилающей поверхности) рефрактометрического метода при лимбовых исследованиях состава атмосферы из космоса (фото- и киносъемки захода Солнца с ДОС "Салют") и при визировании звезд по горизонтальным трассам через атмосферу с учетом влияния рефракции на пространственную структуру яркости горизонта Земли.

Подход на основе анализа уравнений для характеристик в криволинейных координатах и разных приемов ускорения сходимости итераций по подобластям позволяет перейти к численному решению трехмерно-неоднородной сферической задачи, моделирующей близкие к реальным земные условия. Такая постановка приобретает актуальность в связи с проблемами фоторадиационной химии атмосферы (тропосферы и озоносферы в условиях сумерек, зари, терминатора, полярных регионов), информационного обеспечения томографии

атмосферы Земли, в том числе рефрактометрическими методами и космическими системами, работающими в условиях наблюдений по горизонтальным трассам, дистанционного зондирования полярных регионов, созданием моделей спектрально-радиационного баланса Земли, фазовой яркости Земли для приборов космической навигации (возврат КА на Землю, навигация КА по Земле), реализацией проектов дополнительных источников энергии на КА путем использования солнечного излучения, отраженного Землей, и т.п.

Новые перспективные возможности математического моделирования атмосферной радиации Земли в масштабах планеты связаны с разработкой математического обеспечения для широкой области приложений на суперкомпьютерах с параллельной архитектурой. Наличие такого аппарата позволяет проводить эталонные расчеты, вычислительные эксперименты, имитационное моделирование, верификацию приближенных методик и быстрых алгоритмов для массового решения научно-исследовательских и прикладных задач, а также совершенствовать радиационный блок для моделей циркуляции, прогноза, климата, фотохимической кинетики, динамики озоносферы, трансграничного переноса загрязнений воздушного бассейна.

В середине 70-х годов теоретико-расчетные исследования в области космических технологий принимают массовый характер. О приоритете отечественных работ по сферическим моделям планетных атмосфер свидетельствует и книга – обзор [82], подготовленный Жаклин Ленобль — президентом Международной комиссии по атмосферной радиации Международной ассоциации метеорологии и физики атмосферы. В объективности этого обзора можно быть уверенными, поскольку Ж. Ленобль и З. Секера опубликовали первую в мире аналитическую работу по многомерной сферической модели излучения Земли [76].

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим задачу переноса оптического (солнечного и собственного) излучения в САЗ в приближении сферически-симметричной оболочки, на которую падает внешний параллельный поток интенсивности πS_λ . Для учета вклада пространственно-неоднородной подстилающей поверхности (земной поверхности, верхней границы облачности или гидрометеоров) в излучение сферической САЗ построим оптический передаточный оператор (ОПО) в рамках линейно-системного подхода, разработанного для плоской модели САЗ [115]. Универсальной, инвариантной относительно конкретных структур неоднородностей отражающей и излучающей границы считается функция влияния (ФВ) краевой задачи теории переноса излучения, которая является ядром ОПО [115, 116].

Выберем направление оси OZ , проходящей через центр Земли, противоположным внешнему параллельному потоку радиации. При этом Земля и атмосфера будут облучаться Солнцем симметрично относительно оси OZ . В целом САЗ рассматривается в сферической системе координат как трехмерная: радиус-вектор \mathbf{r} любой точки $A(\mathbf{r})$ атмосферы и подстилающей поверхности полностью определяется расстоянием $r = |\mathbf{r}|$ от центра Земли, полярным углом ψ и азимутом η , т.е. каждому \mathbf{r} ставится в соответствие тройка (r, ψ, η) — радиус, широта $0 \leq \psi \leq \pi$, долгота $0 \leq \eta \leq 2\pi$.

Направление распространения светового луча \mathbf{s} (считаем, что \mathbf{s} — единичный вектор) в точке $A(\mathbf{r})$, описываем локальной сферической системой координат с центром в точке $A(\mathbf{r})$: зенитным углом $\vartheta = \arccos(\mathbf{r} \cdot \mathbf{s})/|\mathbf{r}|$, отсчитываемым от \mathbf{r} , и азимутом φ в касательной плоскости, проведенной в точке $A(\mathbf{r})$ к сфере радиуса r , т.е. каждому \mathbf{s} соответствует пара (ϑ, φ) . За начало отсчета $\varphi = 0$ принимаем азимут прямого внешнего потока. Обозначим $\mu = \cos \vartheta$. Опишем вокруг оси OZ конус с вершиной в центре Земли и углом раствора, равным 2ψ . В точке $A(\mathbf{r})$, лежащей на боковой поверхности конуса, направлениям \mathbf{s} , выходящим из этого конуса, присвоим значения азимута $0 \leq \varphi < \pi/2$, а входящим в конус — $\pi/2 < \varphi \leq \pi$. Лучи \mathbf{s} с азимутом $\varphi = \pi/2$ будут лежать в плоскостях, касательных к боковым поверхностям таких конусов, а азимутам $\varphi = 0$ и $\varphi = \pi$ будет соответствовать одна координатная плоскость, проходящая через ось OZ и радиус-вектор \mathbf{r} .

Исследуемый сферический слой ограничивается сферическими поверхностями с радиусами R_b снизу и R_t сверху. Совокупность всех точек $A(\mathbf{r})$ сферической оболочки образует открытую область G с нижней G_b и верхней G_t границами — сферическими поверхностями, имеющими радиусы R_b и R_t соответственно. Векторное поле всех направлений световых лучей $\mathbf{s}(A)$ в каждой точке $A(\mathbf{r})$ образует (единичную сферу) множество $\Omega = \Omega^+ \cup \Omega^-$, где Ω^+ и Ω^- — множества (полусферы) направлений \mathbf{s} с $\mu \in [0, 1]$ и $\mu \in [-1, 0]$, отвечающих восходящему и нисходящему потокам излучения соответственно. Фазовый объем задачи суть

$$\Gamma_{tot} \equiv [G \cup G_b \cup G_t] \times \Omega = \{(\mathbf{r}, \mathbf{s}) : \mathbf{r} \in [G \cup G_b \cup G_t], \mathbf{s} \in \Omega\}.$$

Для удобства записи граничных условий вводим множества — фазовые области

$$b \equiv G_b \times \Omega^+ = \{(\mathbf{r}, \mathbf{s}) : \mathbf{r} = \mathbf{r}_b \in G_b, \mathbf{s} \in \Omega^+\},$$

$$t \equiv G_t \times \Omega^- = \{(\mathbf{r}, \mathbf{s}) : \mathbf{r} = \mathbf{r}_t \in G_t, \mathbf{s} \in \Omega^-\},$$

метки которых выбраны для наглядности совпадающими с первыми буквами слов bottom (дно) и top (верх).

Задача состоит в определении интенсивности ослабленного прямого излучения от источников и стационарного поля интенсивности однократно и многократно рассеянного излучения в рассеивающей, поглощающей и излучающей сферической оболочке G с границами G_t и G_b или за пределами G . Приближение стационарного поля физически корректно, поскольку исследуется процесс распространения световых лучей.

Полную интенсивность монохроматического (при фиксированном λ) или квазимонохроматического (при фиксированных λ и $\Delta\lambda$) стационарного излучения $\Phi_\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{s})$, где индекс λ — длина волны (ниже везде опускается), в точке $A(\mathbf{r})$ с радиус-вектором \mathbf{r} в направлении \mathbf{s} находим как решение общей краевой задачи (ОКЗ) теории переноса

$$K\Phi = F^{in}, \quad \Phi|_t = F^t, \quad \Phi|_b = \varepsilon R\Phi + F^b \quad (1)$$

в фазовой области Γ с линейными операторами: оператор переноса [56]

$$D \equiv (\mathbf{s}, \text{grad}) + \sigma_{tot}(\mathbf{r}),$$

для трехмерной сферической геометрии задачи

$$(\mathbf{s}, \nabla \Phi) = \cos \vartheta \frac{\partial \Phi}{\partial r} + \frac{\sin \vartheta \cos \varphi}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial \psi} - \frac{\sin \vartheta}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial \vartheta} + \\ + \frac{\sin \vartheta \sin \varphi}{r \sin \psi} \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} - \frac{\sin \vartheta \sin \varphi \operatorname{ctg} \psi}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi};$$

интеграл столкновений — функция источника

$$B(\mathbf{r}, \mathbf{s}) \equiv S\Phi = \sigma_{sc}(\mathbf{r}) \int_{\Omega} \gamma(\mathbf{r}, \mathbf{s}, \mathbf{s}') \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{s}') ds', \quad ds' = \sin \vartheta' d\vartheta' d\varphi';$$

интегро-дифференциальный оператор $K \equiv D - S$; оператор отражения

$$[R\Phi](\mathbf{r}_b, \mathbf{s}) = \int_{\Omega^-} q(\mathbf{r}_b, \mathbf{s}, \mathbf{s}^-) \Phi(\mathbf{r}_b, \mathbf{s}^-) ds^-, \quad \mathbf{s} \in \Omega^+. \quad (2)$$

Суммарная аэрозольно-молекулярная индикатриса рассеяния нормирована по условию

$$\frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} \gamma(\mathbf{r}, \mathbf{s}, \mathbf{s}') ds' = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \gamma(\mathbf{r}, \cos \chi) d \cos \chi = 1;$$

$\sigma_{tot}(\mathbf{r})$ и $\sigma_{sc}(\mathbf{r})$ — пространственные распределения полного сечения взаимодействия (ослабления, экстинкции) нейтрального (незаряженного) оптического излучения с веществом, заполняющим область G , и суммарного аэрозольно-молекулярного коэффициента рассеяния; угол рассеяния χ определяется из соотношения

$$\cos \chi = \cos(\mathbf{s} \cdot \mathbf{s}') = \cos \vartheta \cos \vartheta' + \sin \vartheta \sin \vartheta' \cos(\varphi - \varphi'),$$

если $\mathbf{s} = (\vartheta, \varphi)$, $\mathbf{s}' = (\vartheta', \varphi')$. Функция $F^{in}(\mathbf{r}, \mathbf{s})$ — плотность источников излучения, расположенных внутри области G ; $F^b(\mathbf{r}_b, \mathbf{s}^+)$ и $F^t(\mathbf{r}_t, \mathbf{s}^-)$ — источники излучения на границах сферической оболочки, определенные для лучей \mathbf{s} , направленных внутрь области G .

Оператор R описывает закон отражения излучения от подстилающей поверхности, расположенной на уровне нижней границы G_b ; параметр $0 \leq \varepsilon \leq 1$ фиксирует акт взаимодействия излучения с подложкой. При $R \equiv 0$ (или $\varepsilon = 0$) имеем дело с первой краевой задачей (ПКЗ) теории переноса

$$K\Phi_0 = F^{in}, \quad \Phi_0|_t = F^t, \quad \Phi_0|_b = F^b \quad (3)$$

для сферического слоя с прозрачными, неотражающими, абсолютно "черными" границами или задачей с "вакуумными" граничными условиями.

Скалярная функция с векторными аргументами

$$\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = \Phi(A, \mathbf{s}(A)) = \Phi(r, \psi, \eta, \vartheta, \varphi)$$

определяется как решение ОКЗ (1) или ПКЗ (3) в фазовой области

$$\Gamma \equiv G \times \Omega + G_t \times \Omega^+ + G_b \times \Omega^-, \quad \Gamma_{tot} = \Gamma \cup t \cup b,$$

и образует скалярное поле. Изменение функции $\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{s})$ в окрестности некоторой точки $A(\mathbf{r})$ характеризуется вектором $\text{grad } \Phi$. Дифференцирование скалярного поля функции $\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{s})$ от векторных аргументов равносильно определению производной $\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{s})$ по направлению \mathbf{s} в точке $A(\mathbf{r})$. Производная по любому направлению \mathbf{s} равна проекции $\text{grad } \Phi$ на это направление, следовательно,

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{s}} = (\mathbf{s}, \text{grad } \Phi) = (\mathbf{s}, \nabla \Phi).$$

Краевая задача (1) рассматривается при естественных, вытекающих из физики исследуемого процесса ограничениях на коэффициенты, источники и граничные условия:

- а) $\sigma_{tot}(\mathbf{r})$ и $\sigma_{sc}(\mathbf{r})$ — ограниченные, кусочно-непрерывные и кусочно-дифференцируемые функции в области G ;
- б) $\gamma(\mathbf{r}, \mathbf{s}, \mathbf{s}')$ — непрерывная функция угла рассеяния $\chi = \arccos(\mathbf{s} \cdot \mathbf{s}')$, имеющая кусочно-непрерывные производные по каждой переменной;
- в) оператор отражения R (2) — равномерно ограниченный, т.е.

$$0 \leq \int_{\Omega^-} q(\mathbf{r}_b, \mathbf{s}, \mathbf{s}^-) ds^- \leq 1 ;$$

г) рассеивающая, поглощающая и излучающая среда внутри области G , а также среды на нижней G_b и верхней G_t границах области G — немультиплицирующие (без размножения);

д) источники $F^{in}(\mathbf{r}, \mathbf{s})$, $F^b(\mathbf{r}_b, \mathbf{s}^+)$, $F^t(\mathbf{r}_t, \mathbf{s}^-)$ — ограниченные, кусочно-непрерывные или финитные функции (например, внешний мононаправленный солнечный поток описывается δ -функцией).

Решение краевой задачи для стационарного уравнения переноса осуществляется методом последовательных приближений — простыми итерациями по столкновениям разной кратности или модифицированными итерациями с включением ускоряющих процедур [55]. На каждой итерации уравнение переноса интегрируется по характеристикам. Фиксируем некоторое направление $\mathbf{s} \in \Omega$. Проведем через точку $A(\mathbf{r}(0))$ в этом направлении прямую так, что уравнение прямой можно записать в виде

$$\mathbf{r}(\xi) = \mathbf{r}(0) - \xi \mathbf{s}, \quad -\infty < \xi < \infty, \quad (4)$$

где $D(\mathbf{r}(\xi))$ — текущая точка, $A(\mathbf{r}(0))$ — фиксированная точка на прямой, от которой отсчитывается сдвиг $\xi = |AD|$ вдоль прямой. С помощью таких прямых можно взаимнооднозначно преобразовать точки области G в точки (A, ξ) . Это преобразование переводит функции, измеримые в $G \times \Omega$, в функции, измеримые на Ω вдоль прямых с направлениями \mathbf{s} . В силу (4) можно записать

$$\frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{s})}{\partial \mathbf{s}} = \frac{\partial \Phi(\mathbf{r} - \xi \mathbf{s}, \mathbf{s})}{\partial \xi} \Big|_{\xi=0}.$$

Прямые линии (4) — пути, по которым движутся фотоны, — являются характеристиками линейного дифференциального оператора $\frac{\partial}{\partial \mathbf{s}}$ [56]. Уравнение

переноса теперь можно переписать так:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \xi} + \sigma_{tot}(\mathbf{r} - \xi \mathbf{s}) \Phi(\mathbf{r} - \xi \mathbf{s}, \mathbf{s}) = B(\mathbf{r} - \xi \mathbf{s}, \mathbf{s}) + F(\mathbf{r} - \xi \mathbf{s}, \mathbf{s}) \Big|_{\xi=0}. \quad (5)$$

Уравнение (5) при известной правой части можно разрешить явно путем интегрирования по характеристике:

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{s}) &= \Phi(\mathbf{r} - \xi \mathbf{s}, \mathbf{s}) \exp \left[- \int_0^\xi \sigma_{tot}(\mathbf{r} - \xi' \mathbf{s}) d\xi' \right] + \\ &+ \int_0^\xi B(\mathbf{r} - \xi' \mathbf{s}, \mathbf{s}) \exp \left[- \int_0^{\xi'} \sigma_{tot}(\mathbf{r} - \xi'' \mathbf{s}) d\xi'' \right] d\xi' + \\ &+ \int_0^\xi F(\mathbf{r} - \xi' \mathbf{s}, \mathbf{s}) \exp \left[- \int_0^{\xi'} \sigma_{tot}(\mathbf{r} - \xi'' \mathbf{s}) d\xi'' \right] d\xi' \end{aligned}$$

и в итоге получить явную рекуррентную связь между значениями функции $\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{s})$ в двух точках траектории луча \mathbf{s} . Это базовая формула алгоритмов интегрирования уравнения переноса по характеристикам без интерполяции и с интерполяцией в сеточно-характеристическом методе.

Общая краевая задача (1) линейная (по источникам), и ее решение можно искать в виде суперпозиции (аргументы (\mathbf{r}, \mathbf{s}) опускаем)

$$\Phi = \Phi_0 + \Phi_q.$$

Фоновое излучение Φ_0 определяется как решение ПКЗ (3) и может содержать до трех фоновых компонент :

$$\Phi_0 = \Phi_0^t + \Phi_0^b + \Phi_0^{in},$$

каждую из которых можно рассчитывать отдельно как решение ПКЗ с источниками F^t, F^b, F^{in} соответственно. Задача для определения подсветки Φ_q , обусловленной влиянием отражающей подстилающей поверхности, — это ОКЗ

$$K\Phi_q = 0, \quad \Phi_q|_t = 0, \quad \Phi_q|_b = \varepsilon R\Phi_q + \varepsilon E_q, \quad (6)$$

где источником инсоляции является освещенность (яркость, облученность) подложки, создаваемая фоновым излучением: $E_q(\mathbf{r}_b, \mathbf{s}^+) \equiv R\Phi_0$.

ФУНКЦИИ ВЛИЯНИЯ СФЕРИЧЕСКОЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ТЕОРИИ ПЕРЕНОСА

По аналогии с плоской САЗ [115] введем "горизонтальные" координаты $r_\perp = (\psi, \eta) \in \Omega$; $dr_\perp = \sin \psi d\psi d\eta$. Рассмотрим ПКЗ

$$K\Phi = 0, \quad \Phi|_t = 0, \quad \Phi|_b = f(\mathbf{s}^b; r_\perp, \mathbf{s}). \quad (7)$$

Параметр $\mathbf{s}^h \in \Omega^+$ может отсутствовать. Задача (7) отвечает линейной САЗ, и ее обобщенное решение представляется в виде линейного функционала — интеграла суперпозиции

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{s}^h; r, r_\perp, \mathbf{s}) &= \mathcal{F}(f) \equiv (\Theta, f) \equiv \\ &\equiv \frac{1}{2\pi} \int_{\Omega^+} ds_h^+ \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} \Theta(\mathbf{s}_h^+; r, r_\perp - r'_\perp, \mathbf{s}) f(\mathbf{s}^h; r'_\perp, \mathbf{s}_h^+) \sin \psi' d\psi' d\eta', \end{aligned} \quad (8)$$

ядром которого является ФВ $\Theta(\mathbf{s}_h^+; r, r_\perp, \mathbf{s})$ — решение ПКЗ

$$K\Theta = 0, \quad \Theta|_t = 0, \quad \Theta|_b = f_\delta \quad (9)$$

с параметром $\mathbf{s}_h^+ \in \Omega^+$ и источником $f_\delta(\mathbf{s}_h^+; r_\perp, \mathbf{s}) = \delta(r_\perp)\delta(\mathbf{s} - \mathbf{s}_h^+)$. ФВ Θ фактически описывает поле излучения в слое с неотражающими границами, создаваемое за счет процессов многократного рассеяния стационарного узкого пучка с направлением \mathbf{s}_h^+ , источник которого расположен на границе G_b в точке с $\psi = 0$.

Если источник $f(r_\perp)$ — изотропный и "горизонтально"-неоднородный, то решение ПКЗ (7) находится через линейный функционал

$$\Phi(r, r_\perp, \mathbf{s}) = \mathcal{F}_c(f) \equiv (\Theta_c, f) \equiv \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} \Theta_c(r, r_\perp - r'_\perp, \mathbf{s}) f(r'_\perp) \sin \psi' d\psi' d\eta' \quad (10)$$

с ядром

$$\Theta_c(r, r_\perp, \mathbf{s}) = \frac{1}{2\pi} \int_{\Omega^+} \Theta(\mathbf{s}_h^+; r, r_\perp, \mathbf{s}) ds_h^+. \quad (11)$$

ФВ Θ_c совпадает с функцией размытия точки и удовлетворяет ПКЗ с осевой симметрией

$$K\Theta_c = 0, \quad \Theta_c|_t = 0, \quad \Theta_c|_b = \delta(r_\perp). \quad (12)$$

В случае анизотропного и "горизонтально"-однородного источника $f(\mathbf{s}^h; \mathbf{s})$ решение ПКЗ (7) определяется через линейный функционал

$$\Phi(\mathbf{s}^h; r, \mathbf{s}) = \mathcal{F}_r(f) \equiv (\Theta_r, f) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{\Omega^+} \Theta_r(\mathbf{s}_h^+; r, \mathbf{s}) f(\mathbf{s}^h; \mathbf{s}_h^+) ds_h^+ \quad (13)$$

с ядром

$$\Theta_r(\mathbf{s}_h^+; r, \mathbf{s}) = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} \Theta(\mathbf{s}_h^+; r, r_\perp, \mathbf{s}) \sin \psi d\psi d\eta. \quad (14)$$

ФВ Θ_c — решение одномерной сферической ПКЗ с азимутальной зависимостью

$$K_r\Theta_r = 0, \quad \Theta_r|_t = 0, \quad \Theta_r|_b = \delta(\mathbf{s} - \mathbf{s}_h^+). \quad (15)$$

При изотропном и "горизонтально"-однородном источнике решение ПКЗ (7)

$$\Phi(r, \mathbf{s}) = fW(r, \mathbf{s}), \quad f = \text{const}, \quad (16)$$

рассчитывается через ФВ

$$\begin{aligned} W(r, \mathbf{s}) &= \frac{1}{2\pi} \int_{\Omega^+} d\mathbf{s}_h^+ \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} \Theta(\mathbf{s}_h^+; r, r_{\perp}, \mathbf{s}) \sin \psi d\psi d\eta = \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} \Theta_c(r, r_{\perp}, \mathbf{s}) \sin \psi d\psi d\eta = \frac{1}{2\pi} \int_{\Omega^+} \Theta_r(\mathbf{s}_h^+; r, \mathbf{s}) d\mathbf{s}_h^+, \end{aligned} \quad (17)$$

которую называют также функцией пропускания, отягощенной вкладом многократного рассеяния, и определяют как решение одномерной сферической ПКЗ

$$K_r W = 0, \quad W|_t = 0, \quad W|_b = 1. \quad (18)$$

Соотношения (11), (14), (17) можно использовать в качестве критериев точности вычислений ФВ Θ , Θ_c , Θ_r через решения более простых ПКЗ (12), (15), (18). Функционалы (10), (13), (16) являются частными случаями функционала (8). Функции влияния Θ , Θ_c , Θ_r , W — решения ПКЗ (9), (12), (15), (18) соответственно — составляют полный набор базовых моделей фундаментальных решений первых и общих краевых задач теории переноса излучения в сферическом слое и инвариантных характеристик линейной САЗ.

ОПТИЧЕСКИЙ ПЕРЕДАТОЧНЫЙ ОПЕРАТОР

На основе общей теории регулярных возмущений с помощью ряда

$$\Phi_q(\mathbf{s}^h; \mathbf{r}, \mathbf{s}) = \sum_{k=1}^{\infty} \varepsilon^k \Phi_k$$

ОКЗ (6) сводится к системе рекуррентных ПКЗ типа (7)

$$K \Phi_k = 0, \quad \Phi_k|_t = 0, \quad \Phi_k|_b = E_k \quad (19)$$

с источниками $E_k = R \Phi_{k-1}$ для $k \geq 2$, $E_1 = E_q$. Вводится операция, описывающая один акт взаимодействия излучения с границей через ФВ Θ :

$$[Gf](\mathbf{s}^h; \mathbf{r}_b, \mathbf{s}) \equiv R(\Theta, f) = \int_{\Omega^-} q(\mathbf{r}_b, \mathbf{s}, \mathbf{s}^-)(\Theta, f) d\mathbf{s}^-.$$

Решения системы ПКЗ (19) находятся как линейные функционалы (8):

$$\Phi_1 = (\Theta, E), \quad \Phi_k = (\Theta, R \Phi_{k-1}) = (\Theta, G^{k-1} E).$$

Асимптотически точное решение ОКЗ (6) получается в форме линейного функционала (8) — оптического передаточного оператора

$$\Phi_q = (\Theta, Y), \quad (20)$$

где "сценарий" оптического изображения или яркость подстилающей поверхности

$$Y \equiv \sum_{k=0}^{\infty} G^k E = \sum_{k=0}^{\infty} R \Phi_k$$

есть сумма ряда Неймана по кратности отражения излучения от подложки с учетом многократного рассеяния в среде. Имеет место мажорантная оценка:

$$\begin{aligned} \|Y\| &\leq \sum_{k=0}^{\infty} \|R\Phi_k\| \leq \|E_q\| \sum_{k=0}^{\infty} (q_* c_*)^k = \frac{\|E_q\|}{1 - q_* c_*} \leq \frac{q_* \|\Phi_0\|}{1 - q_* c_*}, \\ \|\Phi_k\| &= \text{vrai} \sup_{\mathbf{r}_b, \mathbf{s}} |\Phi_k| \leq q_*^{k-1} c_*^k \|E_q\|, \\ \|R(1)\| &\leq \text{vrai} \sup_{\mathbf{r}_b, \mathbf{s}^+} \int_{\Omega^-} |q(\mathbf{r}_b, \mathbf{s}^+, \mathbf{s}^-)| d\mathbf{s}^- = q_* \leq 1, \\ \mathcal{F}(1) &= W(r, \mathbf{s}), \quad \|\mathcal{F}(1)\| \leq \sup_{r, \mathbf{s}} W = c_* \leq 1. \end{aligned}$$

”Сценарий” удовлетворяет уравнению Фредгольма II рода

$$Y = R(\Theta, Y) + E_q,$$

которое называют уравнением ”приземной фотографии”. В общем случае $R(\Theta, Y) \neq (R\Theta, Y)$. Суммарное излучение САЗ и ”космическая фотография” описываются функционалом

$$\Phi = \Phi_0 + (\Theta, Y).$$

ФВ $\Theta(\mathbf{s}_h^+; r, r_\perp, \mathbf{s})$ используется для решения ОКЗ (6) со следующим набором пар функции источника и характеристики отражения:

$$\begin{aligned} E(\mathbf{r}_b, \mathbf{s}), q(\mathbf{r}_b, \mathbf{s}, \mathbf{s}'); \quad E(\mathbf{r}_b, \mathbf{s}), q(\mathbf{s}, \mathbf{s}'); \quad E(\mathbf{s}), q(\mathbf{r}_b, \mathbf{s}, \mathbf{s}'); \\ E(\mathbf{r}_b), q(\mathbf{r}_b, \mathbf{s}, \mathbf{s}'); \quad E(\mathbf{r}_b), q(\mathbf{s}, \mathbf{s}'); \quad E, q(\mathbf{r}_b, \mathbf{s}, \mathbf{s}'). \end{aligned}$$

ФВ $\Theta_c(r, r_\perp, \mathbf{s})$ является ядром функционалов, когда источник и параметр отражения составляют следующие пары:

$$\begin{aligned} E(\mathbf{r}_b, \mathbf{s}), q(\mathbf{r}_b, \mathbf{s}'); \quad E(\mathbf{r}_b, \mathbf{s}), q(\mathbf{s}'); \quad E(\mathbf{s}), q(\mathbf{r}_b, \mathbf{s}'); \\ E(\mathbf{r}_b), q(\mathbf{r}_b, \mathbf{s}'); \quad E(\mathbf{r}_b), q(\mathbf{s}'); \quad E, q(\mathbf{r}_b, \mathbf{s}'). \end{aligned}$$

С помощью ФВ $\Theta_r(\mathbf{s}_h^+; r, \mathbf{s})$ определяются функционалы в случае следующих источников и параметров отражения: $E(\mathbf{s}), q(\mathbf{s}, \mathbf{s}'); E, q(\mathbf{s}, \mathbf{s}')$. Через ФВ $W(r, \mathbf{s})$ находится решение для пары $E, q(\mathbf{s}')$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В итоге исходная ОКЗ (6) сведена к линейному функционалу (20) и сформулирован линейно-системный подход к решению проблем дистанционного зондирования и учета вклада отражающей и излучающей сферической земной поверхности. При этом четко определено проявление нелинейных эффектов из-за многократного переотражения излучения от поверхности в формировании ”сценария”, которые описываются через линейные передаточные характеристики изолированного слоя атмосферы. Отметим, что расчеты ФВ эффективно реализуются методом Монте-Карло.

