

# ВАРИАЦИОННАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ КОРРЕКТНЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ ПРЯМЫХ, СОПРЯЖЕННЫХ И ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ

В. В. Пененко

*Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

УДК 519.63

Для построения корректных методов используются вариационные принципы со строгими и слабыми ограничениями. При их формулировке мы исходим из того, что математические модели и данные мониторинга представляют описание одних и тех же исследуемых объектов, но разными средствами. Вариационные принципы предоставляют универсальный инструмент для согласования пространственно-временных масштабов изучаемых процессов и объединения всех компонентов технологии моделирования. Для построения численных моделей используется концепция сопряженных интегрирующих множителей в сочетании с методами расщепления операторов моделей процессов и декомпозиции функционалов вариационного принципа. В результате получается так называемая «бесшовная» технология математического моделирования, согласовывающая алгоритмы решения прямых, сопряженных и обратных задач. Эффекты регуляризации и корректность этих алгоритмов обеспечиваются свойствами безусловной корректности сопряженных задач, полученных с использованием интегрирующих множителей. Особую роль в этой технологии играют прямые алгоритмы последовательного усвоения доступных данных наблюдений с оценкой неопределённостей.

**Ключевые слова:** вариационный принцип, строгие и слабые ограничения, дискретно-аналитические аппроксимации, сопряженные интегрирующие множители, корректность

## Введение

Здесь мы представим некоторые аспекты построения корректных методов для решения условно-корректных, сопряженных и обратных задач. Их теоретическую основу составляют вариационные принципы Эйлера — Лагранжа для минимизации целевых функционалов с ограничениями и метод множителей Лагранжа для учета этих ограничений [2].

Принципиальные положения этого подхода разрабатывались для четырехмерных задач гидротермодинамики геофизических жидкостей (атмосфера, водные объекты) и охраны окружающей среды в условиях природных и антропогенных воздействий. Для их решения используются математические модели и данные мониторинга исследуемых процессов.

К числу основных факторов, приводящих к условной корректности постановок и методов решения задач, относятся неопределенности как в формулировке самой модели исследуемых процессов, так и в задании входных данных, начальных и граничных условий для их решения. Особенно это проявляется в тех случаях, когда в качестве входной информации используются данные мониторинга процессов, а входные данные и параметры моделей, функции состояния моделей и функции неопределенностей оцениваются посредством решения обратных задач.

## 1 Организация методов с оценками неопределённостей

Для работы в условиях неопределенностей в моделях и данных универсальный математический инструмент обеспечивают вариационные принципы в формулировке со слабыми ограничениями. При этом целевой функционал определяет меру отклонений между результатами расчетов по моделям процессов и результатами

---

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 17-01-00137) и Программ фундаментальных исследований РАН I.33П и II.2П/1.3.

мониторинга их реального поведения в некоторой, удобной для вычислений и физического представления, энергетической норме. Математическая модель выступает в роли ограничений на класс функций состояния и как связь между функциями состояния, параметрами и входными данными, а также с функциями неопределенностей. Объединение моделей с целевыми функционалами осуществляется с помощью метода распределенных в пространстве и времени множителей Лагранжа. Он дает возможность при работе с многомерными моделями процессов учитывать дополнительные условия и связи между искомыми и входными объектами моделей, не меняя их внутренней структуры. Это удобно для организации сложных вычислительных технологий. Для их определения вариационный принцип дает систему соответствующих сопряженных уравнений.

Заметим, что в прикладных задачах вместо термина “множитель Лагранжа” используется термин “функция ценности” целевого функционала по отношению к его содержанию [3, 4]. Целевые функционалы подлежат оценке в пространстве функций состояния. Поэтому система моделирования строится так, чтобы обеспечить согласование решений прямых, сопряженных и обратных задач.

Таким образом, из вариационного принципа получаются три вида искоемых функций: функции состояния, сопряженные функции и функции неопределенностей моделей. Заметим, что выбор условий для сопряженной задачи определяется исследователем, исходя из общей цели изучаемой проблемы. Самое главное при этом: сформулировать сопряженную задачу так, чтобы она была безусловно корректна и чтобы не нарушались соотношения баланса, определенные вариационным принципом.

В свою очередь, функции неопределенностей выражают количественную оценку ошибок прогнозирования на основе системы модель-данные