Рассмотренные в настоящей работе проблемы обусловлены интересами создания основ информационно-математической системы знаний о Земле как планете и среде обитания человеческого общества под воздействием естественных и антропогенных факторов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект №00–01–00298).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Марчук Г.И., Михайлов Г.А.* О решении задач атмосферной оптики методом Монте-Карло // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1967. Т. 3. № 3. С. 258–273.
- [2] *Марчук Г.И., Михайлов Г.А.* Результаты решения некоторых задач атмосферной оптики методом Монте-Карло // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1967. Т. 3. № 4. С. 394–401.
- [3] *Марчук Г.И., Михайлов Г.А., Назаралиев М.А., Дарбинян Р.А.* Решение прямых и некоторых обратных задач атмосферной оптики методом Монте-Карло. –Новосибирск: Наука, 1968. 100 с.
- [4] *Лаврова Н.П., Сандомирский А.Б.* Яркостные карты Земли, составленные по фотографическим данным АМС "Зонд" // Изв. вузов. Геодезия и аэрофотосъемка. 1973. № 3. С. 75–85.
- [5] *Кондратьев К.Я., Крошкин М.Г., Морачевский В.Г.* Наша планета из космоса. –Л.: Гидрометеиздат, 1964. 52 с.
- [6] *Кондратьев К.Я., Авасте О.А., Федорова М.П., Якушевская К.Е.* Поле излучения Земли как планеты. –Л.: Гидрометеиздат, 1967. 314 с.
- [7] Исследования природной среды с пилотируемых орбитальных станций / Под ред. К.Я. Кондратьева. –Л.: Гидрометеиздат, 1972. 399 с.
- [8] *Малкевич М.С.* Оптические исследования атмосферы со спутников. М.: Наука, 1973. 303 с.
- [9] *Лазарев А.И., Николаев А.Г., Хрунов Е.В.* Оптические исследования в космосе. –Л.: Гидрометеиздат, 1979. 256 с.
- [10] *Лазарев А.И., Коваленок В.В., Авакян С.В.* Исследование Земли с пилотируемых космических кораблей. –Л.: Гидрометеиздат, 1987. 400 с.
- [11] Космическое земледение: информационно-математические основы / Под ред. В.А. Садовниченко. Авторы: Козодеров В.В., Косолапов В.С., Садовнический В.А., Тимошин О.А., Тищенко А.П., Ушакова Л.А., Ушаков С.А. –М.: Изд-во МГУ, 1998. 571 с.

- [12] *Розенберг Г.В.* О сумеречных исследованиях планетных атмосфер с космических кораблей // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1965. Т. 1. № 4. С. 377–385.
- [13] *Розенберг Г.В., Николаева-Терешкова В.В.* Стратосферный аэрозоль по измерениям с космического корабля // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1965. Т. 1. № 4. С. 386–394.
- [14] *Кондратьев К.Я., Волынов Б.В., Гальцев А.П., Кольцов В.В., Смоктий О.И., Хрунов Е.В.* Некоторые результаты спектрофотометрирования сумеречного ореола земной атмосферы с космического корабля "Союз-5" // Докл. АН СССР. 1970. Т. 190. № 2. С. 327–330.
- [15] *Розенберг Г.В., Сандомирский А.Б., Сушкевич Т.А., Матешвили Ю.Д.* Исследование стратификации аэрозоля в стратосфере по программе "Союз-Аполлон" // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1980. Т. 16. № 4. С. 861–864.
- [16] *Соболев В.В., Минин И.Н.* Рассеяние света в сферической атмосфере — I // Искусственные спутники Земли. Вып. 14. —М.: Изд-во АН СССР, 1962. С. 7–12.
- [17] *Соболев В.В., Минин И.Н.* К теории рассеяния света в планетных атмосферах // Астрон. журнал. 1963. Т. 40. № 3. С. 496–503.
- [18] *Минин И.Н., Соболев В.В.* Рассеяние света в сферической атмосфере — II // Космич. исслед. 1963. Т. 1. № 2. С. 227–234.
- [19] *Минин И.Н., Соболев В.В.* Рассеяние света в сферической атмосфере — III // Космич. исслед. 1964. Т. 2. № 4. С. 610–618.
- [20] *Минин И.Н.* Об учете рефракции в задачах оптики планетных атмосфер // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1973. Т. 9. № 8. С. 829–836.
- [21] *Соболев В.В.* Рассеяние света в атмосферах планет. —М.: Наука, 1972. 335 с.
- [22] *Минин И.Н.* Теория переноса излучения в атмосферах планет. —М.: Наука, 1988. 264 с.
- [23] *Смоктий О.И.* Многократное рассеяние света в однородной сферически-симметричной планетной атмосфере // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1967. Т. 3. № 3. С. 245–257.
- [24] *Смоктий О.И.* Об определении яркости неоднородной сферически-симметричной планетной атмосферы // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1967. Т. 3. № 4. С. 384–393.

- [25] *Смоктый О.И.* Многократное рассеяние света в неоднородной сферически-симметричной планетной атмосфере // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1967. Т. 3. № 5. С. 496–506.
- [26] *Смоктый О.И.* Рассеяние света в аэрозольной сферической атмосфере // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1969. Т. 5. № 1. С. 46–61.
- [27] *Смоктый О.И.* Многократное рассеяние света в молекулярной сферической атмосфере // Вестник ЛГУ. Сер. Физика. Химия. 1969. Вып. 6. № 16. С. 78–90.
- [28] *Смоктый О.И.* О приближенном определении яркости сумеречного ореола реальной земной атмосферы в области 0.4–1.06 мкм // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1969. Т. 5. № 8. С. 782–795.
- [29] *Смоктый О.И.* Моделирование полей излучения в задачах космической спектрофотометрии. –Л.: Наука, 1986. 352 с.
- [30] *Марчук Г.И., Михайлов Г.А.* Решение задач теории переноса излучения методом Монте-Карло // Теоретические и прикладные проблемы рассеяния света. –Минск: Наука и техника, 1971. С. 43–58.
- [31] *Кондратьев К.Я., Марчук Г.И., Бузников А.А., Минин И.Н., Михайлов Г.А., Назаралиев М.А., Орлов В.М., Смоктый О.И.* Поле излучения сферической атмосферы. –Л.: Изд-во ЛГУ, 1977. 215 с.
- [32] *Михайлов Г.А., Назаралиев М.А.* Расчеты поляризации света в сферической атмосфере методом Монте-Карло // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1971. Т. 7. № 4. С. 385–395.
- [33] *Антюфеев В.С., Назаралиев М.А.* Новая модификация метода Монте-Карло для решения задач теории рассеяния света в сферической атмосфере // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1973. Т. 9. № 8. С. 820–828.
- [34] *Марчук Г.И., Михайлов Г.А., Назаралиев М.А., Дарбинян Р.А., Каргин Б.А., Елепов Б.С.* Метод Монте-Карло в атмосферной оптике. –Новосибирск: Наука, 1976. 215 с.
- [35] *Marchuk G.I., Mikhailov G.A., Nazaraliev M.A., Darbinian R.A., Kargin B.A., Elepov B.S.* Monte-Karlo Methods in Atmospheric Optics. Berlin–Heidelberg–New York: Springer–Verlag, 1980. 205 p.
- [36] *Михайлов Г.А.* Оптимизация весовых методов Монте-Карло. –М.: Наука, 1987. 240 с.

- [37] Назаралиев М.А. Статистическое моделирование радиационных процессов в атмосфере. –Новосибирск: Наука, 1990. 227 с.
- [38] Марчук Г.И. О постановке некоторых обратных задач // Докл. АН СССР. 1964. Т. 156. № 3. С. 503–506.
- [39] Марчук Г.И. Уравнение для ценности информации с метеорологических спутников и постановка обратных задач // Космич. исслед. 1964. Т. 2. Вып. 3. С. 462–477.
- [40] Марчук Г.И. Сопряженные уравнения и анализ сложных систем. –М.: Наука, 1992. 336 с.
- [41] Марчук Г.И. Сопряженные уравнения и чувствительность функционалов // Исслед. Земли из космоса. 1997. № 4. С. 100–125.
- [42] Михайлов Г.А. Об одном принципе оптимизации расчетов по методу Монте-Карло // ЖВМиМФ. 1968. Т. 8. № 5. С. 1085–1093.
- [43] Михайлов Г.А. Использование приближенных решений сопряженной задачи для улучшения алгоритмов метода Монте-Карло // ЖВМиМФ. 1969. Т. 9. № 5. С. 1145–1152.
- [44] Михайлов Г.А., Назаралиев М.А. Оптимизация оценки функциональных зависимостей методом Монте-Карло // ЖВМиМФ. 1970. Т. 10. № 3. С. 734–740.
- [45] Михайлов Г.А. Некоторые замечания об использовании сопряженных решений для улучшения алгоритмов метода Монте-Карло // Исследование операций и метод Монте-Карло. –Л.: ЛГУ, 1971. С. 112–119.
- [46] Дарбинян Р.А. Моделирование дистанционного зондирования оптически неоднородной сферической Земли // Исслед. Земли из космоса. 1998. № 3. С. 18–30.
- [47] Дарбинян Р.А. Некоторые результаты по моделированию дистанционного зондирования оптически неоднородной сферической Земли // Исслед. Земли из космоса. 1998. № 4. С. 45–55.
- [48] Сушкевич Т.А. Осесимметричная задача о распространении излучения в сферической системе / Отчет № 0–572–66. –М.: ИПМ АН СССР, 1966. 180 с.
- [49] Гермогенова Т.А., Копрова Л.И., Сушкевич Т.А. Исследование угловой, пространственной и спектральной структуры поля яркости Земли для характерной модели сферической атмосферы // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1969. Т. 5. № 12. С. 1266–1277.

-
- [50] *Сушкевич Т.А.* Об одном методе решения уравнения переноса для задач с двумерной сферической геометрией / Препринт № 15. –М.: ИПМ АН СССР, 1972. 31 с. Депонирован. № 5557–73 от 28.02.73.
- [51] *Назаралиев М.А., Сушкевич Т.А.* Расчеты характеристик поля многократно рассеянного излучения в сферической атмосфере // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1975. Т. 11. № 7. С. 705–717.
- [52] *Сушкевич Т.А., Коновалов Н.В.* Об области применимости плоской модели в задачах о многократном рассеянии излучения в земной атмосфере // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1978. Т. 14. № 1. С. 44–57.
- [53] *Сушкевич Т.А.* Об уравнении переноса в сферической геометрии с пространственной неоднородностью и рефракцией // Численное решение задач атмосферной оптики. –М.: ИПМ АН СССР, 1984. С. 138–151.
- [54] *Сушкевич Т.А., Стрелков С.А., Владимирова Е.В., Игнатъева Е.И., Куликов А.К., Максакова С.В.* Сферическая модель переноса излучения в атмосфере Земли. — I. Обзор / Препринт № 84. –М.: ИПМ РАН, 1997. 32 с.
- [55] *Сушкевич Т.А., Стрелков С.А., Владимирова Е.В., Игнатъева Е.И., Куликов А.К., Максакова С.В.* Сферическая модель переноса излучения в атмосфере Земли. — III. Постановка задачи. Метод решения / Препринт № 85. –М.: ИПМ РАН, 1997. 32 с.
- [56] *Сушкевич Т.А., Владимирова Е.В.* Сферическая модель переноса излучения в атмосфере Земли. — II. Криволинейная система координат. Характеристики уравнения переноса // Препринт № 73. –М.: ИПМ РАН, 1997. 28 с.
- [57] *Сушкевич Т.А.* О моделировании переноса солнечного излучения в сферической атмосфере Земли и облаках // Оптика атмосферы и океана. 1999. Т. 12. №3. С. 251–257.
- [58] *Сушкевич Т.А.* О решении задач атмосферной коррекции спутниковой информации // Исслед. Земли из космоса. 1999. № 6. С. 49–66.
- [59] *Авасте О.А.* Метод расчета интенсивностей и потоков уходящего излучения при сферической Земле в близкой инфракрасной области спектра // Тр. Гл. геофиз. обсерватории. 1964. Вып. 166. С. 144–151.
- [60] *Авасте О.А.* Результаты расчетов интенсивностей и потоков уходящего излучения при сферической Земле в близкой инфракрасной области спектра // Тр. Гл. геофиз. обсерватории. 1964. Вып. 166. С. 152–172.

-
- [61] *Авасте О.А., Дарбинян Р.А.* Поле яркости сферической Земли в близкой инфракрасной области спектра // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1975. Т. 11. № 10. С. 1030–1037.
- [62] *Титарчук Л.Г.* Рассеяние света в сферической многослойной атмосфере / Препринт № 53. –М.: ИКИ АН СССР, 1971. Депониров. Астр. 2762.71.
- [63] *Титарчук Л.Г.* Перенос излучения в однослойной сферической атмосфере планеты // Космич. исследов. 1972. Т. 10. № 6. С. 905–915.
- [64] *Титарчук Л.Г.* Перенос излучения в сферической многослойной атмосфере планеты // Космич. исследов. 1973. Т. 11. № 1. С. 130–139.
- [65] *Титарчук Л.Г.* Рассеяние света в сферической многослойной атмосфере // Космическая иконика. –М.: Наука, 1973. С. 72–105.
- [66] *Минин И.Н.* Теория рассеяния света в связи с некоторыми астрофизическими применениями. Дисс... докт. физ.-мат. наук. Ленинград, 1966.
- [67] *Смоктый О.И.* Многократное рассеяние света в сферической планетной атмосфере. Дисс... канд. физ.-мат. наук. Ленинград, 1967.
- [68] *Михайлов Г.А.* Статистическое моделирование процессов переноса излучения в атмосфере. Дисс... докт. физ.-мат. наук. Новосибирск, 1971.
- [69] *Сушкевич Т.А.* Исследование поля яркости сферической атмосферы. Дисс... канд. физ.-мат. наук. Москва, 1972.
- [70] *Сушкевич Т.А.* Математическое моделирование и численное решение задач космической атмосферной оптики. Дисс... докт. физ.-мат. наук. Москва, 1988.
- [71] *Титарчук Л.Г.* Рассеяние солнечного излучения в многослойной сферической планетной атмосфере. Дисс... канд. физ.-мат. наук. Москва, 1972.
- [72] *Назаралиев М.А.* Использование метода Монте-Карло для расчетов интенсивности и поляризации света в сферической атмосфере. Дисс... канд. физ.-мат. наук. Новосибирск, 1973.
- [73] *Назаралиев М.А.* Численное исследование радиационных полей в атмосфере методом Монте-Карло. Дисс... докт. физ.-мат. наук. Новосибирск, 1985.
- [74] *Антюфеев В.С.* Решение некоторых стохастических задач атмосферной оптики методом Монте-Карло. Дисс... канд. физ.-мат. наук. Новосибирск, 1977.

-
- [75] *Антюфеев В.С.* Решение обратных задач переноса излучения методом Монте-Карло. Дисс. . . докт. физ.-мат. наук. Новосибирск, 1997.
- [76] *Lenoble J., Sekera Z.* Equation of radiative transfer in a planetary spherical atmosphere // *Proceed. Nat. Acad. Sci. USA.* 1961. Vol. 47. № 3. P. 372–378.
- [77] *Kattawar G.W., Plass G.N.* Radiation and polarization of multiple scattered light from haze and clouds // *Appl. Opt.* 1968. Vol. 7. № 8. P. 1519–1527.
- [78] *Collins D.G., Blattner W.G., Wells M.B. and Horak H.G.* Backward Monte Carlo calculations of the polarization characteristics of the radiation emerging from spherical-shell atmosphere // *Appl. Opt.* 1972. Vol. 11. № 11. P. 2684–2696.
- [79] *Kattawar G.W., Plass G.N.* Degree and direction of polarization in multiple scattered light: II. Earth's atmosphere with aerosols // *Appl. Opt.* 1972. Vol. 11. № 11. P. 2866–2879.
- [80] *Adams C.N., Kattawar G.W.* Radiative transfer in spherical shell atmospheres: I. Rayleigh Scattering // *Icarus.* 1978. Vol. 35. № 1. P. 139–151.
- [81] *Kattawar G.W., Adams C.N.* Radiative transfer in spherical shell atmospheres: II. Asymmetric phase functions // *Icarus.* 1978. Vol. 35. № 3. P. 436–449.
- [82] Перенос радиации в рассеивающих и поглощающих атмосферах. Стандартные методы расчета / Под ред. Ж. Ленобль. –Л.: Гидрометеиздат, 1990. 263 с.
- [83] *Whitney C.* Implications of a quadratic stream definition in radiative transfer theory // *J. Atmos. Sci.* 1972. Vol. 29. № 8. P. 1520–1530.
- [84] *Whitney C.* Efficient stream distributions in radiative transfer theory // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 1974. Vol. 14. P. 591–611.
- [85] *Bellman R.E., Kagiwada H.H., Kalaba R.E.* Invariant imbedding and radiative transfer in spherical shells // *J. Comp. Phys.* 1966. Vol. 1. P. 245–256.
- [86] *Bellman R.E., Kagiwada H.H., Kalaba R.E., Ueno S.* Diffuse reflection of solar rays by a spherical shell atmosphere // *Icarus.* 1969. Vol. 11. P. 417–423.
- [87] *Gruschinske J., Ueno S.* Bellman's new approach to the numerical solution of the auxiliary equation in a spherical medium // *Publ. Astron. Soc. Japan.* 1971. Vol. 22. P. 365–371.
- [88] *Розенберг Г.В.* Сумерки. –М.: ГИФМЛ, 1963. 380 с.

-
- [89] *Чандрасекар С.* Перенос лучистой энергии / Перев. с англ. под ред. Е.С. Кузнецова. –М.: ИИЛ, 1953. 431 с.
- [90] *Кузнецов Е.С.* Лучистое равновесие газовой оболочки, окружающей абсолютно черную сферу // Изв. АН СССР. Серия геофиз. 1951. № 3. С. 69–93.
- [91] *Владимиров В.С.* Численное решение кинетического уравнения для сферы // Вычислит. матем. Вып. 3. –М.: Изд-во АН СССР, 1958. С. 3–33.
- [92] *Фесенков В.Г.* Строение атмосферы (фотометрический анализ сумерек) // Тр. Гл. Российской астрофиз. обсерватории. 1923. Т. 2. С. 7–123.
- [93] *Штауде Н.М.* Фотометрические наблюдения сумерек как метод изучения верхней стратосферы // Тр. Комиссии по изучению стратосферы при АН СССР. / Под ред. С.И. Вавилова. Т. 1. М.–Л.: Изд-во АН СССР, 1936. С. 1–162.
- [94] *Розенберг Г.В.* О новом явлении в рассеянном свете сумеречного неба // Докл. АН СССР. 1942. Т. 36. № 9. С. 288–293.
- [95] *Розенберг Г.В.* Особенности поляризации света, рассеянного атмосферой в условиях сумеречного освещения. Дисс... канд. физ.-мат. наук. Москва, 1946.
- [96] *Штауде Н.М.* Основы упрощенной теории сумеречных явлений // Изв. АН СССР. Серия географ. и геофиз. 1947. Т. 11. № 4. С. 349–370.
- [97] *Хвостиков И.А., Розенберг Г.В., Юдалевич Ф.Ф.* Влияние многократного рассеяния на яркость сумеречного неба // Докл. АН СССР. 1948. Т. 53. № 7. С. 1277–1279.
- [98] *Розенберг Г.В.* Об измерении атмосферной рефракции // Изв. АН СССР. Сер. географ. и геофиз. 1949. Т. 13. № 5. С. 383–387.
- [99] *Фесенков В.Г.* Сумерки как метод исследования атмосферы // Изв. Астрофиз. ин-та АН КазССР. 1961. Т. 12. С. 3–14.
- [100] *Фесенков В.Г.* О поляризационном методе исследования сумеречных явлений // Астрон. журнал. 1966. Т. 43. № 1. С. 198–203.
- [101] *Мижиров А.Е., Смеркалов В.А.* Исследование рассеянного излучения верхней атмосферы Земли. –Л.: Гидрометеиздат, 1981. 208 с.
- [102] *Мегрелишвили Т.Г.* Закономерности вариаций рассеянного света и излучения сумеречной атмосферы Земли. –Тбилиси: Изд-во Мецниереба, 1981. 273 с.

- [103] Назаралиев М.А., Розенберг Г.В. Моделирование сумеречных наблюдений методом Монте-Карло // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1977. Т. 13. № 2. С. 133–143.
- [104] Розенберг Г.В., Николаева-Терешкова В.В. Стратосферный аэрозоль по измерениям с космического корабля (Тезисы) // Исследования космического пространства. –М.: Наука, 1965. С. 61.
- [105] Дривинг А.Я., Михайлин И.М., Розенберг Г.В., Сандомирский А.Б., Трифонова Г.И. Фотометрический анализ снимков ореола зари, полученных с космического корабля "Восток-6" // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1966. Т. 2. № 10. С. 1046–1054.
- [106] Альтовская Н.П., Розенберг Г.В., Сандомирский А.Б., Сушкевич Т.А. Поле яркости зари, наблюдаемой с космических кораблей // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1971. Т. 7. № 3. С. 279–290.
- [107] Розенберг Г.В., Сандомирский А.Б., Трифонова Г.И. Яркостный профиль дневного горизонта планеты Земля // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1965. Т. 1. № 12. С. 1270–1278.
- [108] Феоктистов К.П., Розенберг Г.В., Сандомирский А.Б., Сергеевич В.Н., Сонечкин Д.М. Некоторые результаты оптических наблюдений с космического корабля "Восход" // Исследования космического пространства. М.: Наука, 1965. С. 62–64.
- [109] Феоктистов К.П., Розенберг Г.В., Сандомирский А.Б., Сергеевич В.Н., Сонечкин Д.М. Некоторые результаты оптических наблюдений с борта космического корабля "Восход". Доклад на VI Сессии КОСПАР, Буэнос-Айрес, май 1965.
- [110] Розенберг Г.В., Сандомирский А.Б. Определение высотного хода коэффициента рассеяния по фотографиям дневного горизонта Земли, полученным с космического корабля "Восход" // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1967. Т. 3. № 2. С. 151–164.
- [111] Розенберг Г.В. Оптические исследования атмосферного аэрозоля // Успехи физических наук. 1968. Т. 95. № 1. С. 159–208.
- [112] Сандомирский А.Б., Розенберг Г.В., Альтовская Н.П. Фотометрический анализ снимков дневного горизонта, полученных с космического корабля "Союз-3" // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1970. Т. 6. № 10. С. 1007–1014.
- [113] Альтовская Н.П., Розенберг Г.В., Сандомирский А.Б., Сушкевич Т.А. Некоторые результаты фотометрических исследований дневного горизонта

Земли с космических кораблей "Союз-4" и "Союз-5" // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1971. Т. 7. № 6. С. 590–598.

- [114] *Розенберг Г.В., Сандомирский А.Б.* Оптическая стратификация атмосферного аэрозоля // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1971. Т. 7. № 7. С. 737–749.
- [115] *Сушкевич Т.А.* Линейно-системный подход и теория оптического передаточного оператора // Оптика атмосферы и океана. 2000. Т. 13. (в печати)
- [116] *Кадомцев Б.Б.* О функции влияния в теории переноса лучистой энергии // Докл. АН СССР. 1957. Т. 113. № 3. С. 541–543.

Dominant modes of climate variability

J. M. WALLACE

JISAO, University of Washington, Seattle
E-mail: wallace@atmos.washington.edu

INTRODUCTION

Despite the confusing array of names and acronyms in the climate literature, there are only a few natural "climate oscillations" that are generally believed have far reaching impacts on weather and climate at the earth's surface. All are related to the "energetically active regions" emphasized by G.I. Marchuk. None of these phenomena has a strongly preferred period (e.g., like the 11-year sunspot cycle): they fluctuate irregularly with a range of time scales. In this sense, the term "oscillation" is something of a misnomer.

The concept of coherent worldwide climate oscillations dates back to Sir Gilbert Walker's efforts to predict year-to-year variations in the Indian monsoon during the 1920's. Walker identified three such patterns: the North Atlantic Oscillation, the North Pacific Oscillation and the Southern Oscillation (1).

1. EL NINO / SOUTHERN OSCILLATION (ENSO)

Walker's Southern Oscillation (SO) involves a see-saw in barometric pressure between the eastern and western sides of the tropical Pacific, most pronounced at Southern Hemisphere stations such as Darwin on the western end and Tahiti, Samoa, and Easter Island on the eastern end: hence the name "Southern". Pressure is normally higher on the eastern side of the tropical Pacific than on the west side: it is this east-west pressure difference that drives the westward blowing tradewinds that extend northward across the equator. Hence, the SO may be viewed as modulating the strength of the tradewinds: above normal pressure on the east and below normal pressure on the west side of the Pacific implies stronger than normal equatorial tradewinds and vice versa. Walker's contemporary, C.E.P. Brooks discovered a close connection between the strength of the tradewinds and the intensity of the rainfall at islands in the equatorial central Pacific (2), but it wasn't until the late 1960's that Jacob Bjerknes noted and correctly interpreted the linkages between Walker's SO, the strength of the equatorial Pacific tradewinds, and the large year-to-year variations in sea surface temperatures in the eastern equatorial Pacific known in Ecuador and

Peru as "El Niño" (3). Bjerknes' most significant contribution was his recognition that ocean dynamics is critical to an understanding why this El Niño / Southern Oscillation (ENSO) phenomenon fluctuates as it does. Those ocean processes are now monitored with a network of moored buoys and simulated in ocean models with enough fidelity to provide useful forecasts out to almost a year in advance (5).

El Niño years tend to be marked by drought in Indonesia, Malaysia and Australia, Northeast Brazil, Hawaii and (less dependably) in India and parts of Africa. Rainy seasons of these years tend to be abnormally wet over Ecuador and northern Peru, southern Brazil / northern Argentina and the southern United States. Winters of El Niño years tend to be mild over Alaska, western Canada, and Mongolia and cold in the Russian Far East. During the summers, Atlantic hurricanes tend to be relatively infrequent and eastern Pacific typhoons more frequent than in normal years. Contrasting departures from normal tend to be observed in years when equatorial Pacific sea surface temperatures are below normal.

On the basis of historical records dating back to the 1870's for sea surface temperature and to the 1840's in sea-level pressure it's difficult to argue convincingly that there are any more or fewer El Niño events in the recent record than there were a century ago.

2. EL NINO-LIKE DECADE-TO-DECADE VARIABILITY

By some measures, the years since 1977 have been somewhat more "El Niño-like" than the years prior to that time: the tropical Pacific has been warmer, the tradewinds have been weaker; Alaska and western Canada have experienced milder winters (6,7,8). By many of the same measures, the epoch 1947-76 had the opposite characteristics. (9) The differences in sea surface temperature and other climatic variables between such contrasting epochs tend to be more pronounced in extratropical latitudes than they are right on the equator. In this, and in a number of other respects, the pattern of decade-to-decade variability is not perfectly identical to contrasts between El Niño and La Niña years. These subtle differences between the year-to-year and decade-to-decade patterns have been used as justification for coining the term "Pacific Decadal Oscillation" (PDO) as a label for the pattern of variability on the longer time scale (10). Once it acquired a name, it has tended to acquire an identity of its own (i.e., separate from El Niño) in the minds of those who call it by that name.

The El Niño-like variability on the decade-to-decade time scale is undoubtedly real. Knowledge of its existence of such longer term variations is helpful in interpreting the historical records of wintertime temperatures and wintertime streamflows over the affected regions. But whether such variations are predictable or even subject to diagnosis in real time remains to be seen. It is only with the benefit of hindsight that one can distinguish such "regime shifts" in the historical record.

3. NORTH ATLANTIC OSCILLATION

Sir Gilbert Walker's North Atlantic Oscillation (NAO) has proven to be a robust pattern of variability useful for interpreting wintertime climate variability over eastern North America, Europe, North Africa and the Middle East (11). Like his SO,

it involves a seesaw in sea-level pressure: in this case between the subtropical and subpolar North Atlantic. It is often represented by the pressure difference between Portugal (or the Azores) and Iceland. As in the SO, the pressure differences can be viewed as a proxy for the winds: in this case the strength of the subpolar westerlies across the Atlantic along 55°N . Pressure is almost always higher over Portugal than over Iceland. The pressure contrast and the westerlies are enhanced when pressures are above normal in Portugal and below normal in Iceland. Whenever these conditions prevail, meteorologists say that we are experiencing the "high index" phase of the NAO. Consistent with the prevalence of stronger subpolar westerlies, the high index phase of the NAO is marked by heavy rainfall (or snowfall) over Scotland and Scandinavia, mild temperatures over northern Europe. The above normal pressure over Portugal extends eastward over the Mediterranean, favoring sunny skies there, and westward to Bermuda, setting up conditions for mild southwesterly flow over the eastern U.S. The most pronounced cold spot is Labrador / Newfoundland which experiences more than its normal share of northwesterly winds from the cold Canadian interior. With that one exception, Europe and eastern North America are much more likely to experience snow and hard freezes during the low index phase of the NAO than during the high index phase (11).

4. RING-LIKE OR "ANNULAR" MODES OF VARIABILITY

Back in the 1940's Carl-Gustav Rossby and his colleagues at MIT wrote a series of articles promoting the concept of a ring-like or "annular" mode involving fluctuations in the strength of the circumpolar westerlies as they interact with the eddies. This work culminated in 1950 with publications of Namias (12), Lorenz (13) and the Gates (14), all depicting the annular mode as being characterized by fluctuations in the strength of the westerlies along 55°N . The annular mode paradigm subsequently fell out of favor for lack of evidence of coherence between the fluctuations in the Atlantic and Pacific sectors. However, it turns out to be an apt description of the dominant mode of high latitude climate variability in the Southern Hemisphere.

In a series of papers beginning in 1998, David Thompson and I have argued that Walker's NAO is the embodiment of the Northern Hemisphere annular mode, and that Walker himself might have described it as such if he'd had access to the full global data coverage that's available today (15–18). Our argument rests on the similarities between the NAO and the Southern Hemisphere annular mode (SAM), which seem too strong to be accidental. Although the winds in the Pacific sector are only weakly coupled with the NAO, we maintain that the Pacific connection is statistically significant and strong enough to impact the frequency and intensity of cold air outbreaks in western North America, in almost all of Russia (except the Far East), and in China and Japan. We believe that the connection with the Pacific sector would be stronger were it not for the competing influence of the El Niño-related variability in that region. Even as it is, the strength of the ocean-to-ocean connections in the Northern Hemisphere annular mode (NAM).

5. THE STRATOSPHERIC CONNECTION

During the cold season, and particularly during the months of January, February and March that NAO/NAM amplifies with height into the lower stratosphere. In the

“high index” phase when sea-level pressures are lower than normal in Iceland and throughout the Arctic basin as well, an abnormally strong, cold, tight counterclockwise (westerly) polar vortex prevails at the 20 km level. Poleward of 40°N ozone concentrations are substantially reduced, and there is also a reduction in the rate of upwelling of tropospheric air into the tropical stratosphere. Analogous stratosphere features are observed in connection with the SAM, but they are present only for a short interval each year around the time of the breakdown of the polar vortex in late spring.

6. RECENT TRENDS IN THE ANNULAR MODES

During the past 30-years the NAO/NAM has exhibited a pronounced trend, especially during the late winter months (January through March). Pressures have been falling over the Arctic, the westerlies at subpolar latitudes have been getting stronger, and winters over most of North America and Eurasia (poleward of 40°N) have been getting milder. For example, the interior of Siberia has warmed by as much as 5°C during the past 30-years, of which about half is attributable to the trend in the NAO/NAM. At least some of these changes are related to the decreasing incidence of high latitude blocking events which go hand in hand with the buildup and subsequent equatorward movement of cold air masses. This trend has also been marked by decreasing rainfall over the Mediterranean, the Middle East and California and increasing winter precipitation over Scotland and Scandinavia, reflected in the resurgence of some Norwegian glaciers (11, 17).

The NAO/NAM-related trends are especially pronounced in the winter stratosphere where temperatures in recent years have been dropping below -80°C, the threshold for the formation of polar stratospheric clouds which play a critical role in the chain of chemical reactions that leads to the destruction of ozone by CFC's. Hence, the trend in the NAO/NAM is contributing to the sporadic appearances of a Northern Hemisphere ozone hole in recent winters (19).

There are indications of an analogous trend in the Southern Hemisphere annular mode, but the various pieces of evidence don't fit together as well as they do for the Northern Hemisphere and the trends in the objectively analyzed wind fields and satellite observations have yet to be verified on the basis of a systematic investigation of station data.

7. WHAT CAUSES THE NAO/NAM TO VARY?

The NAO and NAM paradigms evoke different expectations concerning causality. Regardless of whatever caveats scientists may choose to attach to it, their use of the term NAO conveys the implicit message that the North Atlantic Ocean plays a central role in it. That possibility cannot be ruled out, but the existence of an analogous mode in the Southern Hemisphere and in models with no land-sea geometry whatsoever suggests the need for a more generic explanation. Scientists studying these more symmetric analogues have confirmed and elaborated Namias' hypothesis that they derive their identity from the interaction between the circumpolar westerly flow and the waves or eddies that are superimposed upon it. The eddy forcing of the mean flow constitutes a positive feedback on the mean flow, and the existence of this

positive feedback serves to enhance the variability at periods longer than a week. These interactions cause the annular modes to vary randomly on time scales ranging from weeks to months and (to a lesser extent) from year to year. Recent experiments with coupled atmosphere-ocean climate models indicate that the heat capacity of the ocean's mixed layer can serve to enhance the year-to-year and decade-to-decade components of these random fluctuations.

But what about the 30-year trends in the annular modes? Again, the possibility that slow variations the circulation of the North Atlantic is responsible cannot be ruled out at this point, but that leaves unexplained the indications of an analogous trend in the SAM. An alternative hypothesis is that human activity is changing the structure of the circulation, perhaps by changing the distribution of heating in the stratosphere and thereby systematically pushing the annular modes toward their "high index" phase. The fact that this recent trend is unprecedented in the 100+ year historical record supports the notion of a human induced signal. Recent numerical experiments by Volodin and Galin (20) suggest that stratospheric ozone depletion could have caused such trends. Another possibility, suggested by experiments of Shindell et al. (21) is that the buildup of greenhouse gases at stratospheric levels could, through wave-mean flow interactions give rise to a colder, stronger wintertime polar vortex and a strengthening of the subpolar westerlies all the way down to the earth's surface.

If the NAM reverts to its pre-1970 state it will be clear that the trends of the past 30-years were just an expression of the natural variability of the climate system, and atmosphere-ocean interaction will likely emerge as the favored explanation for them. However, if the trends in both Northern and Southern Hemisphere annular modes continue through the next decade, the case for attributing them to human activities will be quite compelling.

Regardless of what is causing them, the decade-to-decade variations in the PDO and the AO/NAM have influenced the geographical and seasonal distribution of surface temperature trends over the past 50-years. When their influences are removed by simple linear regression, the trends are more uniform and easier to interpret in terms of local thermodynamic effects. Warming prevails at almost all grid points, with larger trends over land than over the oceans. The poleward amplification of the warming and the dominance of the cold season is reduced.

References

- (1) Walker, G.T. and E.W. Bliss 1932 World Weather V. *Memoirs of the R. M. S.*, 4, 53–83
- (2) Brooks, C.E.P. and H.W. Braby 1921 The clash of the trades in the Pacific. *Quart J. R. Meteorol Soc.*, 47, 1–13
- (3) Bjerknes, J. 1969 Atmospheric teleconnections from the equatorial pacific. *Mon. Wea. Rev.*, 18, 820–829
- (5) M. Latif, D. Anderson, T. Barnett, M. Cane, R. Kleman, A. Leetmaa, J. O'Brien, and E. Schneider 1998 A review of the predictability and prediction of El Niño. *J. Geophys. Res.*, 103, 14375–14393
- (6) Trenberth, K.E., 1990 Recent observed interdecadal climate changes in the northern hemisphere. *Bull. Amer. Meteorol. Soc.*, 71, 988–993

-
- (7) Trenberth, K.E. and J.W. Hurrell 1994 Decadal atmosphere-ocean variations in the Pacific. *Clim. Dyn.* 9, 303–319
 - (8) Graham, N.E. 1994 Decadal-scale climate variability in the tropical and North Pacific during the 1970s and 1980s: Observations and model results. *Clim. Dyn.* 10, 135–162
 - (9) Zhang, Y., J.M. Wallace and D.S. Battisti 1997 ENSO-like Interdecadal Variability: 1900–93. *J. Clim.*, 10, 1004–1020
 - (10) Mantua, N.J. and S.R. Hare, Y. Zhang, J.M. Wallace, and R.C. Francis 1997 A Pacific interdecadal climate oscillation with impacts on salmon production. *Bull. Amer. Meteorol. Soc.*, 78, 1069–1079
 - (11) Hurrell, J. W. 1995 Decadal trends in the North Atlantic Oscillation region temperatures and precipitation. *Science*, 269, 676–679
 - (12) Namias, J. 1950 The index cycle and its role in the general circulation. *J. Meteorol.*, 7, 130–139
 - (13) Gates, W. L. 1950 A statistical analysis of northern hemisphere sea-level pressure patterns accompanying high and low polar pressure deficit. S. B. thesis, Mass. Inst. Tech., unpublished
 - (14) Lorenz, E.N. 1951 Seasonal and irregular variations of the Northern Hemisphere sea-level pressure profile. *J. Meteorol.*, 8, 52–59
 - (15) Thompson, D.W.J., and J.M. Wallace 1998 The Arctic Oscillation signature in the wintertime geopotential height and temperature fields. *Geophys. Res. Lett.*, 25, 1297–1300
 - (16) Thompson, D.W.J., and J.M. Wallace 2000 Annular modes in the extratropical circulation. Part I: Month-to-month variability. *J. Clim.*, 1000–1016
 - (17) Thompson, D.W.J., and J.M. Wallace and G. Hegerl 2000 Annular modes in the extratropical circulation. Part II: Trends. *J. Clim.*, 1018–1036
 - (18) Wallace, J.M. 2000 North Atlantic Oscillation / Annular Mode: Two paradigms – One Phenomenon. *Q. J. R. Met. Soc.*, in press
 - (19) Hartmann, D. L., J. M. Wallace, V. Limpasuvan, D. W. J. Thompson, and J. R. Holton 2000 Can ozone depletion and global warming interact to produce rapid climate change? *Proc. Nat. Acad. Sci.*, 97 1412–1417
 - (20) Volodin, E.M. and V. Ya. Galin 1999 Interpretation of winter warming over the Northern Hemisphere continents in 1977–1994. *J. Clim.*, 12, 2947–2955
 - (21) Shindell, D. T., R. L. Miller, G. Schmidt, and L. Pandolfo 1999 Simulation of recent northern winter climate trends by greenhouse-gas forcing. *Nature*, 399, 452–455

Математические модели в иммунологии

Математическое исследование асимптотической динамики экспериментальных вирусных инфекций

Г. А. БОЧАРОВ, И. Е. ГОЛЬДМАН
Институт вычислительной математики РАН
E-mail: bocharov@inm.ras.ru

Работа посвящена приложению дифференциальных уравнений с запаздывающим аргументом для исследования экспериментальных вирусных инфекций, в частности инфекции у мышей, вызванной вирусами лимфоцитарного хориоменингита. Проведён качественный анализ положений равновесия модели. Получены достаточные условия бифуркации периодических решений при некоторых упрощающих предположениях. Результаты теоретического исследования позволяют предположить возможность сосуществования малых по численности (т.е. ниже порога обнаружения) популяций вирусов и больших популяций клеток иммунологической памяти, а также прояснить возможность появления колебательных режимов в динамике данной вирусной инфекции.

ВВЕДЕНИЕ

Исходные принципы математического моделирования иммунного ответа и инфекционных заболеваний были сформулированы академиком Г. И. Марчуком при построении базовой модели инфекционного заболевания в 1975 году (Марчук, 1980). В модели на основе системы нелинейных дифференциальных уравнений с запаздывающим аргументом рассматривалась динамика популяций вирусов, плазматических клеток, антител и характеристики степени поражения органа-мишени. В последующих работах А. Л. Асаченкова, Л.Н. Бельх, С.М. Зуева, И.Б.Погожева, А. А. Романюхи, Н.В. Перцева, Ю. И. Скалько, Д. М. Каляева, А.С. Булдаева базовая модель использовалась для анализа разнообразных вариантов динамики вирусных и бактериальных инфекций, в частности механизмов хронизации, лечения хронических форм инфекций, исследования чувствительности тяжести вирусного гепатита к вариациям параметров вируса и организма, оптимального управления динамикой инфекций. Хотя уравнения модели описывают развитие гуморального иммунного ответа при инфекционных заболеваниях, принципы построения уравнений базовой модели отражают

универсальный подход к моделированию заболеваний. Это позволяет успешно использовать как саму модель, так и её модификации для анализа различных инфекций, например гриппа, гепатита.

Целью настоящей работы является приложение математической модели, аналогичной по структуре уравнений базовой модели, для исследования динамики цитотоксического Т-клеточного иммунного ответа при экспериментальных инфекциях мышей, вызванных вирусами лимфоцитарного хориоменингита. Данная экспериментальная система является базовой в современной иммунологии. Открытие принципа двойного распознавания П. Дохерти и Р. Цинкернагелем в 1975 году, удостоенными Нобелевской премии 1996 года, было связано с изучением механизмов разрушения клеток, зараженных вирусами лимфоцитарного хориоменингита, Т-лимфоцитами-киллерами ($CD8^+$ T cells). Целью данного исследования является качественный анализ условий существования и устойчивости положений равновесия и периодических решений в модели экспериментальной вирусной инфекции.

1. УРАВНЕНИЯ МОДЕЛИ

Перейдем к описанию математической модели реакции Т-клеток на инфекцию, вызванную вирусами лимфоцитарного хориоменингита (ВЛХМ). Математическая модель рассматривает взаимодействия между популяциями вируса, $V(t)$, цитотоксических Т-лимфоцитов-предшественников, $E_p(t)$, цитотоксических Т-лимфоцитов-эффекторов, $E(t)$, и суммарной вирусной нагрузкой, $W(t)$. Модель сформулирована в виде системы нелинейных дифференциальных уравнений с запаздыванием и имеет следующий вид:

$$\frac{dV(t)}{dt} = \beta V(t) \left(1 - \frac{V(t)}{V_{max}} \right) - \gamma_{VE} E(t) V(t), \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \frac{dE_p(t)}{dt} = & \alpha_{E_p} (E_p^* - E_p(t)) + g_p(W) b_p V(t - \tau) E_p(t - \tau) \\ & - \alpha_{AP} V(t - \tau_A) V(t) E_p(t), \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{dE(t)}{dt} = & g_e(W) b_d V(t - \tau) E_p(t - \tau) - b_{EV} V(t) E(t) \\ & - \alpha_{AE} V(t - \tau_A) V(t) E(t) - \alpha_E E(t), \end{aligned} \quad (3)$$

$$\frac{dW(t)}{dt} = b_w V(t) - \alpha_w W(t). \quad (4)$$

Уравнение (1) для популяции вируса описывает прирост популяции вирусов при их размножении и удаление вирусов из организма за счет разрушения инфицированных клеток Т-лимфоцитами-эффекторами. Уравнение (2) для популяции лимфоцитов-предшественников учитывает поддержание гомеостаза лимфоцитов-предшественников в отсутствие иммунной реакции организма, увеличение числа лимфоцитов-предшественников за счет вызванной вирусом пролиферации клеток (образование в результате деления) и убыль популяции

лимфоцитов-предшественников вследствие их гибели путем апоптоза, вызванной повторной стимуляцией антигенами вируса.

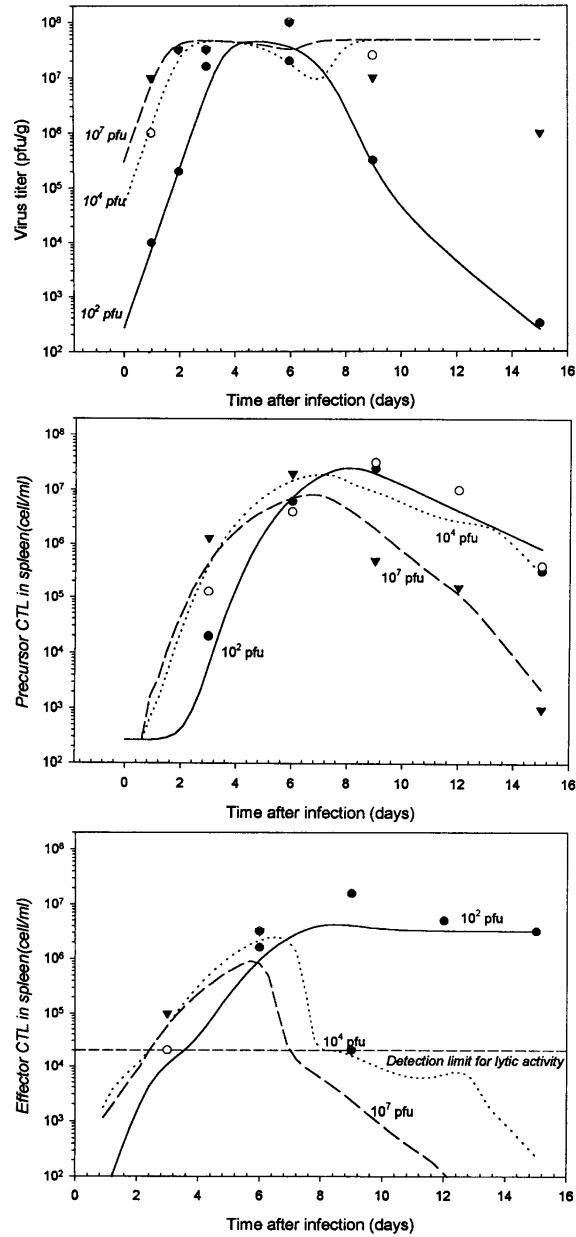


Рис.1. Решения модели, описывающие динамику инфекции при малых и больших дозах заражения

Уравнение (3) для Т-лимфоцитов-эффекторов описывает увеличение популяции эффекторов за счет дифференцировки стимулированных Т-лимфоцитов-

предшественников и уменьшение популяции эффекторов вследствие литического взаимодействия с зараженными клетками, естественного старения и апоптоза. Последнее уравнение (4) для суммарной вирусной нагрузки рассматривает увеличение антигенной нагрузки за счет распространения вируса в организме и исчезновение со временем подавляющего эффекта суммарной вирусной нагрузки. Запаздывания в уравнениях (1)–(4) связаны с длительностью цикла дифференцировки клеток и их ”программированной” гибели. Функции $g_p(W)$ и $g_E(W)$ учитывают эффект подавления процессов деления и дифференцировки вирус-специфических Т-лимфоцитов, обусловленный большой вирусной нагрузкой, и представляют собой следующие аналитические зависимости:

$$g_p(W) = \frac{1}{(1 + W/\theta_p)^2}, \quad g_E(W) = \frac{1}{(1 + W/\theta_E)^2}. \quad (5)$$

Значения параметров, используемых в представленной модели, приведены в таблице. Они были оценены в работе (Bocharov, 1998) из экспериментальных источников по данным инфекции ВЛХМ-Docile, протекающей у мышей линии C57BL/6 (Moskophidis и др.,1993). Решения модели, описывающие динамику инфекции при малых и больших дозах заражения, представлены на рис. 1.

2. ИССЛЕДОВАНИЕ СТАЦИОНАРНЫХ РЕШЕНИЙ

Применим математическую модель (1)–(4) для теоретического анализа равновесных состояний между вирусом и иммунной системой организма, соответствующих: а) Т-клеточной иммунологической памяти; б) хронической инфекции и Т-клеточной толерантности (отсутствие реакции иммунной системы на данный вирус). К системе уравнений (1)–(4), описывающей противовирусный Т-клеточный ответ, необходимо добавить неотрицательные начальные условия: $V(0) = V^0$, $E_p(0) = E_p^0$, $E(0) = E^0$, $W(0) = W^0$; $V(s)E_p(s) = \varphi(s)$. Коэффициенты системы уравнений (1)–(4) предполагаются положительными.

В общем случае нелинейная система (1)–(4) может иметь несколько положений равновесия, которые мы обозначим:

$$X_{st,i} = [V_{st,i}, E_{pst,i}, E_{st,i}, W_{st,i}]^T, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (6)$$

Это множество можно разделить на два типа стационарных состояний: одно так называемое состояние здорового организма ($i = 1$, $V_{st,1} = 0$) и другие, соответствующие состоянию хронически инфицированного организма ($i \geq 2$, $V_{st,i} \neq 0$).

Качественный анализ модели связан с исследованием условий существования стационарных решений, их асимптотической устойчивости, а также условий возникновения периодических решений.

2.1. СОСТОЯНИЕ ЗДОРОВОГО ОРГАНИЗМА

Рассмотрим стационарное решение, которое описывает состояние ”наивного” организма, то есть организма, который никогда ранее не контактировал с данным вирусом и, таким образом, не имеет к нему иммунитета:

$$X_{st,1} = [0, E_p^*, 0, 0]^T. \quad (7)$$

Здесь концентрации популяций вируса и Т-клеток-эффекторов, а также антигенная нагрузка равны нулю, а количество клеток-предшественников E_p определяется их поступлением из тимуса. Это тривиальное стационарное решение $X(t) = X_{st,1}$, $t > 0$, является неустойчивым, поскольку малые возмущения состояния равновесия (7), $V = y_1$, $E_p = y_2 + E_p^*$, $E = y_3$, $W = y_4$, описываются системой уравнений такой, что $\frac{dy_1}{dt} = \beta y_1$. Производная $\frac{dy_1}{dt}$ всегда больше нуля (по биологическому смыслу $y_1 > 0$), и, следовательно, состояние равновесия неустойчиво.

Биологическое следствие 1. Таким образом, независимо от концентрации лимфоцитов-предшественников, в отсутствие Т-лимфоцитов-эффекторов, состояние здорового организма является неустойчивым. Чем больше популяция клеток предшественников, тем меньше необходимо времени для образования достаточного числа Т-лимфоцитов-эффекторов и, следовательно, тем ниже будет максимальная концентрация популяции вируса (рис. 2).

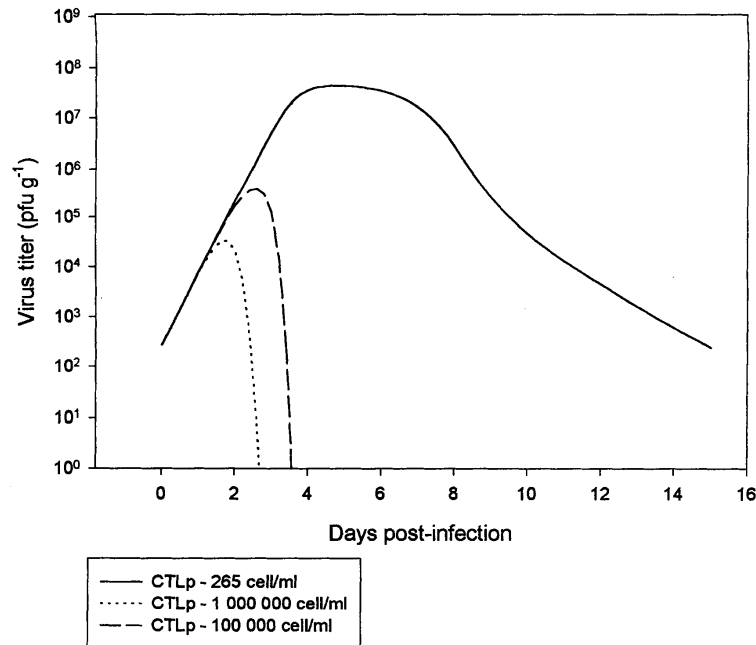


Рис.2. Динамика изменения концентрации вируса

Пороговое число клеток-эффекторов в селезенке, необходимое для предотвращения роста инфекции, определяется следующим образом: $E_{protection} = \frac{\beta}{\gamma_{VE}}$. Для параметров, соответствующих инфекции ВЛХМ-Docile мышей линии C57BL/6, это дает оценку порядка $2.5 \cdot 10^5$ клеток на селезенку.

Параметры модели

Параметр	Определение	Размерность	Область допустимых значений	Наилучшая оценка
β	Константа скорости репликации вируса	сутки ⁻¹	3 - 4	3.35
γ_{VE}	Константа скорости удаления вируса ЦТЛ-эффекторами	мл клетк. ⁻¹ сутки ⁻¹	$10^{-5} - 10^{-4}$	$0,134 \cdot 10^{-5}$
V^{max}	Максимальная концентрация вируса в селезенке	част. мл ⁻¹	$10^7 - 10^9$	$0,482 \cdot 10^8$
τ	Средняя продолжительность деления клетки	сутки	0,3 - 1	0,6
b_p	Константа скорости стимуляции ЦТЛ-предшественников	мл част. ⁻¹ сутки ⁻¹	$10^{-5} - 10^{-4}$	$0,773 \cdot 10^{-4}$
b_d	Константа скорости дифференцирования ЦТЛ-предшественников	мл част. ⁻¹ сутки ⁻¹	$10^{-5} - 10^{-4}$	$0,773 \cdot 10^{-3}$
θ_p	Пороговое значение вирусной нагрузки, вызывающее состояние анэргии у ЦТЛ-предшественников	част. мл ⁻¹	$10^7 - 10^9$	$3.25 \cdot 10^6$
θ_E	Пороговое значение вирусной нагрузки, вызывающее состояние анэргии у ЦТЛ-эффекторов	част. мл ⁻¹	$10^7 - 10^9$	$3 \cdot 10^5$
b_{EV}	Константа скорости гибели ЦТЛ-эффекторов за счет литического взаимодействия с инфицированными клетками	мл част. ⁻¹ сутки ⁻¹	-	0
α_{EP}	Обратная величина среднего времени жизни ЦТЛ-предшественников	сутки ⁻¹	0,3-0,003	0,542
α_E	Обратная величина среднего времени жизни ЦТЛ-эффекторов	сутки ⁻¹	0,33-0,5	0,01
E_p^*	Гомеостатическая концентрация специфических ЦТЛ-предшественников в селезенке <i>наивной</i> мыши	клетк. мл ⁻¹	$5 \cdot \{10^1 - 10^2\}$	265
τ_A	Продолжительность программирования активированных ЦТЛ на гибель	сутки	3 - 7	5.6
α_{AP}	Константа скорости гибели ЦТЛ-предшественников путем апоптоза	(мл част. ⁻¹) ² сутки ⁻¹	$10^{-18} - 10^{-14}$	$0,75 \cdot 10^{15}$
α_{AE}	Константа скорости гибели ЦТЛ-эффекторов путем апоптоза	(мл част. ⁻¹) ² сутки ⁻¹	$10^{-18} - 10^{-14}$	$0,436 \cdot 10^{-13}$
b_w	Константа скорости увеличения вирусной нагрузки	сутки ⁻¹	1	1
α_w	Константа скорости восстановления нормального отклика ЦТЛ	сутки ⁻¹	0,1	0,11

2.2. Состояние иммунной памяти с малой популяцией персистирующих вирусов

Перейдем теперь к изучению стационарных состояний, характеризующихся одновременным присутствием вируса и популяций Т-клеток. Сначала рассмот-

рим случай низкой концентрации вируса, то есть

$$V_{st} \ll \min \left(\frac{\alpha_w \cdot \theta_p}{\beta_w}, \frac{\alpha_w \cdot \theta_E}{\beta_w} \right) \rightarrow g_p(W_{st}) = 1, g_E(W_{st}) = 1. \quad (8)$$

В модели было сделано предположение, что киллерная функция Т-лимфоцитов-эффекторов не укорачивает их жизнь и, следовательно, константа скорости гибели Т-лимфоцитов-эффекторов за счет литического взаимодействия, b_{EV} , полагается равной нулю. Уравнение для V_{st} выглядит следующим образом:

$$G(V_{st}) \equiv A \cdot V_{st}^5 - B \cdot V_{st}^4 + C \cdot V_{st}^3 - D \cdot V_{st}^2 + H \cdot V_{st} - F = 0, \quad (9)$$

где

$$\begin{aligned} A &= \alpha_{AE} \alpha_{AP} \beta, \\ B &= \alpha_{AE} \alpha_{AP} \beta V_{max} + \alpha_{AE} \beta b_p \simeq \alpha_{AE} \beta b_p \\ C &= \alpha_{AE} b_p \beta V_{max} + \alpha_{AE} \alpha_{E_p} \beta + \beta \alpha_E \alpha_{AP} \simeq \beta \alpha_E \alpha_{AP} \\ D &= \alpha_{AE} \alpha_{E_p} \beta V_{max} + \alpha_E \alpha_{AP} \beta V_{max} + \alpha_E \beta b_p \simeq \alpha_E \beta b_p \\ H &= \alpha_E \beta b_p V_{max} + \alpha_E \alpha_{E_p} \beta + \gamma_{VE} \alpha_{E_p} b_d E_p^* V_{max} \simeq \alpha_E \beta b_p V_{max} \\ F &= \alpha_E \alpha_{E_p} \beta V_{max}. \end{aligned}$$

Приближенные формулы для коэффициентов уравнения (9) справедливы для допустимых значений параметров из таблицы.

При условии (8) решение уравнения (9) единственно (функция $G(V_{st})$, определенная уравнением (9), является монотонно возрастающей по V_{st}) и лежит в области значений V_{st} , когда слагаемыми в уравнении (9) V_{st}^n со степенью $n \geq 2$ можно пренебречь. Отбрасывая указанные члены, находим

$$V_{st} \simeq \frac{F}{H} = \frac{\alpha_E \alpha_{E_p} \beta V_{max}}{\alpha_E b_p \beta V_{max} + \alpha_E \alpha_{E_p} \beta + \gamma_{VE} \alpha_{E_p} b_d E_p^* V_{max}}. \quad (10)$$

В результате положение равновесия системы (1)-(4), $X_{st} = [V_{st}, E_{p,st}, E_{st}, W_{st}]^T$, выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} V_{st} &= \frac{\alpha_E \alpha_{E_p} \beta V_{max}}{\alpha_E b_p \beta V_{max} + \alpha_E \alpha_{E_p} \beta + \gamma_{VE} \alpha_{E_p} b_d E_p^* V_{max}}, \\ E_{p,st} &= \frac{\alpha_{E_p} E_p^*}{\alpha_{E_p} - b_p V_{st} + \alpha_{AP} V_{st}^2}, \\ E_{st} &= \frac{\beta}{\gamma_{VE}} \cdot \left(1 - \frac{V_{st}}{V_{max}} \right), \\ W_{st} &= \frac{b_w V_{st}}{\alpha_w}. \end{aligned} \quad (11)$$

Если подставить V_{st} , определяемое формулой (11), в выражение (9) для $E_{p,st}$, то легко убедиться, что $\alpha_{E_p} - b_p V_{st} > 0$, и, таким образом, выполняется требование положительности $E_{p,st}$.

Введем дополнительное ограничение на вид уравнений модели, а именно, будем считать $\tau = 0$. Определим условия асимптотической устойчивости стационарного решения (11). Для этого линеаризуем нашу систему (1)-(4) в окрестности этого решения и рассмотрим полученное характеристическое уравнение:

$$T(\lambda) = -(\alpha_E + \lambda) \cdot Z(\lambda), \quad (12)$$

где

$$Z(\lambda) = -\lambda^3 - a\lambda^2 - b\lambda - d + (g\lambda + f)\exp(-\lambda\tau_A), \quad (13)$$

$$a = \frac{\beta V_{st}}{V_{max}} - b_p V_{st} + \alpha_{E_p} + \alpha_E + V_{st}^2 \alpha_{AP} + V_{st}^2 \alpha_{AE} > 0, \quad (14)$$

$$b = \frac{\beta V_{st}}{V_{max}} (\alpha_{E_p} - b_p V_{st} + V_{st}^2 \alpha_{AP} + \alpha_E + V_{st}^2 \alpha_{AE}) + \gamma_{VE} V_{st} (b_d E_{p,st} - V_{st} E_{st} \alpha_{AE}),$$

$$d = \frac{\beta V_{st}}{V_{max}} (\alpha_{E_p} - b_p V_{st} + V_{st}^2 \alpha_{AP}) \cdot (\alpha_E + V_{st}^2 \alpha_{AE}) \quad (15)$$

$$+ \gamma_{VE} V_{st} (b_d E_{p,st} - V_{st} E_{st} \alpha_{AE}) \cdot (\alpha_{E_p} - b_p V_{st} + V_{st}^2 \alpha_{AP}) \quad (16)$$

$$+ \gamma_{VE} b_d V_{st}^2 (b_p E_{p,st} - V_{st} E_{st} \alpha_{AP}) > 0,$$

$$g = \gamma_{VE} V_{st}^2 E_{st} \alpha_{AE} > 0, \quad (17)$$

$$f = \gamma_{VE} V_{st}^2 E_{st} \alpha_{AE} (\alpha_{E_p} - b_p V_{st} + V_{st}^2 \alpha_{AP}) + \gamma_{VE} V_{st}^3 E_{p,st} \alpha_{AP} b_d > 0.$$

Так как $T(\lambda)$ имеет отрицательный корень $\lambda_1 = -\alpha_E < 0$, то остается исследовать корни квазиполинома $Z(\lambda)$. Подставим $\lambda = i\omega$ в выражение для $Z(\lambda)$ и рассмотрим $Z(i\omega) = \text{Re}Z(i\omega) + i\text{Im}Z(i\omega)$, где

$$\text{Re}Z(i\omega) = a\omega^2 - d + f \cos \omega\tau_A + g\omega \sin \omega\tau_A, \quad (18)$$

$$\text{Im}Z(i\omega) = \omega^3 - b\omega + g\omega \cos \omega\tau_A - f \sin \omega\tau_A. \quad (19)$$

Нам также понадобятся производные этих функций по ω :

$$\frac{d \text{Re}Z(i\omega)}{d\omega} = 2a\omega + (g - f\tau_A) \sin \omega\tau_A + g\omega\tau_A \cos \omega\tau_A, \quad (20)$$

$$\frac{d \text{Im}Z(i\omega)}{d\omega} = 3\omega^2 - b + (g - f\tau_A) \cos \omega\tau_A - g\omega\tau_A \sin \omega\tau_A. \quad (21)$$

Известна (Резван, 1983) следующая

Лемма 1 (критерий Михайлова). *Характеристический квазиполином третьей степени $Z(\lambda)$ не будет иметь корней в правой полуплоскости, если полное приращение его аргумента при изменении ω от нуля до бесконечности равно $3\pi/2$.*

По аналогии с исследованием Бельх (1982, с. 14–16), в нашем случае критерий Михайлова сводится к следующей теореме.

Теорема 1. *Достаточным условием асимптотической устойчивости стационарного решения (11) задачи (1)–(4) является выполнение неравенств*

$$d - f > 0, \quad (22)$$

$$\frac{d + f}{a - g\tau_A} < b - g - f\tau_A. \quad (23)$$

Доказательство. Во-первых, покажем, что $a - g\tau_A > 0$. Подставляя значения коэффициентов a и g из (14), (17) и, учитывая, что $\alpha_{E_p} - b_p V_{st} > 0$, получим

$$a - g\tau_A > \frac{\beta V_{st}}{V_{max}} (1 - V_{max} V_{st} \alpha_{AE} \tau_A) > 0. \quad (24)$$

Для доказательства теоремы 1. нам нужно определить характер движения вектора $Z(i\omega)$ на комплексной плоскости при изменении ω от нуля до бесконечности.

Если $\omega = 0$ (точка ω_1), то в силу (22) получаем $\operatorname{Re} Z = f - d < 0$, $\frac{d\operatorname{Re} Z}{d\omega} = 0$, а из (23) видно, что $\frac{d\operatorname{Im} Z}{d\omega} = -b + g - f\tau_A < 0$. При $\omega > 0$ с учетом того, что $f\tau_A < g$, и замены $\sin \omega\tau_A \mapsto -\omega\tau_A$, $\cos \omega\tau_A \mapsto -1$, мы получим из (24) следующую цепочку неравенств: $\frac{d\operatorname{Re} Z}{d\omega} > \omega[2a + (f\tau_A - g)\tau_A - g\tau_A] = \omega[2(a - g\tau_A) + f\tau_A] > 0$. Следовательно, в силу непрерывности $\operatorname{Re} Z$ существует единственная точка $\omega = \omega_2 > 0$, для которой $\operatorname{Re} Z = 0$.

Заметим, что из условий $\operatorname{Re} Z(i\omega_2) = 0$, (18) и (24) следуют неравенства

$$\omega_2^2 < \frac{d + f}{a - g\tau_A} < b - g - f\tau_A.$$

Итак, при $\omega < \omega_2$ мы имеем $\operatorname{Re} Z < 0$, а $\operatorname{Im} Z < \omega(\omega_2^2 - b + f - f\tau_A)$.

Таким образом, при изменении ω от нуля до ω_2 мы имеем $\operatorname{Re} Z \leq 0$ и $\operatorname{Im} Z < 0$. Более того, равенство $\operatorname{Re} Z = 0$ возможно только при $\omega = \omega_2$. Следовательно, вектор $Z(i\omega)$ опишет при этих условиях угол, равный $\pi/2$.

Пусть $\omega > \omega_2$. При $\omega \rightarrow +\infty$ имеем $\operatorname{Im} Z > 0$. В силу непрерывности $\operatorname{Im} Z$ и условия $\operatorname{Im} Z < 0$, при $\omega > \omega_2$ существует хотя бы одно значение $\omega = \omega^* > \omega_2$, для которого $\operatorname{Im} Z = 0$. Пусть $\omega = \omega_3 > \omega_2$ — точка, в которой впервые выполнилось равенство $\operatorname{Im} Z = 0$. Поскольку для всех $\omega > \omega_1$, $\frac{d\operatorname{Re} Z}{d\omega} > 0$, то это значит, что вектор $Z(i\omega)$ опишет угол, равный $\pi/2$ при изменении ω от ω_2 до ω_3 .

При $\omega \rightarrow +\infty$, функция $\operatorname{Im} Z$ является положительной и растет быстрее, чем $\operatorname{Re} Z$, причем рост $\operatorname{Re} Z$ более чем линейный. В силу $\frac{d\operatorname{Re} Z}{d\omega} > 0$, при $\omega > 0$ вектор $Z(i\omega)$ не пересечет мнимую ось при $\omega \rightarrow +\infty$. Эти условия обеспечивают приращение аргумента $Z(i\omega)$, равное $\pi/2$, при изменении ω от ω_3 до бесконечности. Таким образом, в целом вектор $Z(i\omega)$ опишет угол, равный $3\pi/2$, при изменении ω от нуля до бесконечности. А по лемме 1, это означает, что характеристический квазиполином $Z(\lambda)$ (13) не будет иметь корней в правой полуплоскости и, следовательно, стационарное решение (11) асимптотически устойчиво, что и требовалось доказать.

Неравенства (22) и (23) задают множество значений параметров модели, при которых стационарное решение устойчиво. Легко убедиться, что это множество

включает в себя значения параметров из таблицы, соответствующие экспериментальной системе {ВЛХМ-Docile + C57BL/6}.

Биологическое следствие 2. Модель допускает существование устойчивого стационарного состояния, описывающего Т-клеточную иммунологическую память. Воспользуемся численными значениями для параметров модели (см. таблицу), чтобы получить количественные оценки значений компонент положения равновесия. Время жизни популяции лимфоцитов-предшественников оценивалось по экспериментальным данным для обычных и истощающихся реакций Т-клеток при инфекции ВЛХМ-Docile . Устойчивая персистенция клеток памяти характеризуется скоростями обновления (скоростями гибели или рождения в равновесном состоянии) от 1 месяца до 1 года (Freitas & Rocha, 1993; Sprent & Tough, 1994; Zimmermann и др., 1996). Следовательно, численный анализ стационарного состояния (11) должен быть проведен, используя следующую область значений для α_{E_p} : $\alpha_{E_p} \sim 0,003 - 0,03$ сутки⁻¹. Это дает:

$$\begin{aligned} V_{st} &\sim 4 - 40 \text{ вируса/мл,} \\ E_{p,st} &\sim 8.3 \cdot (10^3 - 10^4) \text{ клетка/мл,} \\ E_{st} &\sim 2.5 \cdot 10^5 \text{ клетка/мл.} \end{aligned}$$

Эти оценки означают, что ВЛХМ действительно может персистировать на низком уровне, порядка 10 вирусов на селезенку у иммунной мыши, если время обновления популяции Т-лимфоцитов-предшественников памяти около 100 дней. С другой стороны, такая малая популяция вируса обеспечивает достаточную стимуляцию для поддержания популяции клеток памяти численно устойчивой и, таким образом, препятствует постепенному истощению пула клеток памяти. Благодаря сосуществованию малой популяции вируса и клеток памяти повторная инфекция ВЛХМ в организме не будет распространяться, то есть имеет место классический иммунитет.

2.3. ХРОНИЧЕСКАЯ ИНФЕКЦИЯ С БОЛЬШОЙ ВИРУСНОЙ НАГРУЗКОЙ

Хроническая инфекция вируса может привести к исчезновению у животного вирус-специфических Т-клеток. Кинетика этого явления изучалась как экспериментально, так и теоретически (Wodarz и др., 1998; Hansen & De Boer, 1999) . Применим вышеописанную модель для анализа хронической вирусной инфекции, которая устанавливается после истощения Т-клеток и характеризуется высокой вирусной нагрузкой и числом Т-клеток ниже порога обнаружения. Это отвечает случаю с

$$\begin{aligned} V_{st} \gg \max \left(\frac{\alpha_w \theta_p}{b_w}, \frac{\alpha_w \theta_E}{b_w} \right) &\rightarrow g_p(W^{st}) \sim \frac{\theta_p^2}{(W^{st})^2}, \\ g_E(W^{st}) &\sim \frac{\theta_E^2}{(W^{st})^2}. \end{aligned} \quad (25)$$

Получим следующее уравнение для V_{st} :

$$G_B(V_{st}) = A' \cdot V_{st}^6 - B' \cdot V_{st}^5 + C' \cdot V_{st}^4 - D' \cdot V_{st}^3 + H' \cdot V_{st}^2 - F' \cdot V_{st} + Q', \quad (26)$$

где

$$\begin{aligned}
A' &= \alpha_{AE}\alpha_{AP}, \\
B' &= \alpha_{AE}\alpha_{AP}V_{max}, \\
C' &= \alpha_{AE}\alpha_{E_p} + \alpha_E\alpha_{AP}, \\
D' &= \alpha_{AE}\alpha_{E_p}V_{max} + \alpha_E\alpha_{AP}V_{max} + \frac{\alpha_{AE}\beta b_p \theta_p^2 \alpha_w^2}{b_w^2}, \\
H' &= \frac{\alpha_{AE}b_p V_{max} \theta_p^2 \alpha_w^2}{b_w^2} + \alpha_E\alpha_{E_p}, \\
F' &= \alpha_E\alpha_{E_p}V_{max} + \frac{\alpha_E b_p \theta_p^2 \alpha_w^2}{b_w^2}, \\
Q' &= \frac{\alpha_E b_p V_{max} \theta_p^2 \alpha_w^2}{b_w^2} + \frac{1}{\beta b_w^2} \gamma_{VE} V_{max} E_p^* \alpha_{AP} b_d \theta_e^2 \alpha_w^2.
\end{aligned}$$

Если учесть, что $\frac{1}{\beta b_w^2} \gamma_{VE} V_{max} E_p^* \alpha_{AP} b_d \theta_e^2 \alpha_w^2 \ll \frac{\alpha_E b_p V_{max} \theta_p^2 \alpha_w^2}{b_w^2}$ в выражении для свободного члена и пренебречь этим слагаемым, то легко увидеть, что корнем уравнения (26) является $V_{st} = V_{max}$. Можно показать, что в искомом диапазоне (25) существует еще один корень, но он не удовлетворяет условию: $\alpha_{E_p} V_{st} - \frac{b_p \theta_p^2 \alpha_w^2}{\beta_w^2} + \alpha_{AP} V_{st}^3 > 0$, то есть требованию положительности $E_{p,st}$. Таким образом, соответствующее стационарное решение системы (1)-(4), $X_{st} = [V_{st}, E_{p,st}, E_{st}, W_{st}], T$, выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned}
V_{st} &= V_{max} - \Delta V_{st} \\
E_{p,st} &= \frac{\alpha_{E_p} E_p^* V_{max}}{\alpha_{E_p} V_{max} - \frac{b_p \theta_p^2 \alpha_w^2}{\beta_w^2} + \alpha_{AP} V_{max}^3}, \\
E_{st} &= \frac{\beta}{\gamma_{VE}} \cdot \frac{\Delta V_{st}}{V_{max}}, \\
W_{st} &= \frac{b_w V_{max}}{\alpha_w}.
\end{aligned} \tag{27}$$

Получим достаточные условия асимптотической устойчивости стационарного решения. Для этого линеаризуем нашу систему (1)-(4) в окрестности этого решения и рассмотрим полученное характеристическое уравнение:

$$Z'(\lambda) = -(\alpha_E + \lambda) \cdot Z'(\lambda) + P(\lambda) \cdot \lambda + R, \tag{28}$$

где квазиполином $Z'(\lambda)$ описывается выражением (13), но с другими коэффициентами

$$Z'(\lambda) = -\lambda^3 - a'\lambda^2 - b'\lambda - d' + (g'\lambda + f')\exp(-\lambda\tau_A),$$

а дополнительным слагаемым $(P(\lambda) \cdot \lambda + R)$, где

$$P = \gamma_{VE} V_{st}^2 E_{p,st} b_d \frac{2g_{est}^{3/2} b_w}{\theta_e},$$

$$R = 2\gamma_{VE}V_{st}^2E_{p,st}b_w(\alpha_{E_p} - g_{pst}b_pV_{st} + V_{st}^2\alpha_{AP}) \left(\frac{g_{pst}^3/2b_p}{\theta_p} - \frac{g_{est}^3/2b_d}{\theta_e} \right),$$

можно пренебречь, поскольку при подстановке значений параметров из таблицы в выражение для коэффициентов P и R оказывается, что они малы по сравнению с соответствующими коэффициентами в первом слагаемом (28). С учетом этого обстоятельства полагаем, что корни уравнения (28) близки к значению квазиполинома $Z' \cdot (\alpha_E + \lambda)$. Поэтому условие устойчивости в случае хронической инфекции с высокой концентрацией вируса фактически такое же, как и в случае малых концентраций вируса, но, естественно, с другими выражениями для коэффициентов:

$$d' - f' > 0 \quad (29)$$

$$\frac{d' + f'}{a' - g'\tau_A} < b' - g' - f'\tau_A. \quad (30)$$

Здесь

$$\begin{aligned} a' &= \frac{\beta V_{st}}{V_{max}} - g_{pst}b_pV_{st} + \alpha_{E_p} + \alpha_E + V_{st}^2\alpha_{AP} + V_{st}^2\alpha_{AE} > 0, \\ b' &= \frac{\beta V_{st}}{V_{max}}(\alpha_{E_p} - g_{pst}b_pV_{st} + V_{st}^2\alpha_{AP} + \alpha_E + V_{st}^2\alpha_{AE}) \\ &+ \gamma_{VE}V_{st}(g_{est}b_dE_{p,st} - V_{st}E_{st}\alpha_{AE}) + (\alpha_{E_p} - g_{pst}b_pV_{st} + V_{st}^2\alpha_{AP})(\alpha_E + V_{st}^2\alpha_{AE}), \\ d' &= \frac{\beta V_{st}}{V_{max}}(\alpha_{E_p} - g_{pst}b_pV_{st} + V_{st}^2\alpha_{AP}) \cdot (\alpha_E + V_{st}^2\alpha_{AE}) \\ &+ \gamma_{VE}V_{st}(V_{st}E_{st}\alpha_{AE} - g_{est}b_dE_{p,st} \cdot (\alpha_{E_p} - g_{pst}b_pV_{st}) + V_{st}^2\alpha_{AP}) \\ &+ \gamma_{VE}g_{pst}b_dV_{st}^2(V_{st}E_{st}\alpha_{AP} - b_pE_{p,st}) > 0, \\ g' &= \gamma_{VE}V_{st}^2E_{st}\alpha_{AE} > 0, \\ f' &= \gamma_{VE}V_{st}^2\alpha_{AE}E_{st}(\alpha_{E_p} - g_{pst}b_pV_{st} + V_{st}^2\alpha_{AP}) + \gamma_{VE}g_{est}b_dE_{p,st}V_{st}^3\alpha_{AP} > 0. \end{aligned}$$

Также заметим, что $a' - g'\tau_A > 0$. Для того чтобы убедиться в этом, достаточно подставить в данное неравенство выражения для параметров a' и g' .

Условия (29), (30) задают область значений параметров модели, когда стационарное состояние с высокой концентрацией вируса устойчиво. Это множество значений не пустое, например неравенства (29), (30) удовлетворяются при использовании оценок параметров из допустимой области значений (см. таблицу).

Биологическое следствие 3. Положение равновесия (27) соответствует случаю хронической инфекции, характеризующейся сосуществованием большой концентрации вируса и маленькой, функционально "неактивной" популяции лимфоцитов-предшественников. Приведем численные оценки найденного решения (27) для стационарного состояния при хронической вирусной инфекции:

$$V_{st} \simeq 4.82 \cdot 10^7 \text{ вирус/мл}, \quad E_{p,st} \simeq 69 \text{ клетка/мл}, \quad E_{st} \simeq 52 \text{ клетка/мл}, \\ W_{st} \simeq 4.4 \cdot 10^8 \text{ вирус/мл}.$$

Естественно ожидать, что такой тип хронической инфекции должен был бы сопровождаться нулевым размером популяции вирус-специфических Т-клеток. Это действительно имело бы место, если учесть, что ВЛХМ, постоянно присутствуя в тимусе, приводит к тому, что поступление лимфоцитов-предшественников на периферию становится равным нулю. Полагая $E_p^* = 0$ в вышеописанных формулах, мы получим случай полного истощения популяции Т-клеток: $E_{p,st} = 0$ $E_{st} = 0$.

3. СУЩЕСТВОВАНИЕ ПЕРИОДИЧЕСКИХ РЕШЕНИЙ

В отличие от таких инфекций, как гепатит В или вирус герпеса, на данный момент не существует документального подтверждения возможности устойчивых колебаний численности ВЛХМ при хронической инфекции мышей. Интересно исследовать, возможно ли существование периодических решений в модели (1)-(4). Для того чтобы математически исследовать этот вопрос, рассмотрим упрощенную версию модели, в которой популяции лимфоцитов-предшественников и клеток-эффекторов объединены, а запаздывания принимаются равными нулю ($\tau = 0$, $\tau_A = 0$). Таким образом, систему (1)-(4) преобразуем к виду:

$$\frac{dV(t)}{dt} = \beta V(t) \left(1 - \frac{V(t)}{V_{max}} \right) - \gamma_{VE} E_p(t) V(t), \quad (31)$$

$$\begin{aligned} \frac{dE_p(t)}{dt} &= \alpha_{E_p} (E_p^* - E_p(t)) + g_p(W) b_p V(t) E_p(t) \\ &\quad - \alpha_{AP} V^2(t) E_p(t), \end{aligned} \quad (32)$$

$$\frac{dW(t)}{dt} = b_w V(t) - \alpha_w W(t). \quad (33)$$

Мы будем исследовать условия бифуркации Хопфа, связанные с потерей асимптотической устойчивости стационарного состояния с высокой концентрацией вируса V_{st} . В качестве контрольного (бифуркационного) параметра возьмем параметр θ_p , характеризующий пороговую вирусную нагрузку, при которой вызывается состояние анэргии у Т-лимфоцитов-предшественников. Исследование периодических решений в нелинейных системах, как правило, опирается на применение теоремы Андронофа-Хопфа, определяющей достаточные условия существования семейства периодических решений (Марсен, 1980).

Воспользуемся при исследовании периодических решений подходом, аналогичным изложенному в (Pimbley, 1978; Скалько, 1983). Рассмотрим матрицу Якоби, полученную в результате линеаризации системы (31)–(33) в окрестности стационарного решения (27):

$$A = \begin{pmatrix} -\frac{\beta V_{st}}{V_{max}} & \gamma_{VE} V_{st} & 0 \\ g_{pst} b_p E_{p,st} - 2V_{st} E_{p,st} \alpha_{AP} & -\alpha_{E_p} + g_{pst} b_p V_{st} - V_{st}^2 \alpha_{AP} & -\frac{2}{\theta_p} g_{pst}^{3/2} b_p E_{p,st} V_{st} \\ b_w & 0 & -\alpha_w \end{pmatrix} \quad (34)$$

Характеристическое уравнение матрицы (34) будет иметь следующий вид:

$$F(\lambda) = \lambda^3 - (\text{tr } A)\lambda^2 + (\text{tr } A^s)\lambda - \det A = 0, \quad (35)$$

где A^s – это первая компонента матрицы Якоби (34), а $\text{tr } A^s$ есть сумма главных миноров второго порядка:

$$\begin{aligned} \text{tr } A &= - \left(\frac{\beta V_{st}}{V_{max}} + \alpha_{E_p} - \theta_p^2 \frac{\alpha_w^2 b_p}{b_w^2 V_{st}} + V_{st}^2 \alpha_{AP} + \alpha_w \right), \\ \text{tr } A^s &= \left(\frac{\beta V_{st}}{V_{max}} + \alpha_w \right) (\alpha_{E_p} - \theta_p^2 \frac{\alpha_w^2 b_p}{b_w^2 V_{st}} + V_{st}^2 \alpha_{AP}) + \gamma_{VE} E_{p,st} (\theta_p^2 \frac{\alpha_w^2 b_p}{b_w^2 V_{st}} - \\ &\quad 2V_{st}^2 \alpha_{AP}) + \alpha_w \frac{\beta V_{st}}{V_{max}}, \\ \det A &= \alpha_w \frac{\beta V_{st}}{V_{max}} (\alpha_{E_p} - \theta_p^2 \frac{\alpha_w^2 b_p}{b_w^2 V_{st}} + V_{st}^2 \alpha_{AP}) - \alpha_w \gamma_{VE} E_{p,st} (\theta_p^2 \frac{\alpha_w^2 b_p}{b_w^2 V_{st}} - \\ &\quad 2V_{st}^2 \alpha_{AP}) + 2\gamma_{VE} E_{p,st} \theta_p^2 \frac{\alpha_w^3 b_p}{b_w^2 V_{st}}. \end{aligned}$$

Легко видеть, что $\text{tr } A$, $\text{tr } A^s$ и $\det A$ являются квадратичными функциями параметра θ_p и $\text{tr } A < 0$, $\det A < 0$. Более того, если выполняется неравенство

$$\theta_p^2 \frac{\alpha_w^2 b_p}{b_w^2 V_{st}} < \alpha_{E_p} + V_{st}^2 \alpha_{AP}, \quad (36)$$

то $\text{tr } A^s$ – квадратично убывающая положительная функция θ_p . Заметим, что неравенство (36) выполняется для ”наилучших оценок” параметров модели, соответствующих инфекции ВЛХМ-Docile, протекающей у мышей линии C57BL/6 (см. таблицу). Полином $F(\lambda)$ – кубический с действительными коэффициентами, следовательно, имеет по меньшей мере один действительный корень λ_0 . Выразим свободный член $\det A$ через λ_0 , тогда уравнение (35) будет выглядеть следующим образом:

$$F(\lambda) = (\lambda - \lambda_0)[\lambda^2 + (\lambda_0 - \text{tr } A)\lambda + (\lambda_0^2 - \text{tr } A\lambda_0 + \text{tr } A^s)] = 0. \quad (37)$$

Уравнение (37) имеет пару чисто мнимых корней тогда и только тогда, когда $\lambda_0 = \text{tr } A$ и $\text{tr } A^s$ больше нуля. Следовательно, должно выполняться следующее равенство:

$$T(\theta_p) \equiv F(\text{tr } A) = (\text{tr } A)(\text{tr } A^s) - \det A = 0. \quad (38)$$

Если существуют такие критические значения $\theta_{p,i}^{cr}$, $i \leq 4$, удовлетворяющие уравнению (38), а также условию (36) то характеристическое уравнение (35) имеет пару сопряженных чисто мнимых корней $\pm i(\text{tr } A^s)^{1/2}$. Вычислив $\theta_{p,i}^{cr}$ и подставив их в выражение для $\text{tr } A^s$, мы увидим, что оно становится отрицательным для всех i . Следовательно, необходимое условие (36) для существования чисто мнимых корней не выполняется. Таким образом, система (31)-(33) не обладает периодическими решениями для наилучших оценок значений параметров.

Покажем, что функция $\text{tr } A^s$ действительно становится отрицательной для $\theta_{p,i}^{cr}$. Введем малую величину $\varepsilon = 1 - \frac{V_{st}}{V_{max}}$. Поскольку мы рассматриваем случай хронической формы заболевания с высокой концентрацией вируса, то $V_{st} \approx V_{max}$ и $\varepsilon \rightarrow 0$. Запишем первое приближение функции $\text{tr } A^s$:

$$\text{tr } A^s = \text{tr } A^s(0) + \frac{\partial \text{tr } A^s}{\partial \varepsilon} \varepsilon. \quad (39)$$

Уравнение (38) имеет два положительных корня $\theta_{p,1,2}^{cr}$. Подставляя их в выражение для $\text{tr } A^s$ (39), получим

$$\text{tr } A_1^s = -\alpha_w^2 + \frac{\partial \text{tr } A^s}{\partial \varepsilon} \varepsilon, \quad (40)$$

где

$$\frac{\partial \text{tr } A^s}{\partial \varepsilon} \varepsilon = \frac{\alpha_w \beta}{\beta \frac{V_{st}}{V_{max}} - \alpha_w} (\alpha_{AP} V_{st}^2 - \alpha_{E_p} - 2\alpha_w) > 0. \quad (41)$$

Хотя производная (41) положительна и на один порядок больше, чем $\text{tr } A_1^s(0)$, при $\varepsilon \rightarrow 0$ имеем $\text{tr } A_1^s < 0$. Аналогично представляется функция $\text{tr } A_2^s$:

$$\text{tr } A_2^s = -\beta^2 \frac{V_{st}}{V_{max}} + \varepsilon \beta^2 \frac{V_{st}}{V_{max}} \frac{\alpha_w + \beta \frac{V_{st}}{V_{max}} - \alpha_{AP} V_{st}^2 + \alpha_{E_p}}{\beta \frac{V_{st}}{V_{max}} - \alpha_w} < -\beta^2 \frac{V_{st}}{V_{max}} (1 - \varepsilon) < 0. \quad (42)$$

Таким образом, мы показали, что необходимое условие для существования периодических решений не выполняется при значениях параметров модели (31)-(33), соответствующих "наилучшим оценкам" нашей таблицы. Это согласуется с имеющимися представлениями о вариантах динамики инфекции, поскольку колебательная динамика вируса и Т-клеток при заболевании мышей вирусом ЛХМ экспериментально не наблюдалась.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе исследованы условия существования и устойчивости стационарных решений для модели из четырех нелинейных дифференциальных уравнений с запаздывающим аргументом, описывающей динамику экспериментальной вирусной инфекции у животных. Используя оценки параметров вируса и иммунной системы, полученные по реальным данным, предсказаны характеристики экстремальных вариантов исхода инфекции: а) персистенции вируса ниже порога экспериментального обнаружения и формирования иммунной памяти; б) хронической инфекции и исчезновения специфической иммунной реакции.

Хотя вирус лимфоцитарного хориоменингита не разрушает зараженные клетки, его присутствие в течение длительного времени или в больших количествах оказывает подавляющее влияние на специфический Т-клеточный ответ. Рассматривая порог иммуносупрессии как бифуркационный параметр, для упрощенной версии модели были исследованы условия появления периодических решений.

Полученные аналитические результаты позволяют прогнозировать исход взаимоотношений вируса и животных с учетом их свойств и являются важным шагом на пути приложения математических моделей в экспериментальной иммунологии.

ЛИТЕРАТУРА

Белых Л.Н., Марчук Г.И. Качественный анализ простейшей математической модели инфекционного заболевания // Математическое моделирование в иммунологии и медицине. – Новосибирск: Наука, 1982. С. 5–27.

Марчук Г.И. Математические модели в иммунологии. Вычислительные методы и эксперименты. –М.: Наука, 1991.

Скалько Ю.И. Исследование колебательных решений математической модели заболевания: Препринт №4 ОБМ АН СССР. 1983.

Bocharov G.A. Modelling the dynamics of LCMV infection in mice: conventional and exhaustive CTL responses // *J. theor. Biol.* 1998. **192**. P. 283–308.

Ciurea A., Klenerman P. Hunziker L., Horvath E., Odermatt B., Ochsenbein A.F., Hengartner H. and Zinkernagel R.M. Persistence of lymphocytic choriomeningitis virus at very low levels in immune mice // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.* 1999. **96** P. 11964–11969.

Hansen C.K., De Boer R.G. The role of antigen in immune responses. A bioinformatics approach // *Ph. D. Thesis.* 1999. Utrecht Univ. P. 13–30.

Marsden J. E., McCracken M. The Hopf bifurcation and its applications. – N.Y.: Springer-Verlag, 1976.

Pimbley G.H. Simple time-evolution equations simulating an immune response: their derivation, treatment, and interpretation // *Theoretical Immunology* / Eds. Bell, Perelson & Pimbley. 1978. P. 455–479. Marell Dekker.

Wodarz D., Klenerman P., Nowak M. Dynamics of cytotoxic T-lymphocyte exhaustion // *Proc. R. Soc. B*. 1997. **265**. P. 191–203.

Математическое моделирование в проблемах окружающей среды

Математическое моделирование взаимодействия газовых примесей и аэрозолей в атмосферных дисперсных системах¹

А. Е. Алоян

Институт вычислительной математики РАН
E-mail: aloyan@inm.ras.ru

Рассматривается математическая модель переноса многокомпонентной примеси с учетом фотохимической трансформации и образования аэрозолей в тропосфере северного полушария с учетом кинетических процессов нуклеации, конденсации и коагуляции. Распределение размера аэрозольных частиц разрешается для 25 дискретных интервалов начиная с 10^{-5} мкм с удвоением между интервалами. Рассматриваются процессы окисления сернистых газов серией фотохимических реакций в пар серной кислоты. На определенных уровнях это приводит к пересыщению $H_2SO_4-H_2O$ с последующим осаждением водного раствора серной кислоты на поверхностях ядер конденсации. В зависимости от местности и физического окружения капли могут расти или испаряться; при полном испарении остаются твердые ядра.

Обсуждаются основные принципы построения математических моделей, алгоритмы их численной реализации. Приводятся результаты численных экспериментов по моделированию трансформации паров серной кислоты и образованию конденсационных следов в тропосфере северного полушария.

ВВЕДЕНИЕ

Образование и удаление аэрозольных частиц описываются многими процессами (нуклеация, конденсация, коагуляция, химическая трансформация в газовой и жидкой фазах, гидротермодинамические процессы, а также межфазные обмены, сухое и мокрое осаждение). Химический состав частиц существенно изменяется в зависимости от размера, что имеет принципиальное значение для физики аэрозолей и химии атмосферы. В атмосферных дисперсных

¹Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант №00-05-64428), а также ISTC 1078.

системах особое важное место занимают сульфатные аэрозоли. Сульфатные частицы в атмосфере могут оказать косвенное и прямое влияние на климатическую систему. Эти частицы формируются в разных частях атмосферы: в свободной тропосфере, в морском пограничном слое, в арктических областях и др. Численные эксперименты показывают, что новые сульфатные частицы могут нуклеироваться и в стратосфере, а также в городском загрязненном воздухе [29, 22, 32, 36, 38]. Из большинства примеров ясно, что частицы образуются через гомогенную нуклеацию, например нуклеацию воды и серной кислоты и др. Известно, что увеличение размеров аэрозольных частиц происходит в процессах коагуляции и превращения газ–частица, а изменение спектра размеров частиц происходит под влиянием этих двух механизмов. Скорость превращений газ–частица может определяться скоростью диффузии молекул пара к поверхности частицы и скоростью реакции, в которой участвует молекула адсорбированного пара и вещество поверхности частицы. При этом очень важно выявить механизмы превращений газ–частица, которые приводят к образованию веществ, способных к конденсации, таких, как серная кислота, сульфат аммония, нитрат аммония и др.

В большинстве трехмерных моделей динамики аэрозолей предполагается, что существует мгновенное равновесие в системе газ–аэрозоль. Однако, как показано в [30, 37], при определенных условиях равновесие устанавливается довольно медленно по отношению к временному масштабу протекания других процессов. Поэтому необходимо построить соответствующие численные модели с использованием неравновесной функции распределения. Математические модели такого типа построены в [30, 25, 20]. При этом одним из важных требований к моделям является соблюдение законов сохранения массы и числа частиц.

Для моделирования процессов образования аэрозолей исключительное значение имеют получающиеся после фотохимической трансформации вещества. Пересыщение паров этих веществ приводит к образованию первичных кластеров, которые являются основой для образования аэрозолей. Затем они могут взаимодействовать с ядрами фоновой атмосферы и объединяться с каплями воды определенных размеров с последующей коагуляцией этих частиц. В данной работе построена глобальная численная модель переноса и трансформации паров серной кислоты в тропосфере северного полушария с учетом кинетических процессов.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим численную модель глобального переноса многокомпонентных малых газовых примесей и аэрозолей в тропосфере северного полушария. Модель рассматривается применительно к сферической Земле в системе координат (λ, ψ, z) , где λ – долгота, ψ – дополнение до широты, z – высота от подстилающей поверхности. Основные уравнения для скорости изменения концентрации газовых примесей и аэрозолей запишем в следующем виде :

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{u}{a \sin \psi} \frac{\partial C_i}{\partial \lambda} + \frac{v}{a} \frac{\partial C_i}{\partial \psi} + w \frac{\partial C_i}{\partial z} =$$

$$F_{\text{gas}} - P_{\text{nucl}} - P_{\text{cond}} + P_{\text{phot}} + \frac{\partial}{\partial z} \nu \frac{\partial C_i}{\partial z} + \frac{1}{a^2 \sin^2 \psi} \frac{\partial}{\partial \lambda} \mu \frac{\partial C_i}{\partial \lambda} + \frac{1}{a^2 \sin \psi} \frac{\partial}{\partial \psi} \mu \sin \psi \frac{\partial C_i}{\partial \psi}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \varphi_k}{\partial t} + \frac{u}{a \sin \psi} \frac{\partial \varphi_k}{\partial \lambda} + \frac{v}{a} \frac{\partial \varphi_k}{\partial \psi} + (w - w_g) \frac{\partial \varphi_k}{\partial z} =$$

$$F_{\text{aer}} + P_{\text{cond}} + P_{\text{coag}} + P_{\text{nucl}} + \frac{\partial}{\partial z} \nu \frac{\partial \varphi_k}{\partial z} + \frac{1}{a^2 \sin^2 \psi} \frac{\partial}{\partial \lambda} \mu \frac{\partial \varphi_k}{\partial \lambda} + \frac{1}{a^2 \sin \psi} \frac{\partial}{\partial \psi} \mu \sin \psi \frac{\partial \varphi_k}{\partial \psi}. \quad (2)$$

Здесь C_i , ($i = 1, N_g$), φ_k , ($k = 1, N_a$) – концентрация газовых примесей и аэрозолей; N_g и N_a – число газовых компонент и аэрозольных фракций соответственно; (u, v, w) – компоненты вектора скорости ветра в направлении λ , ψ , z соответственно; w_g – скорость гравитационного оседания; a – средний радиус Земли; μ , ν – коэффициенты турбулентного обмена в горизонтальном и вертикальном направлениях соответственно; F_{gas} и F_{aer} – источники газовых примесей и аэрозолей; P_{nucl} , P_{cond} , P_{coag} , P_{phot} – операторы нуклеации, конденсации, коагуляции и фотохимической трансформации соответственно, вид которых будет приведен ниже.

Уравнения (1) и (2) рассматриваются в области $D_t = G \times [(0, T)]$, где $G = S \times [0, H]$; $S = \{(\lambda, \psi): 0 \leq \lambda \leq 2\pi, 0 \leq \psi \leq \pi/2\}$, H – верхняя граница расчетной области.

$$\varphi(0, \psi, z, t) = \varphi(2\pi, \psi, z, t), \quad \varphi(\lambda, -\psi, z, t) = \varphi(\lambda + \pi, \psi, z, t), \quad (3)$$

$$\varphi(\lambda, \pi + \psi, z, t) = \varphi(\lambda + \pi, \pi - \psi, z, t) \quad \frac{\partial \varphi}{\partial \psi} = 0 \quad \text{for} \quad \psi = \pi/2.$$

Для определения коэффициентов горизонтального турбулентного обмена используется метод, предложенный Смагоринским [33]. Метеорологические характеристики в пограничном слое рассчитываются с помощью параметризации планетарного пограничного слоя атмосферы [4, 5, 11]. Краевые условия задачи (1)–(2) на первом расчетном уровне (на верхней границе приземного слоя атмосферы) $z = h$ рассматриваются ниже.

2. ПОТОКИ ГАЗОВЫХ ПРИМЕСЕЙ И АЭРОЗОЛЕЙ В ПРИЗЕМНОМ СЛОЕ АТМОСФЕРЫ

Для задания краевого условия на высоте $z = h$ используется уравнение для описания сопротивления примесям поверхностью земли как совокупность следующих трех членов: аэродинамическое сопротивление r_a , квазиламинарное сопротивление пограничного слоя r_b , обусловленное процессами молекулярной диффузии вблизи поверхности земли, и поверхностное сопротивление r_c , связанное с процессами на поверхности осадения. Выражение для r_c будет дано ниже.

Итак, потоки примесей в приземном слое атмосферы представим в виде:

$$\nu \frac{\partial \varphi}{\partial z} = \frac{1}{r_a + r_b + r_c} (\varphi - \varphi_{\text{surf}}), \quad (4)$$

где $r_b = \frac{2}{\alpha u_*} \left(\frac{S_c}{Pr} \right)^{2/3}$, $S_c = 1,5 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, $Pr = 0,71$ – число Прандтля.

Для задания граничных условий при $z = h$, используются теория Монина-Обухова [10] и эмпирические функции Бузингера [21], конкретный вид которых приведен в [11]. Предполагается, что примеси (как и потоки тепла и количества движения) можно принять постоянными по высоте. Тогда для $z \leq h$ имеет место:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z} = \frac{\varphi_*}{z} \eta_\varphi(\zeta), \quad (5)$$

$$\varphi - \varphi_0 = \varphi_* \int_{\zeta_0}^{\zeta} \frac{\eta_\varphi(\zeta)}{\zeta} d\zeta = \varphi_* f_\varphi(\zeta, \zeta_0), \quad (6)$$

$$\nu_\varphi(\zeta) = \frac{u_* \alpha z}{\eta_\varphi(\zeta)}, \quad u_* = \frac{\alpha |\vec{u}_h|}{f_u(\zeta_h, \zeta_0)} \equiv c_u |\vec{u}|_h, \quad c_u = \frac{\alpha}{f_u(\zeta_h, \zeta_0)}, \quad (7)$$

где φ_* – масштаб изменения концентрации; η_φ , f_φ – непрерывные универсальные функции; $\zeta = z/L$ – безразмерная высота, характеризующая устойчивость атмосферы; индексы $_0$ и $_h$ относятся к уровням $z = z_0$ и $z = h$ соответственно; L – масштаб длины; z_0 – параметр шероховатости; α – постоянная Карманна; ν_φ – коэффициент вертикального турбулентного обмена; u_* – динамическая скорость. Здесь η_φ и f_φ – соответствующие универсальные функции для температуры. При $z = h$ уравнения (5)-(7) дают

$$\varphi = \varphi_0 + \frac{\eta_\varphi(\zeta, \zeta_0)}{f_\varphi(\zeta_h, \zeta_0)}, \quad (8)$$

$$h \frac{\partial \varphi}{\partial z} = \frac{\eta_\varphi(\zeta_h)}{f_\varphi(\zeta_h, \zeta_0)}. \quad (9)$$

Умножая (9) на $(\nu_\varphi)_h$, получим

$$\nu_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial z} = c_u c_\varphi (\varphi_h - \varphi_0) |\vec{u}| \quad \text{при } z = h, \quad (10)$$

что вместе с (9) можно рассматривать как граничное условие для $z \geq h$. Аэродинамическое сопротивление вычисляется по формуле

$$r_a = \frac{1}{c_u c_\varphi |\vec{u}|}.$$

Коэффициент поверхностного сопротивления (r_c) над сушей определяется из модели, описывающей перенос примесей в почве с одновременным использованием потоков на разделе атмосфера–почва [27, 14].

3. ВЛАЖНОЕ ОСАЖДЕНИЕ

Удаление паров серной кислоты из атмосферы осадками характеризуется параметром, называемым отношением вымывания W_{sc} . Молекулы газа, войдя в каплю, растворяются так быстро, что этот процесс можно рассматривать мгновенным, учитывая пространственно-временные масштабы изучаемой задачи.

Поскольку константа Генри K_H обратно пропорциональна отношению вымывания ($K_H = 1/W_{sc}$), то равновесное разделение газофазной ($\varphi_{a,g}$) и жидкофазной ($\varphi_{a,w}$) составляющих концентрации паров серной кислоты имеет вид

$$\varphi_{a,g} = K_H \varphi_{a,w}. \quad (11)$$

Изменения во времени концентрации паров серной кислоты представим в следующем виде:

$$\frac{\partial \varphi_{a,g}}{\partial t} = \frac{R_i W_{sc} (\varphi_{a,g} - \varphi_u)}{\Delta z_a}, \quad (12)$$

где R_i – интенсивность дождя; φ_u – концентрация на уровне, расположенном непосредственно выше рассматриваемого слоя, которая принимается константой за один шаг по времени. При этих предположениях уравнение (12) решается аналитически:

$$\varphi_{a,g} = \varphi_u (1 - e^{-\alpha t}) + \varphi_{a,g}^0 e^{-\alpha t}, \quad (13)$$

где $\alpha = RW_{sc}/\Delta z_a$; $\varphi_{a,g}^0$ – концентрация при $t = t_0$. Поэтому поток влажного осаждения имеет вид

$$F_i = R_i \varphi_{a,w} \quad (14)$$

Теперь приведем конкретный вид отдельных операторов, участвующих в уравнениях (1) и (2) и описывающих кинетические процессы трансформации газовых примесей и аэрозолей в атмосфере.

4. ФОТОХИМИЯ

Рассматриваются фотохимические превращения веществ азотно-сернистого и углеродного циклов в тропосфере северного полушария. Источниками газовых примесей являются глобальные значения эмиссий источников, заданных на поверхности Земли, для SO_2 , NO_x и CH_4 . В цепочках химических превращений участвуют 35 газовых компонентов, включающие азотно-сернистый и углеродные циклы, состоящие из 200 химических и фотохимических реакций [11, 15, 16]. Схема фотохимических преобразований этих составляющих с соответствующими константами скоростей и сечениями поглощений приведены в [23]. Распределение осредненных источников NO_x на поверхности материков взято из работы [26], а для двуокиси серы – из [19]. Выбросы метана задавались из [35]. Для начальных значений фоновых концентраций стабильных частиц использовалась работа [40]. При построении фотохимической модели исходными являются законы сохранения массы для рассматриваемых газовых составляющих. Соответствующие уравнения имеют следующий вид:

$$\frac{d\rho\varphi_i}{dt} = \frac{\partial\rho\varphi_i}{\partial t} + \text{div}\vec{u}\hat{\rho}\varphi_i = P^i - L^i, \quad (15)$$

где φ_i – объемное соотношение смеси i -й субстанции, ρ – плотность воздуха; P^i и L^i – интенсивности её генерации и гибели.

5. НУКЛЕАЦИЯ

Образование новых ядер из паров происходит в основном с помощью бинарной гомогенной нуклеации капель серной кислоты и воды. Скорость нуклеации J зависит от трех переменных: массовой концентрации кислоты в паровой фазе (c), относительной влажности воздуха (Rh) и температуры (T). Частицы нуклеационной моды первоначально имеют субмикронный размер и могут расти как за счет конденсации низколетучих паров, так и за счет внутримодовой коагуляции. Пусть в атмосфере в пересыщенном паре при температуре T и давлении P_v имеется бинарный кластер, состоящий из n_w молекул вещества w и n_a молекул для a с мольными фракциями x_{iv} ($i = w, a$). Будем считать, что частицы имеют сферическую форму и находятся в жидкой фазе. Тогда свободную энергию для образования жидкого зародыша в бинарной смеси можно представить в следующем виде:

$$W = \Delta G = n_w \Delta \mu_w + n_a \Delta \mu_a + A \sigma, \quad (16)$$

где ΔG – изменения свободной энергии Гиббса, A – площадь поверхности, σ – поверхностное натяжение, $\Delta \mu_i = \mu_{il}(T, P_v, x_{il}) - \mu_{iv}(T, P_v, x_{iv})$, при этом μ_{il} и μ_{iv} – химические потенциалы в жидкой и паровой фазах соответственно. Важно отметить, что для пересыщенного пара функция ΔG имеет максимум в точке с критическим радиусом r^* . Пар пересыщен по отношению ко всем каплям, у которых $r > r^*$. Критический радиус определяется по значению седловой точки трехмерной поверхности $(n_a, n_w, \Delta G)$ путем решения задачи $(\frac{\partial \Delta G}{\partial n_i})_{n_j} = 0$ [29, 39]. Получаем

$$(\Delta \mu_i + \sigma \frac{\partial A}{\partial n_i}) dn_i + n_i d\mu_{il} + n_j d\mu_{jl} + A d\sigma = 0. \quad (17)$$

Из (17) можно получить уравнения Кельвина

$$\Delta \mu_i + \frac{\sigma v_i}{r^*} = 0 (i = w, a), \quad (18)$$

и свободную энергию для критического кластера

$$\Delta G^* = \frac{4}{3} \pi r^* \sigma. \quad (19)$$

Более подробно метод получения уравнений (18) и (19) дан в [39, 31]. Известно, что серная кислота способна образовать в жидкой фазе гидраты, что, в свою очередь, влияет на активность самой серной кислоты. Выражая разность химических потенциалов вещества i через активации жидкости и пара, получим

$$\Delta \mu_i = -kT \ln \frac{A_{iv}}{A_{il}},$$

где $A_{il} = \frac{p_{i,sol}}{p_{i,s}}$ и $A_{iv} = \frac{p_i}{p_{i,s}}$, $p_i, p_{i,s}, p_{i,sol}$ – парциальное давление, давление пересыщенного пара и давление пара соответственно. Поправки гидратации на активацию кислотности можно представить в виде

$$(\ln \frac{A_{av}}{A_{al}})_{cor} = \ln \frac{A_{av}}{A_{al}} + \ln C. \quad (20)$$

Конкретный вид фактора коррекции C как функции от радиуса гидрата и парциального молекулярного объема дан в [28]. Далее эти поправки учитываются при вычислении разности химического потенциала, которые необходимы для уравнения (18). Итак, формула бинарной нуклеации представляется в виде [29, 34]

$$J = N_v A B_{AV} Z \exp\left(-\frac{\Delta G}{kT}\right). \quad (21)$$

Здесь $N_v = N_{wv} + N_{av} + \sum_{n=1}^l N_n$ – общая численная плотность паровой фазы, A – площадь поверхности ядра, B_{AV} – средняя скорость роста, Z – неравновесный коэффициент Зельдовича. В [29] предполагается, что пар состоит из мономеров воды и серной кислоты, а также гидратов, содержащих одну молекулу кислоты и от 1 до l ($l = 10$) молекул воды. Если рассматривать критическое ядро как сумму средних объемов мономеров $v_{AV} = x_{wl}v_w + x_{al}v_a$, то коэффициент Зельдовича можно определить как

$$Z = \sqrt{\frac{\sigma}{k_B T} \frac{v_{AV}}{2\pi r^*{}^2}}. \quad (22)$$

6. КОНДЕНСАЦИЯ

Флуктуационное зародышеобразование и дальнейший конденсационный рост частиц в пересыщенном паре являются одними из наиболее важных процессов, приводящих к зарождению и развитию дисперсной фазы. При наличии инородных частиц происходит в основном поглощение пара частицами примеси – при этом достаточно лишь создать состояние пересыщения. Процесс конденсации носит динамический характер, и изменение размеров капель должно описываться скоростями $v_g = \frac{\partial g}{\partial t}$, которые определяют баланс между увеличением и уменьшением числа молекул в капле g . Тогда кинетическое уравнение для пространственно однородного случая примет вид

$$\frac{\partial g}{\partial t} + \frac{\partial(v_g f_g)}{\partial g} = J(t)\delta[g - \gamma g_*(t)], \quad (23)$$

где $f_g(t)$ – неравновесная функция распределения (спектр частиц), а J определяется по формуле (21). Для практических задач физики атмосферы важным является наличие в воздухе атмосферных ядер конденсации, ускоряющих процессы формирования аэрозолей. Конденсацию на частицах примеси в такой постановке рассчитать несложно, задавая эти частицы в качестве начального спектра и запрещая испарение, если их размер становится меньше исходного. Тем самым частицы примеси будут служить неким остовом, на котором происходит конденсация; спектр частиц, возникших из-за источника, должен рассматриваться отдельно. Решение кинетического уравнения (23) позволяет определить степень конденсации $\chi(t)$ и число образовавшихся капель на молекулу исходного вещества $v(t)$

$$\chi(t) = \int_0^{\infty} g f_g(t) dg; \quad v(t) = \int_0^{\infty} f_g(t) dg.$$

Режим роста и испарения частицы зависит от соотношения между ее размером и длиной пробега молекул пара в среде l_1 . Приведем упрощенную зависимость скорости v_g , применимую для произвольного режима обмена между паром и поверхностью частицы [12]

$$v_g = \frac{\alpha \pi d^2 n v_T g^{2/3}}{4(1 + 3dg^{1/3}/81)} \left(1 - \exp \left\{ \frac{\lambda \theta}{kT} \left[\frac{g_*^{1/3}}{g^{1/3}} - 1 \right] \right\} \right). \quad (24)$$

При больших g , а именно при $g \geq (1/d)^{1/3}$, формула (24) дает скорость роста в диффузионном режиме, а при малых g : $g_* \geq g \geq (1/d)^3$ – в свободно-молекулярном. Формула (24) применима и для процесса испарения частиц в недосыщенном паре, если считать критический размер отрицательным. Для этого следует произвести замену $g_{жк}^{1/3} \rightarrow -|g_{жк}^{1/3}|$.

Приведенный выше подход позволяет моделировать процессы объемной конденсации в разнообразных ситуациях, если известны законы изменения термодинамических переменных $T(t)$, $p(t)$. Для решения уравнения (23) будем использовать метод частиц, широко применяемый, например, при моделировании физических процессов в плазме [1, 2, 18]. Поскольку спектр f_g будет представляться в виде комбинации δ -функций, удобно перейти от уравнения (23) к некоторому его интегральному аналогу. Для этого умножим (23) на произвольную гладкую функцию $\varphi(g)$ и проинтегрируем по g :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^\infty \varphi f_g dg - \int_0^\infty v_g f_g \frac{\partial \varphi}{\partial g} = J\varphi[\gamma g_*(t)], \quad (25)$$

При интегрировании учтены граничные условия для f_g : $\frac{\partial f}{\partial g} |_{g=0} = 0$; $\frac{\partial f}{\partial g} |_{g=\infty} = 0$. Предположим, что на промежутке $[t^n, t^{n+1} = t^n + \Delta t]$ функцию f_g можно представить в виде

$$f_g = \sum_{i=1}^N N_i(t) \delta[g - g_i(t)] + N_{N+1}(t) \delta[g - g_{N+1}(t)], \quad (26)$$

причем $N_{N+1}(t^n) = 0$. Подставив (26) в (25) и проинтегрировав, получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[\sum_{i=1}^N N_i \varphi(g_i) + N_{N+1} \varphi(g_{N+1}) \right] - \sum_{i=1}^N N_i v_g(g_i) \frac{\partial \varphi}{\partial g_i} + \\ + N_{N+1} v_g(g_{N+1}) \frac{\partial \varphi}{\partial g_{N+1}} = J\varphi[g_*(t)]; \quad (27) \\ \frac{\partial \varphi}{\partial g_i} = \frac{\partial \varphi}{\partial g} |_{g=g_i}. \end{aligned}$$

Интегрируя это соотношение по Δt и используя произвольность $\varphi(g)$, получим соответствующие системы уравнений для решения задачи конденсации. Численный алгоритм более детально изложен в работах [2, 18].

Теперь определим коэффициент захвата малых газовых компонентов (МГК) на поверхности аэрозольных частиц. Кинетика взаимодействия газовых молекул с частицами определяется прежде всего длиной свободного пробега l_a молекулы в воздухе. Представим поток молекул F_i в следующем виде:

$$F_i = \begin{cases} 4\pi r D_i (n_i - n_{vi}), & \text{если } l_a < r \quad (\text{диффузионный режим}), \\ \pi \alpha_i r^2 v_k (n_i - n_{vi}), & \text{если } l_a > r \quad (\text{свободно-молекулярный режим}), \end{cases} \quad (28)$$

где D_i – коэффициент молекулярной диффузии компоненты i с концентрациями n_i , n_{vi} – равновесная концентрация на поверхности частицы, α – коэффициент аккомодации, v_k – кинетическая скорость молекул, r – радиус частицы. Если $K_n \ll 1$, то

$$F_i = F_{ki} \left(1 + \frac{3\alpha_i}{4K_{ni}} \right)^{-1}, \quad (29)$$

$K_n = l_a/r$ – число Кнудсена. После интегрирования уравнения (29), с учетом функции распределения частиц по размерам, получим

$$F_i = \frac{1}{4} [S\alpha_i v_k (n_i - n_{vi})] / (1 + 3\alpha/4K_n), \quad (30)$$

где S – суммарная площадь поверхности частиц на единицу объема. Поскольку $n_{vi} \ll n_i$, то положим $n_{vi} = 0$. Тогда время захвата t_i газовых молекул частицами можно представить в виде

$$t_i = n_i / F_i = 4[1 + (3\alpha/4K_n)] / S\alpha_i v_k. \quad (31)$$

Обратная величина от t_i представляет собой скорость реакции на поверхности частицы или коэффициент захвата K_u .

7. КОАГУЛЯЦИЯ

Изменение концентрации и спектра размеров частиц описывается уравнением Смолуховского:

$$\frac{\partial \varphi_g}{\partial t} = \frac{1}{2} \int_0^g \tilde{K}(g, g_1) \varphi_{g-g_1} \varphi_{g_1} dg_1 - \varphi_g \int_0^\infty \tilde{K}(g, g_1) \varphi_{g_1} dg_1 + I(\varphi_g, t), \quad (32)$$

где g_1 – текущая переменная (масса), по которой производится интегрирование, φ_g – концентрация частиц с массой, заключенной в интервале от g до $g + dg$; $\tilde{K}(x, y)$ – частота столкновения частиц с массами x и y ; $I(\varphi_g, t)$ – интенсивность образования новых частиц с массой g . Этот член добавляется в правую часть (32). Первый член в правой части (32) описывает приход частиц в размер g за счет коагуляции меньших частиц, второй – уход частиц из размера g за счет коагуляции со всеми остальными частицами.

Решение задачи (32) будем искать на множестве неотрицательных решений. Предполагается, что сталкиваются частицы шарообразной формы, и длина свободного пробега в газе-носителе намного больше их размера. В этом случае $K(x, y)$ можно представить в следующем виде [13]:

$$\tilde{K}(x, y) = A(x^{1/3} + y^{1/3})(D_x + D_y)\beta_{xy}, \quad (33)$$

где D_x – коэффициент диффузии частицы массы x :

$$D_x = \frac{k_B T}{6\pi\eta R_x} \left[1 + K n_x \left(A + Q \exp\left(-\frac{b_3}{K n_x}\right) \right) \right], \quad (34)$$

k_B – постоянная Больцмана; b_3, A, Q – эмпирические постоянные; $A = 1, 25$, $Q = 0, 4$, $b_3 = 1, 1$. Фактор коррекции β_{xy} определяется из [41]:

$$\beta_{xy} = \left(\frac{R_x + R_y}{R_x + R_y + d_{xy}} + \frac{4(D_x + D_y)}{(V_x^2 + V_y^2)^{1/2}(R_x + R_y)} \right)^{-1},$$

$$K n_x = \frac{l_x}{R_x}; \quad d_{xy} = (d_x^2 + d_y^2)^{\frac{1}{2}}; \quad d_x = \frac{1}{6R_x l_x} ((2R_x + l_x)^3 - (4R_x^2 + l_x^2)^{\frac{3}{2}}) - 2R_x, \quad (35)$$

$$l_x = \frac{8D_x}{\pi V_x}; \quad V_x = \left(\frac{8kT}{\pi x}\right)^{\frac{1}{2}}; \quad x = \frac{4}{3}\pi R_x^3 \rho.$$

Здесь D_x – коэффициент диффузии частицы i с радиусом R_x ; T – температура; l_x – средняя длина пробега; V_x – средняя скорость частицы; x – масса частицы; ρ – плотность частицы; η – вязкость газа. Для численного решения задачи коагуляции вводится частица предельной массы G , которая при дальнейшей коагуляции выводится из системы. Пока масса самой крупной фракции пренебрежимо мала по сравнению с массой всей системы, отток массы из последней фракции мал, но когда он становится сопоставимым со всей массой системы, то убыль массы системы через последнюю фракцию становится заметной. Это можно рассматривать как естественный для системы сток частиц, например, в результате осаждения частиц, за счет гравитации. Интервал $(0, G)$ разбивается на фракции в логарифмическом масштабе путем удвоения масс $2g_i = g_{i+1}$. Количество частиц в i -й фракции N_i удовлетворяет уравнению, получающемуся после интегрирования (32) в интервале масс (g_i, g_{i+1}) .

Результаты численных экспериментов показали, что концентрация частиц системы в относительных единицах сохраняется с точностью до 10^{-4} для количества частиц и 10^{-2} для массовой концентрации.

Численные методы для решения (32)–(35) приведены в [41, 17].

8. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

Для построения вычислительного алгоритма решения дискретных аналогов уравнений (1)–(2) для трансформируемой примеси воспользуемся методом расщепления по физическим процессам [7, 8, 11]. На каждом малом интервале t получается схема, состоящая из пяти этапов: 1) перенос примеси по траекториям, 2) турбулентная диффузия, 3) фотохимическая трансформация, 4) кинетические процессы нуклеации, конденсации и испарения, 5) процессы коагуляции.

Для численного решения адвективного переноса используется численная схема, конечно-разностная аппроксимация которой имеет второй порядок точности по пространственным переменным и времени и обладает свойствами монотонности и консервативности [42, 3]. На втором этапе уравнение турбулентной диффузии решается по методу покомпонентного расщепления [8, 9]. На

третьем этапе задача расщепляется на три части: фотохимия, конденсация и коагуляция. Уравнения фотохимической трансформации решаются методами ОДУ [24, 6, 15]. На четвертом этапе решается система кинетических уравнений конденсации. Для численного решения уравнений нуклеации, конденсации и испарения используется метод частиц, широко применяемый, например, при моделировании физических процессов в плазме [1]. На пятом этапе решаются кинетические уравнения коагуляции. После дискретизации уравнения (32) полученная система решается методом Рунге-Кутты четвертого порядка.

9. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

С использованием описанной выше модели были проведены численные эксперименты для исследования пространственно-временной изменчивости многокомпонентных газовых примесей и аэрозолей в северном полушарии за весь 1992 год. Расчеты проводились при следующих значениях входных параметров: число узлов сеточной области по долготе – 144, число узлов по широте – 73, число уровней по вертикали – 15, координатные поверхности (в метрах): 50, 110, 380, 650, 920, 1190, 1460, 1860, 2460, 3200, 4100, 5100, 6100, 7100, 8100, 9160. Шаг по времени – 30 мин., а для моделей конденсации и коагуляции – 5 мин. Численные эксперименты проводились на основе метеорологической информации "TOGA Data Set", которая представляет собой данные объективного анализа, восстановленные в Европейском центре.

Проводились численные эксперименты для расчета распространения двуокиси серы и образующихся паров серной кислоты, а также конденсации этих паров на естественных атмосферных частицах. При этом определяются концентрации серы, паров серной кислоты и функция распределения кислотосодержащих частиц по размерам в каждой точке трехмерной сеточной области, охватывающей территорию северного полушария. Численные эксперименты проводились для различных сезонов года (январь, апрель, июль и август) для 10 и 30 дней соответственно. Вычислялись поля концентраций двуокиси серы и паров серной кислоты, а также функция распределения частиц по размерам в каждой точке описанной выше пространственной сеточной области.

На рис. 1 изображены изолинии фракции атмосферного аэрозоля с радиусом 0,11 мкм на высоте 1460 м от поверхности через 10 суток модельного счета, для января и апреля соответственно. На рис. 2 – те же данные для июля и августа 1992 г. Рис. 3 иллюстрирует развитие ситуации при моделировании на время до 30 суток и представляет поля концентрации в плоскости (ψ, λ) в январе для фракций 0,11 мкм и 0,34 мкм соответственно.

Тип циркуляций и эволюция кинетических процессов трансформации изменили очертания полей повышенного присутствия кислотных аэрозольных частиц на разных континентах. Выпадение осадков в этих областях в промежутке времени, к которому относятся результаты расчета, привело к вымыванию кислотосодержащих частиц и повышенной кислотности дождевой воды.

В заключение следует отметить, что учет кинетических процессов трансформации при моделировании распространения газовых примесей и аэрозолей в атмосфере позволил выделить локальные области повышенного содержания

кислотосодержащих аэрозольных частиц и области формирования конденсационных следов.

Автор выражает глубокую благодарность академику Г.И. Марчуку, инициировавшему проведение исследований по данной проблеме.

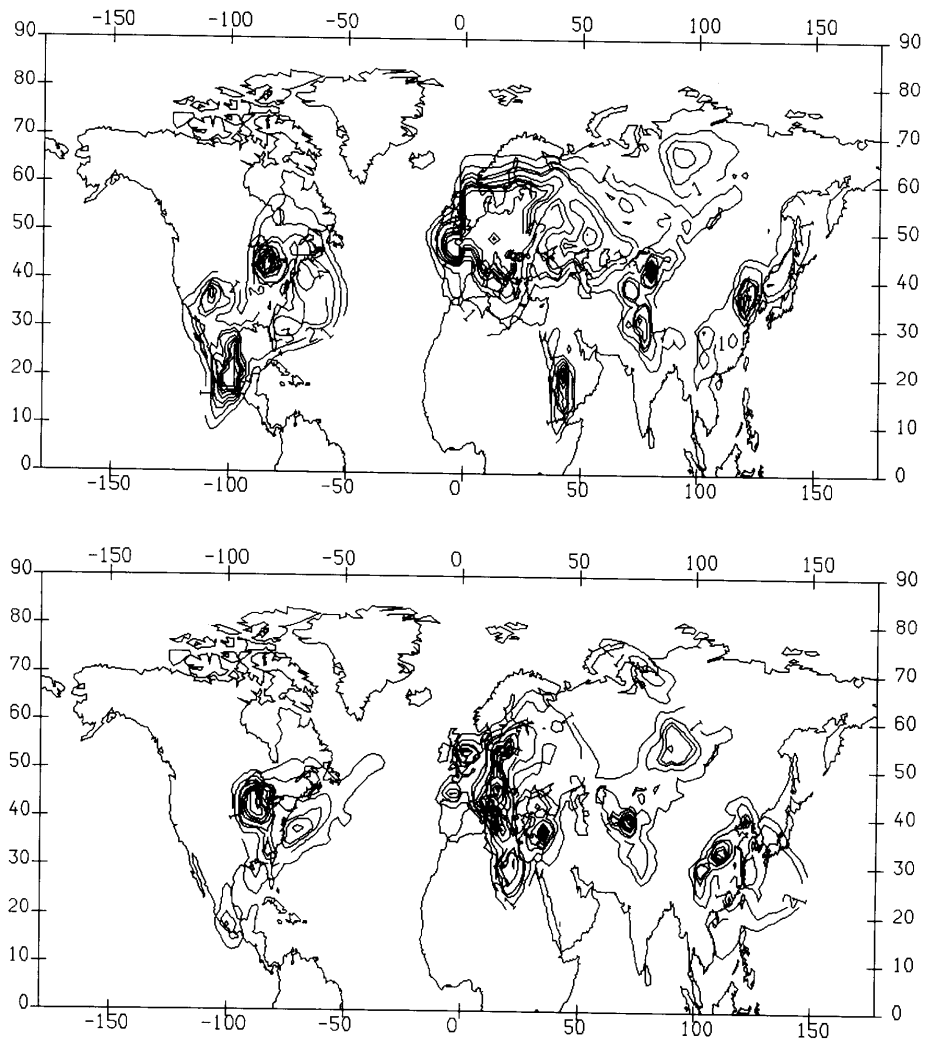


Рис. 1. Изолинии концентраций атмосферного аэрозоля для фракции с радиусом 0,11 мкм на высоте 1460 м от поверхности через 10 суток модельного счета для января (вверху) и апреля (внизу). Максимальное значение концентраций – $1100 \text{ частиц} \cdot \text{см}^{-3}$

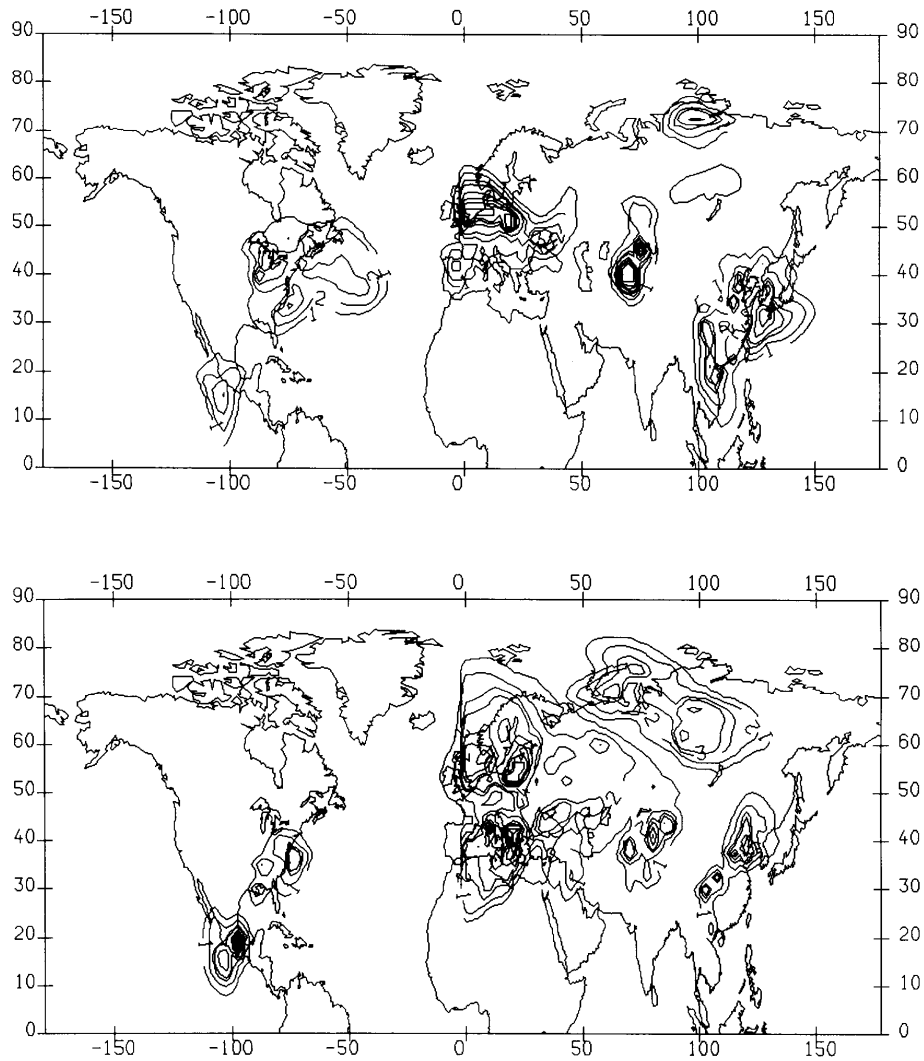


Рис. 2. Изолинии концентраций атмосферного аэрозоля для фракции с радиусом 0,11 мкм на высоте 1460 м от поверхности через 10 суток модельного счета для июля (вверху) и октября (внизу). Максимальное значение концентраций – $1100 \text{ частиц} \cdot \text{см}^{-3}$

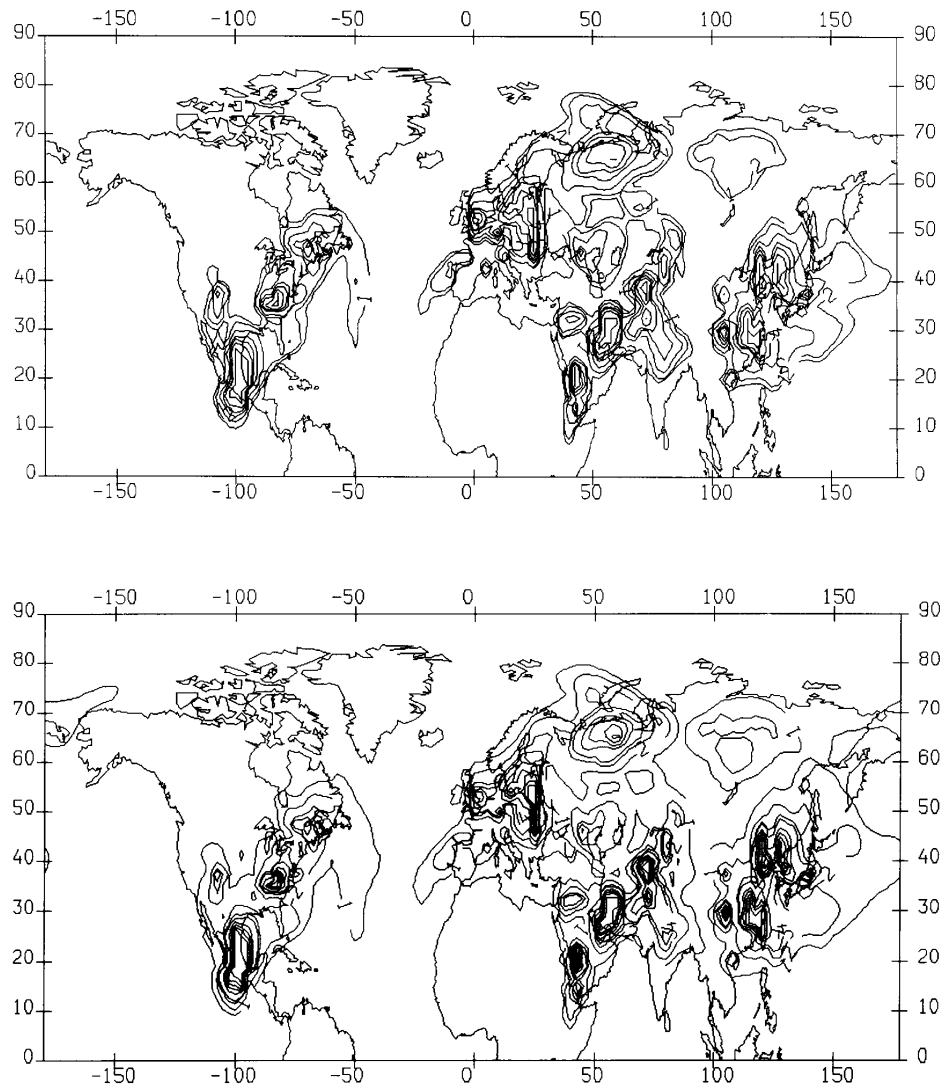


Рис. 3. Изолинии концентраций атмосферного аэрозоля в плоскости (ψ, λ) через 30 суток модельного счета в январе для фракций 0,11 мкм (вверху, $\text{max} = 1100 \text{ частиц} \cdot \text{см}^{-3}$) и 0,34 мкм (внизу, $\text{max} = 2 \text{ частиц} \cdot \text{см}^{-3}$)

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Бэдсел Ч., Ленгдон А. *Физика плазмы и численное моделирование*. – М.: Энергоиздат, 1989.

-
- [2] Голубев А.И., Пискунов В.Н., Повышев В.М. Моделирование процессов объемной конденсации. // *Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Теоретическая и практическая физика.* 1991. Вып. 2. С. 3–9.
- [3] Дымников В.П., Алоян А.Е. Монотонные схемы решения уравнений переноса в задачах прогноза погоды, экологии и теории климата. // *Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана.* 1990. Т. 26, №. 12. С. 1237–1247.
- [4] Йорданов Д.А., Пененко В.В., Алоян А.Е. Параметризация стратифицированного планетарного пограничного слоя для численного моделирования атмосферных процессов. // *Изв. АН СССР. Сер. Физика атмосферы и океана.* 1978. Т. 14, № 8. С. 815–823.
- [5] Йорданов Д.А., Пененко В.В., Алоян А.Е. О вертикальной структуре планетарного пограничного слоя атмосферы. // *Изв. АН СССР. Сер. Физика атмосферы и океана.* 1979. Т. 15, №. 11. С. 1204–1208.
- [6] Лебедев В.И. Как решать явными методами жесткие системы дифференциальных уравнений. // *Вычислительные процессы и системы / Под. ред. Г.И. Марчука.* Вып. 8. –М.: Наука, 1991.
- [7] Марчук Г.И. *Математическое моделирование в проблеме окружающей среды.* – М.: Наука, 1982.
- [8] Марчук Г.И. *Методы вычислительной математики.* – М.: Наука, 1989.
- [9] Марчук Г.И., Алоян А.Е. Глобальный перенос примеси в атмосфере // *Изв. РАН. Сер. Физика атмосферы и океана.* 1995. Т. 31, №5. С. 597–606.
- [10] Монин А.С., Яглом А.М. *Статистическая гидромеханика.* Ч. 1. –М.: Наука, 1965. – 640 с.
- [11] Пененко В.В., Алоян А.Е. *Модели и методы для задач охраны окружающей среды.* –М.: Наука, 1985.
- [12] Сутугин А.Г., Токарь Я.И. Образование конденсационных аэрозолей в пространственно однородной системе // *Коллоидный журнал.* 1985. Т. 47(2). С. 341–347.
- [13] Фукс Н.Л. *Механика аэрозолей.* –М.: Изд-во АН СССР, 1965. – 250 с.
- [14] Aloyan A.E., Arutyunyan V.O. Numerical modeling of lindane transport in the Northern Hemisphere. MSC-E Rep., 1997.
- [15] Aloyan A.E., Arutyunyan V.O. and Marchuk G.I. Dynamics of mesoscale atmospheric layer and impurity spreading with the photochemical transformation allowed for // *Russ. J. Num. Anal. Math. Modelling.* 1995. Vol. 10, №. 2. P. 93–114.

- [16] Aloyan A.E., Arutyunyan V.O., Egorov V.D., Zagaynov V.A. Numerical Modeling of Pollutants Transport / Photochemistry / Aerosol Formation in Atmospheric Disperse Media // *Advanced Mathematics, Computations and Applications (AMCA-95)*. Novosibirsk, June 20-24. 1995. P. 306-319.
- [17] Aloyan A.E., Arutyunyan V.O., Lushnikov A.A., Zagaynov V.A. Transport of coagulating aerosol in the atmosphere // *J. Aeros. Sci.* 1997. Vol. 28, №1. P. 67-85.
- [18] Aloyan A.E., Egorov V.D., Marchuk G.I. and Piskunov V.N. Aerosol formation mathematical modelling with consideration for condensation kinetics // *Russ. J. Num. Anal. Math. Modelling*. 1993. Vol. 7, №6. P. 457-472.
- [19] Benkovitz C. M., M. T. Scholtz, J. Pacyna, L. Tarrason, J. Dignon, E. C. Voldner, P. A. Spiro, J. A. Logan, and T. E. Graedel, Global gridded inventories of anthropogenic emissions of sulfur and nitrogen // *J. Geophys. Res.* 1996. V. 101. P. 29239-29253.
- [20] Binkowski F.S., and U. Shankar The regional particulate matter model, 1, Model description and preliminary results // *J. Geophys. Res.* 1995. V. 100, №26. P. 191-209.
- [21] Businger J.A., Wyngard I.C., Izumi Y., Bradley E.F. Flux-profile relationships in the atmospheric surface layer // *J. Atm. Sci.* 1971. V. 28, №2. P. 181-189.
- [22] Clarke A.D. Atmospheric nuclei in the remote free troposphere // *J. Atmos. Chem.* 1992. V. 14. P. 479-488.
- [23] Demore et al. Chemical Kinetics and Photochemical Data for Use in Stratospheric Modelling, NASA Panel for Data Evaluation, California, 1995.
- [24] Gear C.W. *Numerical Initial Value Problems in ODE*. New-Jersey, 1971.
- [25] Gelbard F. and J.H. Seinfeld Simulation of multicomponent aerosol dynamics // *J. Colloid Interface Sci.* 1980. V. 78. P. 541-556.
- [26] Hameed S. and J. Dignon Changes in the Geographical Distributions of Global Emissions of NO_x and SO_x from Fossil-Fuel Combustion between 1966 and 1980 // *Atm. Env.* 1987. V. 22.
- [27] Jacobs C.M. and Van Pul W.A.J. Long-range atmospheric transport of persistent organic pollutants, I: Description of surface-atmosphere exchange modules and implementation in EUROS. RIVM, Report 722401013, 1996.
- [28] Jaecker-Voirol A., P. Mirabel, and H. Reiss Hydrates in supersaturated binary sulphuric acid-water vapor: A reexamination // *J. Chem. Phys.* 1987. V. 87. P. 4849-4852.
- [29] Kulmala M., Laaksonen A., Pirjola H. Parameterization for sulfuric acid/water nucleation rates // *J. Geophys. Res.* 1998. V. 103. P. 8301-8307.
- [30] Meng Z., D. Dabdub, J.H. Seinfeld Size-resolved and chemically resolved model of atmospheric aerosol dynamics // *J. Geophys. Res.* 1998. V. 103. P. 3419-3435.

- [31] Nishioka K. and I. Kusaka Thermodynamic formulas of liquid phase nucleation from vapor in multicomponent systems // *J. Chem. Phys.* 1992. V. 96. P. 5370–5376.
- [32] Schroder F. and J. Strom Aircraft measurements of sub micrometer aerosol particles (greater than 7 nm) in the midlatitude free troposphere and tropopause region // *Atmos. Res.* 1997. V. 44. P. 333–356.
- [33] Smagorinsky J. General circulation experiments with the primitive equations: 1. The basic experiment // *Mon. Weath. Rev.* 1963. Vol. 91, №2. P. 99–164.
- [34] Stauffer D., Kinetic theory of two-component ("heteromolecular") nucleation and condensation // *J. Aerosol Sci.* 1976. V. 7. P. 319–333.
- [35] Steele L.P. et al. The Global Distribution of Methane in the Atmosphere // *J. Atm. Chem.* 1987. №5.
- [36] Wexler A.S., J.H. Lurmann, and Seinfeld J.H. Modeling urban and regional aerosols 1. Model development // *Atmos. Environ.* 1994. V. 28. P. 531–546.
- [37] Wexler A.S. and Seinfeld J.H. The distribution of ammonium salts among a size and composition dispersed aerosol // *Atmos. Environ.* Part A. 1990. V. 24. P. 1231–1246.
- [38] Wiedensohler A., Covert D.S., Swietlicki E., Aalto P., Heintzenberg J., and Leck C. Occurrence of an ultrafine particle mode less than 20 nm in diameter in the marine boundary layer during Arctic summer and autumn // *Tellus.* 1996. V. 44B. P. 213–222.
- [39] Wilemski G. Composition of the critical nucleus in multicomponent vapor nucleation // *J. Chem. Phys.* 1984. V. 80. P. 1370–1372.
- [40] Yung H. Olaguer E. and Tung K. Simulation of the Present-day Atmospheric Ozone, Odd Nitrogen, Chlorine and Other Species using a Coupled 2D Model in Izentropic Coordinate. Dep. of Appl. Math., Univ. of Washington, Seattle, 1990.
- [41] Zagaynov V.A., Lushnikov A.A. Modelling the atmospheric coagulating aerosol // *Atmospheric Aerosol and Nucleation* / Eds. G. Valt and P. Wagner. – Springer, 1988. P. 93–95.
- [42] Van Leer B. Towards the ultimate conservative difference scheme: 2. Monotonicity and conservation combined in a second-order scheme // *J. Comp. Phys.* 1974. V. 14. P. 360–370.

Параллельные вычисления и архитектура ЭВМ

Отображение проблем вычислительной математики на архитектуру вычислительных систем

В. В. ВОЕВОДИН

E-mail: voevodin@vzv.srcc.msu.su

Рассматриваются основные положения фундаментального научного направления, называемого "Отображение проблем вычислительной математики на архитектуру вычислительных систем". Анализируется связь этого направления с различными областями, так или иначе связанными с вычислениями: анализ ошибок округления, быстрые вычисления, структура алгоритмов, распараллеливание программ, проектирование систолических массивов и др.

Возникновение этого научного направления можно отнести к концу 70-х годов теперь уже прошлого столетия. Бурное развитие микроэлектроники позволило достичь в те годы невиданного ранее скачка в развитии вычислительной техники. Стали функционировать вычислительные системы с производительностью в несколько сотен миллионов операций в секунду, мощность проектируемых систем определялась миллиардами операций. Появились многочисленные устройства, позволяющие очень быстро решать различные простые задачи, такие как матричные и векторные преобразования, быстрое преобразование Фурье, обработка сигналов, распознавание простейших изображений и т.п. Основной целью создания этих устройств было ускорение и упрощение процесса решения конкретных задач. Каждое из них имело свою собственную, связанную с конкретной задачей архитектуру, и не было ничего общего между различными устройствами. Тем не менее успехи в микроэлектронике привели к появлению весьма дерзкой по тем временам мысли о возможности в будущем построения заказных специализированных вычислительных систем, ориентированных на эффективное решение конкретных классов задач.

Кроме впечатляющих результатов и радужных надежд успехи микроэлектроники принесли немало серьезных проблем в деле освоения вычислительной техники, в особенности больших параллельных систем. Очень скоро стало ясно, что построение для таких систем эффективных численных методов является делом и трудным, и малоизученным. Трудности определялись главным образом значительным разнообразием архитектур самих систем и, как следствие, таким же разнообразием способов организации вычислений. Различные способы организации вычислений влекли за собой различные способы организации данных,

требовали создания различных численных методов и алгоритмов, различного численного программного обеспечения, новых средств и языков общения с вычислительной техникой.

Глубокое понимание перспектив и проблем использования и развития вычислительной техники привело академика Гурия Ивановича Марчука к формированию в конце 70-х годов нового фундаментального научного направления, связанного с совместным исследованием численных методов и структур ЭВМ [1]. Оно получило название "Отображение проблем вычислительной математики на архитектуру вычислительных систем" и стало одним из ведущих направлений научных исследований в Отделе вычислительной математики АН СССР (в настоящее время Институт вычислительной математики РАН), созданном академиком Г.И. Марчуком в 1980 г. В те годы это направление было на острие многих проблем, связанных с вычислениями. Таким оно остается и сейчас. Таким же оно останется и в будущем, по крайней мере, ближайшем.

Основные трудности развития нового направления были связаны с отсутствием строгих математических постановок нужных задач. Понятно, что нельзя даже было надеяться на существование или разработку в ближайшее время математической модели процессов функционирования ЭВМ, сколько-нибудь адекватно отражающей действительность. Только число названий различных классов вычислительной техники измерялось десятками: векторные, конвейерные, многопроцессорные, систолические, программируемые и т.п. А в каждом классе было немало существенно различных представителей. Тем не менее, несмотря на большое разнообразие, во всех представителях из всех классов можно было увидеть применение нескольких идей, решающим образом влияющих на производительность. Это, в первую очередь, – параллелизм и конвейерность вычислений, иерархическая структура памяти, использование коммутаторов и коммуникационных сетей для связи функциональных устройств между собой. Поэтому было ясно, что, как минимум, эти идеи должны находить свое отражение в структуре численных методов.

Несмотря на длительный период развития вычислительной математики вообще и численных методов и алгоритмов в частности, математики в действительности очень мало знают о том, как на самом деле устроены разрабатываемые и используемые ими методы и алгоритмы. Господствовавшая в течение нескольких десятилетий концепция однопроцессорных ЭВМ обращала внимание разработчиков алгоритмов в основном лишь на две характеристики, связанные с вычислительной техникой. Это – число операций и объем требуемой памяти. Даже такой важный фактор, как влияние ошибок округления, чаще всего в конкретных разработках выпадал из сферы внимания. Что же касается структурных свойств алгоритмов, например, таких как модульность, то их изучение так и не вышло из зачаточного состояния. Все это в конечном счете привело к тому, что к моменту широкого внедрения достижений микроэлектроники в создание вычислительных систем вычислительная математика оказалась без нужного багажа знаний, касающихся структуры алгоритмов. Без нужного багажа знаний оказались и смежные науки, в частности, связанные с разработкой алгоритмических языков, компиляторов и архитектуры вычислительных систем. Поэтому сразу появилось большое число вопросов, относящихся к тому, что же понимать

под структурой алгоритмов, как ее конструктивно находить и исследовать, как решать с ее помощью нужные задачи отображения вычислительной математики на архитектуру вычислительных систем.

Вычислительная техника и алгоритмы – это две опоры, на которых строится проблема отображения. Но как бы ни велики были достижения в области развития вычислительной техники, она является всего лишь инструментом для решения прикладных задач. Инструментом, который создается и совершенствуется по своим законам, определяемым успехами микроэлектроники, авторскими идеями, чьими-то амбициями и много чем другим, не всегда даже полезным при проведении практических расчетов. Инструментом, который почти всегда претендует на универсальность своего использования и поэтому почти всегда используется с трудом при решении конкретных задач. Как уже отмечалось, создание общей математической модели процессов функционирования ЭВМ казалось тогда (да и кажется теперь) делом малоперспективным. Поэтому представлялось вполне естественным, что продвижение в проблеме отображения должно начинаться с разработки фундаментального математического аппарата, позволяющего описывать и исследовать детальную информационную структуру алгоритмов. Структуру, показывающую, как в процессе реализации алгоритма отдельные его операции связаны между собой и с памятью ЭВМ.

Отметим сразу, что такой аппарат удалось разработать. Однако наши исследования начались не с этого. По мере осмысления проблемы все большее беспокойство вызывало отсутствие какого-то базового математического формализма, помогающего оценивать качество работы многих функциональных устройств и соответственно этому предлагать те или иные схемы реализации алгоритмов. Дело в том, что одновременное использование многих функциональных устройств является одной из центральных идей, позволяющих получить дополнительное ускорение процесса решения задач. Для оценки их работы были введены различные характеристики, такие как пиковая производительность, средняя производительность, ускорение, эффективность, загруженность и т.п. Всем этим характеристикам надо было придать четкий математический смысл. С другой стороны, примерно в это же время в США, а под их влиянием и в Европе, начались очень активные исследования в области так называемых систолических массивов, которые представляют простейшие вычислительные системы с многими функциональными устройствами. Систолические массивы не имеют памяти и коммуникационной сети, реализуются на одном кристалле и, как утверждалось, достаточно дешевы в изготовлении. Конечно, каждый отдельный систолический массив мог решать только одну задачу, причем самую простую. Но их использование хорошо вписывалось в отображение проблем вычислительной математики на архитектуру вычислительных систем, так как мы как раз и предполагали научиться раскладывать большие задачи на простейшие. Вырисовывалась следующая схема: раскладываем задачу на простейшие, простейшие реализуем с помощью систолических массивов, а вычислительная система в целом получается как объединение этих массивов с помощью подходящей коммуникационной сети. Это и послужило основной причиной для построения и изучения математической модели процесса работы многих функциональных устройств без памяти и коммуникационной сети.

Рассмотрим произвольный ориентированный граф. Будем считать, что в вершинах графа размещены функциональные устройства, простые или конвейерные. Сложность их не ограничивается. Каждое из устройств может выполнять только операции какого-то одного типа. Среди них имеются операции, обеспечивающие ввод или вывод информации. Дуги графа символизируют связи входов и выходов отдельных устройств между собой. Связи остаются неизменными в процессе работы устройств. Информация по ним передается мгновенно по мере необходимости. Несложно указать набор простых правил, при выполнении которых эта модельная вычислительная система будет "работать". Самым существенным из них является необходимость разомкнуть некоторые циклы и все контуры графа на короткий период в начале процесса для загрузки начальных данных. Эта модельная система получила название "конвейерный вычислитель" [2].

Анализ процесса функционирования конвейерных вычислителей позволил придать четкий математический смысл всем характеристикам, связанным с эффективностью использования многих функциональных устройств. Были установлены различные соотношения между ними. Однако самым интересным оказался анализ структуры алгоритма, реализуемого конвейерным вычислителем. Выяснилось, что этот алгоритм представляет объединение не связанных между собой одинаковых алгоритмов, отличающихся друг от друга только значениями входных данных. Другими словами, информационный поток, проходящий через конвейерный вычислитель, обязательно расщепляется на независимые однотипные ветви. Число этих ветвей определяется, главным образом, графом конвейерного вычислителя и может меняться при изменении графа от единицы до бесконечности.

Таким образом, был получен первый важный для того времени результат: если мы хотим, чтобы задача эффективно решалась на вычислительной системе с многими функциональными устройствами конвейерного типа, необходимо, чтобы ее можно было представить как множество подзадач, состоящих из достаточно длинных, не зависящих друг от друга однотипных ветвей вычислений. Отметим, что этого же требовали различные векторные и матричные ускорители, векторно-конвейерные машины типа Крей-1 и т.п. Систематические массивы занимают в этом ряду особое место, и мы еще вернемся к их обсуждению.

Проводя наши исследования процессов функционирования многих устройств, мы не делали никаких предположений о способах организации вычислений. Автоматически оказались в поле зрения параллелизация вычислений, конвейерность функциональных устройств, возможность образовывать сложные конвейеры, векторные и матричные вычисления и т.п. Как показали результаты исследований, эффективное использование многих функциональных устройств, вообще говоря, эквивалентно возможности организовывать конвейерные вычисления. При этом конвейеры надо понимать не в традиционном, а в более широком смысле, в том числе с изменяемыми связями.

На одном полюсе конвейерных вычислений находятся макроконвейерные вычисления. Для процессов этого типа характерно наличие длинных, не обязательно однотипных независимых ветвей вычислений и возможность пренебре-

жения связями и временами передачи информации при реализации этих ветвей. На другом полюсе находятся конвейерные вычисления, реализуемые с помощью систолических массивов. Для процессов этого типа характерно осуществление всех необходимых, в том числе длинных, передач информации на фоне выполнения самих операций.

Вычисления, реализуемые на векторных системах, занимают промежуточное положение и дополнительно характеризуются всего лишь векторной организацией данных. Интересно отметить, что возможность векторной организации данных является отличительной чертой любых вычислений, реализуемых на системе устройств с редко изменяемыми связями. В частности, на любых конвейерных вычислителях длины векторов полностью определяются графом связей реализуемого алгоритма. Тот факт, что на конкретных вычислительных системах длины векторов часто выбираются постоянными, отражает особенности технических решений и не имеет никакого отношения к структуре алгоритмов.

Теперь центральной задачей проблемы отображения становится обнаружение независимых ветвей вычислений в алгоритмах. Но вначале нужно было точно определить, о каких алгоритмах пойдет речь. При выборе класса алгоритмов было принято во внимание несколько обстоятельств.

К моменту внедрения в практику вычислительных систем с многими функциональными устройствами начали разрабатываться специально приспособленные для них численные методы. Такие системы и методы обобщенно стали называться параллельными. Основной целью создания параллельных методов было решение задачи за как можно меньшее число параллельных шагов. Число шагов характеризовало время решения задачи на параллельной системе. На каждом шаге разрешалось выполнять сколь угодно много независимых друг от друга операций. Были получены удивительные математические результаты. Так, например, оказалось, что систему линейных алгебраических уравнений с матрицей порядка n можно решить всего за $O(\log_2^2 n)$ параллельных шагов, выполнить n шагов последовательного линейного рекуррентного процесса можно за $O(\log_2 n)$ параллельных шагов и т.п. Однако выполненный нами анализ показал, что у этих методов нет реальной перспективы. Как правило, они крайне неустойчивы к влиянию ошибок округления, весьма сложны в реализации и очень неэффективно используют функциональные устройства. Время показало, что наш прогноз оправдался.

Более перспективными виделись традиционные численные методы. Их привлекательная сторона заключалась в предсказуемости численного поведения. За длительный срок практического использования они уже были тщательно изучены и протестированы. Оставалось только научиться выделять в этих методах независимые ветви вычислений. Опыт работы на первых вычислительных системах с параллельной архитектурой показывал, что во многих случаях такие ветви удается обнаруживать, используя реорганизацию порядка выполнения операций. При этом довольно часто сохраняется или меняется незначительно численная устойчивость. Поиск нужного порядка вычислений, естественно, не был алгоритмизирован, и для его проведения всегда привлекались специалисты, хорошо знающие численные методы.

К тщательному анализу традиционных численных методов нас подталкивала и другая важная проблема. В течение многих лет профессиональные интересы автора лежали в области вычислительной математики и численного программного обеспечения. Так случилось, что за это время пришлось освоить более десятка различных ЭВМ. И хотя все они были одной и той же фон-неймановской архитектуры, каждый раз при переходе к новой ЭВМ повторялась одна и та же ситуация: приходилось изменять уже созданные программы, хотя написаны они были по всем правилам алгоритмических машинно-независимых языков.

С точки зрения математика, для которого ЭВМ является всего лишь рабочим инструментом, эта ситуация в высшей степени ненормальна. Она противоречит тому, ради чего, собственно говоря, и создавались алгоритмические языки. Ведь первоначальной их целью было освобождение разработчиков алгоритмов от необходимости знать особенности конкретных ЭВМ. Все функции по адаптации программ к конкретным ЭВМ должны были взять на себя компиляторы и операционные системы. Первоначальная цель пока не достигнута. Трудно ожидать, что она будет достигнута в ближайшем будущем. Чтобы прийти к такому выводу, не нужно быть большим знатоком в области алгоритмических языков. Попробуйте найти хотя бы один язык, для которого были бы даны гарантии, что записанные на нем алгоритмы будут без изменения эффективно реализовываться на разных ЭВМ. И очень скоро вы убедитесь, что таких языков нет.

Появление вычислительных систем параллельной архитектуры означало наступление нового периода глобального пересмотра и передела численного программного обеспечения. Учитывая огромную сложность данного процесса, естественно, возникало желание хотя бы как-то его автоматизировать. Для этого была необходима детальная информация о структуре программ, вплоть до связей между отдельными операциями. Но, с другой стороны, программы исключительно интересны и с точки зрения проблемы отображения, так как представляют обширный багаж хорошо отработанных и используемых на практике алгоритмов.

Итак, выбор был сделан. В качестве класса алгоритмов при изучении проблемы отображения решено взять класс программ. Этот выбор подкреплялся еще и тем, что использование алгоритмического языка позволяло устранять многие недоговоренности, характерные для книжного описания алгоритмов, и тем самым сделать анализ более точным. В качестве языка описания программ был взят Фортран. Акцент на этом языке непринципиален. Некоторый аргумент в его пользу связан только с тем, что по своей структуре он наиболее близок к описанию алгоритмов с помощью математических соотношений. В силу простоты языка Фортран его использование не давало возможность программисту сильно запутывать описание алгоритмов. Конечно, основная цель изучения детальной структуры программ была связана с отображением проблем вычислительной математики на архитектуру вычислительных систем. Мы надеялись, что попутно удастся лучше понять проблему переноса численного программного обеспечения на вычислительные системы различной архитектуры и внести какой-то полезный вклад в ее решение.

Первым делом мы обратились к изучению методов анализа программ, используемых в компиляторах вычислительных систем с параллельной архитек-

турой. По своей сути эти методы неизбежно должны выделять независимые ветви вычислений, и поэтому интересно было понять, как они это делают. Мы уже имели достаточно большой свой собственный опыт анализа программ, знали многие узкие места и хорошо понимали, что надо искать в изучаемых методах. Несмотря на то что по методам анализа программ было опубликовано достаточно большое число работ, долгое время оставалось тайной, что же реально делается в компиляторе. Настоящим шоком явилось знакомство с работой [3]. В ней были проанализированы компиляторы большинства параллельных вычислительных систем. Оказалось, что на самых современных системах компиляторы реализуют самые тривиальные методики и, что для нас было особенно интересно, не дают никаких гарантий качеству результатов выполненного анализа.

Знакомство с работами по компиляции программ не прошло бесследно. Во-первых, стало ясно, что со стороны этой деятельности, по смыслу наиболее близкой к проблеме отображения, нет никаких оснований ожидать сколь-нибудь существенную помощь. Во-вторых, выяснилось, что сама эта деятельность остро нуждается в притоке свежих идей. В-третьих, мы получили много полезных сведений об общепринятых в программировании подходах к анализу программ. И, наконец, мы точно поняли, что надо делать.

Для исследования структуры связей на множестве операций в программах традиционно используются ориентированные графы. Две операции называются зависимыми, если при своей реализации они используют одну и ту же переменную. Будем считать отдельные операции вершинами графа. Зависимые операции соединим дугами. Дуга всегда идет из той вершины, которая соответствует операции, выполняемой раньше. Различают четыре вида зависимости, смотря по тому, переисчисляется или используется в качестве аргумента значение переменной в начальной или конечной операции. Соответственно этому с каждой программой связываются четыре типа графов. Каждый граф имеет дуги только одного вида зависимости. Разные графы одного типа могут иметь разное число анализируемых дуг. При исследовании программ определенное значение имеют графы всех типов. Наиболее важным является тип зависимости, называемый истинной. Он соответствует тому случаю, когда в начальной операции значение переменной переисчисляется, а в конечной используется в качестве аргумента.

Если два множества операций не связаны путями графов зависимости, то они представляют независимые ветви вычислений и их можно выполнять независимо друг от друга или, другими словами, параллельно. Определить, зависима или не зависима пара операций, относительно просто. Нужно лишь установить, используют или не используют они одни и те же переменные. Простота притягивает. Возможно, именно поэтому основные усилия специалистов в области изучения структуры программ были направлены на разработку достаточных критериев независимости множеств операций. За исключением тривиальных случаев, графы зависимости никогда не строились явно. Они служили, главным образом, иллюстративными объектами для объяснения того, что делается в конкретной методике. В том виде, как они определялись, графы зависимости и нельзя было построить явно. При многократном использовании памяти ЭВМ в каждую вершину графов будет входить столько много дуг, что

такие графы невозможно описать конечным набором каких-то простых функций.

Для нас с самого начала исследований было очевидно, что нужно стремиться к разработке необходимых и достаточных критериев независимости множеств операций. Использование достаточных критериев имеет серьезный недостаток. Если с их помощью не удастся найти нужные множества операций, то непонятно, что в этой ситуации делать пользователю: или начинать разрабатывать новый метод решения задачи, или каким-то образом преобразовать программу, или, наконец, применить какой-либо более изощренный метод анализа в надежде все-таки найти нужные множества операций. Реализация первых двух путей весьма обременительна для пользователя. Поэтому он более охотно идет по третьему пути. В свою очередь, это обстоятельство стимулирует разработку все новых и новых достаточных критериев независимости.

Поскольку традиционные графы зависимостей конструктивно построить нельзя, нами были предприняты попытки найти другие подходящие объекты, в первую очередь среди подграфов графов зависимостей. Рассмотрим граф зависимостей, у которого все пары зависимых вершин одного типа соединены дугами. Именно эти графы рассматриваются традиционно. Будем называть его максимальным. Программа однозначно определяет порядок выполнения операций. Это означает, что на множестве вершин графа вводится частичный порядок. Обычно его называют лексикографическим. Зафиксируем какую-нибудь вершину. Разобьем все множество дуг максимального графа, входящих в данную вершину, на группы. Отнесем к одной группе дуги зависимости от одной и той же переменной. В каждой группе выберем дугу, у которой начальная вершина лексикографически ближе всего к зафиксированной вершине. Построим основной подграф максимального графа, оставив из каждой группы только одну выбранную дугу. Будем называть такой граф зависимостей минимальным.

Таким образом, с каждой программой однозначно связывались четыре минимальных графа зависимостей. Все эти графы имели одно и то же множество вершин, но различались дугами и их функциональным содержанием. Графы были относительно просты, так как теперь в каждую вершину входило лишь небольшое число дуг. В конкретных случаях графы всегда строились и описывались небольшим числом простых функций. Но прежде чем заняться разработкой общего метода построения минимальных графов по тексту программы, необходимо было убедиться, что с их помощью можно решать содержательные задачи. Особое внимание уделялось минимальному графу истинных зависимостей, или, как мы его называем, графу алгоритма [2].

Результаты посыпались как из рога изобилия. Первое, к чему мы обратились, следуя общей стратегии решения проблемы отображения, – это к построению математических моделей систолических массивов. Как уже отмечалось ранее, интерес к данной проблеме был большим. Общий подход к конструированию систолических массивов основан на следующей идее. Пусть в нашем распоряжении имеется достаточное число функциональных устройств, реализующих операции одного или нескольких типов. Будем называть устройства систолическими ячейками (процессорными элементами, элементарными процессорами, чипами и т.п.). Допустим, что конструктивно они выполнены в виде геомет-

рически одинаковых многоугольников, на границы которых выведены входы и выходы. Теперь начнем складывать из многоугольников различные фигуры, присоединяя без наложения последовательно многоугольник за многоугольником. Если в местах соприкосновения сторон соединить входы и выходы соседних устройств, то получится некоторая вычислительная система. При некоторых дополнительных условиях она и называется систолическим массивом.

При различных операциях, выполняемых систолическими ячейками, и различных фигурах, составленных из многоугольников, мы получаем систолические массивы, реализующие различные алгоритмы. Анализ работы таких систем выполнялся довольно легко. Однако большие трудности вызывал синтез систем, т.е. выбор математического содержания систолических ячеек и составленных из них фигур, при котором систолический массив будет реализовывать заданный алгоритм. Используя минимальные графы зависимостей, нам удалось полностью решить задачу синтеза. В терминах свойств этих графов был указан класс алгоритмов, для которых вообще возможно построение систолических массивов. Процесс построения модели массива сводился всего лишь к проектированию минимальных графов зависимостей на подходящим образом выбранные поверхности. Соответствующие примеры приведены в [2].

Как мы также уже отмечали ранее, выделение независимых ветвей вычислений в программах часто сопровождалось переупорядочиванием множества операций. При переупорядочивании операций получается, строго говоря, другой алгоритм, чем тот, который был описан исходной программой. Вопрос об эквивалентности этих алгоритмов оставался открытым. Минимальные графы зависимостей и здесь оказались полезными. Будем называть алгоритмы эквивалентными по вычислениям, если при одних и тех же входных данных и одним и тем же способом округления результатов промежуточных вычислений они дают одни и те же конечные результаты, включая всю совокупность ошибок округления. Выяснилось, что с точностью до некоторых оговорок алгоритмы, выполняющие одно и то же множество операций, эквивалентны по вычислениям тогда и только тогда, когда их графы алгоритмов изоморфны.

В прямом или косвенном виде минимальные графы зависимостей связаны с многими проблемами, относящимися к изучению алгоритмов. Действительно, реализация записанного программой алгоритма означает рекуррентное вычисление некоторой последовательности величин. Составим для них функциональную матрицу Якоби из частных производных первого порядка. Назовем ее вариационной матрицей алгоритма. Структура ненулевых элементов этой матрицы такая же, как у матрицы смежностей графа алгоритма. Поэтому ее можно вычислять параллельно с реализацией самого алгоритма. Сложность обоих процессов примерно одинакова. Было установлено, что именно вариационная матрица алгоритма является общим звеном в таких разных задачах, как восстановление линейного функционала, быстрое вычисление градиента, исследование влияния ошибок округления и т.п. [4].

Четыре минимальных графа зависимостей, сопровождающих записанный программой алгоритм, предоставляют самую детальную информацию о связях между операциями. Это дает основание считать их носителями информационной структуры алгоритма. Но для эффективного использования сведений о

структуре не хватает описания графов в удобной для использования форме.

Возьмем какой-нибудь ориентированный ациклический граф. Всегда можно написать программу на языке Фортран такую, что сопровождающий ее, например, граф алгоритма будет изоморфен исходному графу. Вроде бы это говорит о произвольной структуре графов зависимостей. Теперь зададим себе вопрос о соответствии подобных примеров практике. Как правило, программы зависят от внешних переменных, значения которых не известны. Такими переменными являются, в частности, размеры матрицы, величина шага сетки, точность и т.п. Написать подобную программу с произвольными графами нельзя, так как от внешних переменных будет зависеть ее длина. Индексные выражения используемых на практике программ обычно весьма просты. Чаще всего они линейны. Основная масса вычислений при наличии внешних переменных никогда не бывает произвольной. Она всегда организуется как многократное циклическое повторение каких-то простых последовательностей операций.

Все сказанное свидетельствует о том, что класс программ, имеющих отношение к реальной деятельности, значительно уже, чем класс всех программ. Это обстоятельство неизбежно должно было сказаться на проблеме отображения, по крайней мере, на эффективности ее решения. Но ведь неизвестно, где проходит и что собой представляет граница между программами.

Мы начали разработку методов построения минимальных графов зависимостей с относительно простого, но очень представительного класса линейных программ. Вычисления в нем описываются произвольной структурой циклов ДО и ветвлений, исполняемыми являются только операторы присваивания и все вхождения переменных, условия ветвления и границы изменения параметров циклов задаются целочисленными выражениями, линейными как по параметрам циклов, так и по внешним переменным. В теории и практике использования программ линейный класс занимает примерно такое же место, как матрицы в конечномерном анализе, численные методы линейной алгебры в вычислительной математике, задачи линейного программирования в оптимизации и т.п. Очень многие программы или их основные фрагменты изначально являются линейными. Еще большее число различных программ, в том числе содержащих вызовы подпрограмм и функций, может быть сведено к линейным. Поэтому всестороннее изучение программ из линейного класса представляло несомненный интерес.

Нами был доказан фундаментальный факт, говорящий о том, что для любой линейной программы любой минимальный граф зависимостей описывается конечной системой функций, линейных как по параметрам циклов, так и по внешним переменным. Число этих функций определяется программой, но не зависит от значений внешних переменных. Возможность явного представления минимальных графов зависимостей конечным числом линейных функций открывало многообещающие перспективы как в изучении самых тонких элементов структуры программ, так и в деле преобразования программ под требования целевого компьютера. И, конечно, с помощью этих функций оказалось возможным строить самые совершенные, в том числе неулучшаемые, критерии независимости множеств операций. Все это стимулировало разработку эффективных методов

их нахождения, исходя только из текста программы. Такие методы были разработаны [4].

Напомним, что одним из важнейших этапов решения проблемы отображения является разложение большой задачи на простейшие с известной структурой. Проведенные исследования показали, что этот этап настолько сложен, что ни о каком его "ручном" выполнении не может быть и речи. Теперь в качестве первоочередного встал вопрос о разработке автономной программной системы для всестороннего анализа больших прикладных программных комплексов. В довольно сжатые сроки такая система была создана в научно-исследовательском вычислительном центре МГУ Вл. В. Воеводиным. Она получила название V-Ray system. Система позволяла изучать структуру программ как на макро-, так и на микроуровне. Анализ на микроуровне был основан на построении и исследовании минимальных графов зависимостей. Система оказалась исключительно эффективной. В качестве подтверждения этого отметим, например, что выполненная нами с ее помощью оптимизация программ из широко известного тестового пакета Perfect Club Benchmarks для компьютеров CRAY Y-MP M90 и CRAY Y-MP C90 оказалась самой лучшей среди тех, которые были доступны для сравнения. С некоторыми сведениями о V-Ray system и ее использовании можно познакомиться в работе [5].

V-Ray system создавалась как в интересах проблемы отображения для анализа структуры программ, так и в интересах проблемы эффективного использования вычислительных систем параллельной архитектуры для адаптации программ к требованиям таких систем. По замыслу главным был первый интерес. По факту главным на текущий момент стал второй интерес. Объясняется это следующим обстоятельством. За последние годы значительно расширились возможности доступа, в том числе удаленного, к вычислительным системам параллельной архитектуры. Пользователи этих систем, как правило, имеют очень сложные задачи, но не имеют достаточных знаний и инструментальных средств для адаптации своих программ. С другой стороны, вокруг V-Ray system образовался высококвалифицированный коллектив, который имеет нужные знания и нужный инструментарий. Поэтому вполне естественно, что какое-то время большее внимание уделялось просветительской и консультационной деятельности, а также адаптации больших конкретных программных комплексов к требованиям больших конкретных параллельных систем. Кстати, эта работа оказалась полезной и в интересах проблемы отображения. Мы увидели, что для эффективного освоения некоторых систем не хватает теоретических знаний о структуре программ.

В первую версию V-Ray system были включены главным образом те результаты исследования программ, которые были связаны с вычислительными системами конвейерного и векторно-конвейерного типов. Но стали появляться многопроцессорные системы и сети компьютеров. Для них узким местом является пересылка данных от процессора к процессору. Потребовались дополнительные теоретические исследования и соответствующее расширение V-Ray system.

Универсальным инструментом для изучения различных реализаций любого конкретного алгоритма как на всех существующих, так и на проектируемых, в том числе даже гипотетических вычислительных системах является граф-

машина [4]. Рассмотрим граф алгоритма. Будем считать, что в его вершинах помещены функциональные устройства, выполняющие соответствующие операции. Установим длительность срабатывания устройств. Пусть дуги соответствуют каналам передачи информации между устройствами. Установим на дугах длительности передач. При необходимости присоединим устройства ввода и вывода информации и установим моменты ввода входных данных. Это и есть граф-машина. Как и в случае конвейерного вычислителя, несложно указать набор простых правил, при выполнении которых эта модельная вычислительная система будет "работать". При любых установленных длительностях и моментах подачи входных данных мы будем получать один и тот же результат, включая всю совокупность ошибок округления. Он будет совпадать с результатом, полученным на конкретной системе, если только у ее функциональных устройств и устройств граф-машины будут реализованы одни и те же правила округления чисел. Как и конвейерный вычислитель, граф-машина не имеет памяти и может сохранять результаты промежуточных вычислений только в самих устройствах. Но в граф-машине каждое из функциональных устройств, включая устройства ввода-вывода, срабатывает только один раз.

Введем на вершинах u графа алгоритма вещественный функционал $t = f(u)$, где t означает момент времени, в который заканчивается работа устройства, помещенного в вершину u . Предположим, что длительности срабатывания всех функциональных устройств граф-машины отличны от нуля. Если в этом случае дуга графа алгоритма идет из вершины u в вершину v , то будем иметь $f(u) < f(v)$. Теперь зафиксируем момент t и разобьем множество Ω всех вершин графа алгоритма на три непересекающиеся группы:

- Ω_1^t – множество вершин, соответствующих операциям, выполнение которых закончилось к моменту t ;
- Ω_2^t – множество вершин, соответствующих операциям, выполнение которых захватывает момент t ;
- Ω_3^t – множество вершин, соответствующих операциям, выполнение которых не началось к моменту t .

Очевидно, что дуги графа алгоритма могут идти только из Ω_1^t в Ω_3^t и из Ω_2^t в Ω_3^t , но не наоборот. Кроме этого, в Ω_2^t нет ни одной пары вершин, которые были бы связаны дугами. Это означает, что функционал $f(u)$ позволяет выделять не связанные друг с другом множества операций и определять направленность дуг графа. Все это можно делать и без введения граф-машины. Но граф-машина дает очень полезные иллюстрации.

В самом деле, введем на вершинах u ориентированного ациклического графа вещественный функционал $f(u)$. Будем называть его строгой (обобщенной) разверткой графа, если для любой пары вершин u, v таких, что дуга идет из вершины u в вершину v , выполняется неравенство $f(u) < f(v)$ ($f(u) \leq f(v)$). Множество обобщенных разверток замкнуто в отношении операций суммы, максимума, минимума и умножения на неотрицательное число. Все они удовлетворяют некоторому дискретному неравенству Беллмана, а оптимальные развертки

– равенству Беллмана. Строгие развертки, как и в случае их привязки к граф-машине, позволяют выделять не связанные друг с другом множества операций на основе анализа поверхностей уровня разверток. Обобщенные развертки также полезны в этом процессе. Например, с их помощью можно разбивать алгоритм на фрагменты, достаточно большие по объему вычислений, но слабо связанные между собой. Это является прямым откликом теории на требования эффективного использования многопроцессорных систем и сети компьютеров. Со многими нетривиальными свойствами разверток и их применением можно познакомиться в работах [4,6].

Сейчас аппарат разверток включается во вторую версию V-Ray system. С его помощью мы надеемся сделать процесс анализа структуры программ и их адаптации к требованиям вычислительных систем с параллельной архитектурой еще более эффективным. Наша уверенность в успехе основана на том, что во многих случаях нам удалось разработать быстрые алгоритмы для нахождения разверток и их использования.

Много лет назад Гурий Иванович Марчук предложил нам заняться новым, совершенно неизведанным научным направлением под названием "Отображение проблем вычислительной математики на архитектуру вычислительных систем". Довольно скоро мы увидели, что к нему примыкают такие разные области, как вычислительные и операционные системы, компиляторы и автономные программные системы, языки программирования, численные методы, дискретная математика, теория оптимальных процессов и др. Специалисты в этих областях говорят на разных языках и далеко не всегда понимают или даже хотят понимать друг друга. Тем не менее, предстояло свести все это в нечто общее в интересах эффективного решения прикладных задач как на существующих вычислительных системах, так и на системах, которые только еще проектировались или рождались пока всего лишь в мыслях. Начиная наши исследования, мы даже не предполагали, во что они могут вылиться. Сейчас создан фундамент нового направления и пройдено несколько шагов. Открылись совершенно необозримые перспективы. Новое направление оказалось на острие многих проблем, связанных с вычислениями. Напомним некоторые из них:

- анализ ошибок округления;
- быстрое вычисление градиента и производной;
- быстрое восстановление линейного функционала;
- декомпозиция алгоритмов;
- восстановление математических формул;
- использование распределенной и иерархической памяти;
- построение систолических массивов;

- адаптация программ к конкретным компьютерам;
- выбор оптимальной архитектуры компьютера;
- обнаружение узких мест алгоритмов;
- конструирование параллельных численных методов;
- создание портбельного численного программного обеспечения;
- сравнение языков программирования.

Пользуясь случаем, выражаю свою глубокую признательность Гурию Ивановичу Марчुक за предоставленную возможность заниматься неизведанным, но увлекательным направлением. Без его внимания, заинтересованности и терпения в ожидании результатов наши исследования проходили бы не столь широко и интенсивно и, скорее всего, давно бы заглохли, как глохнут многие начинания в нашей жизни, если нет должной поддержки.

ЛИТЕРАТУРА

1. Марчук Г.И., Котов В.Е. Проблемы вычислительной техники и фундаментальные исследования // Автом. и вычисл. техн. 1979. №2. С. 3–14.
2. Воеводин В.В. Математические модели и методы в параллельных процессах. –М.: Наука, 1986. –296 с.
3. Zhiyu Shen, Zhiyuan Li, Pen-Chung Yew. An empirical study of fortran programs for parallelizing compilers // IEEE Trans. on Parallel and Distributed Systems, July 1990. P. 350–364.
4. Voevodin V.V. Mathematical foundation of parallel computing.–World Scientific Publishing Co., Series in Computer Science. 1992. Vol. 33. –343 p.
5. Voevodin V.V., Voevodin V.V. Analytical methods and software tools for enhancing scalability of parallel applications // Proc. of Intel. Conf. HiPer'99, Norway, 1999. P. 489–493.
6. Воеводин В.В. Информационная структура алгоритмов. –М.: Изд-во МГУ, 1997. –139 с.

СОДЕРЖАНИЕ

<i>К 75-летию академика Г.И. Марчука</i>	3
Методы расчета ядерных реакторов	
Владимиров В. С., Лебедев В. И. <i>Ядерная энергетика и математика</i>	5
Вычислительная математика	
Агошков В. И. <i>Сопряженные уравнения и алгоритмы возмущений в задаче об оптимальных траекториях</i>	36
Бахвалов Н. С., Эглит М. Э. <i>Длинноволновая асимптотика с дисперсией для распространения волн в стратифицированных средах</i> ...	54
Кузнецов Ю. И. <i>Матрично-многочленная структура в R^n</i>	67
Смелов В. В. <i>Корректная версия S_n-метода в теории переноса излучения</i>	79
Шутяев В. П., Пармузин Е. И. <i>Численное решение проблемы об усвоении данных для полулинейного параболического уравнения</i>	84
Модели и методы в задачах физики атмосферы	
Дымников В. П. <i>Метод функции Грина в нелинейных задачах физики атмосферы</i>	99
Залесный В. Б., Тамсалу Р. Э. <i>Численный анализ морской динамики</i>	110
Кордзадзе А. А., Деметрашвили Д. И. <i>Численные эксперименты по модели динамики Черного моря, учитывающей поглощение солнечной радиации</i>	125
Пененко В. В. <i>Вариационные принципы и оптимизация во взаимосвязанных задачах экологии и климата</i>	135
Саркисян А. С., Залесный В. Б. <i>Методы расщепления и сопряженных уравнений в задачах динамики океана</i>	149
Сушкевич Т. А. <i>О сферической модели излучения Земли</i>	168
Wallace J. M. <i>Dominant modes of climate variability</i>	192
Математические модели в иммунологии	
Бочаров Г. А., Гольдман И. Е. <i>Математическое исследование асимптотической динамики экспериментальных вирусных инфекций</i>	198
Математическое моделирование в проблемах окружающей среды	
Алоян А. Е. <i>Математическое моделирование взаимодействия газовых примесей и аэрозолей в атмосферных дисперсных системах</i>	214
Sultangazin U. <i>The modeling of sustainable development of environmentally hazardous areas in Kazakhstan in GIS</i>	231
Параллельные вычисления и архитектура ЭВМ	
Воеводин В. В. <i>Отображение проблем вычислительной математики на архитектуру вычислительных систем</i>	242

Научное издание

**ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА
И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ**

*Труды международной конференции
Под редакцией акад. В.П. Дымникова*

Том I

ЛР №021026 от 04.01.96.

Институт вычислительной математики
Российской академии наук

117930 Москва, ул. Губкина, д. 8.

Оригинал-макет изготовлен в ИВМ РАН
Компьютерная верстка Каркача А.С.

Подписано в печать 1 июня 2000 г.

Формат 70 × 100¹/₁₆. Печать офсетная.

Уч.-изд. л. 16. Тираж 200 экз. Заказ

Отпечатано в Производственно-издательском комбинате ВИНТИ.

140010 г. Люберцы Московской обл., Октябрьский пр-т, 403.

Тел. 554-21-86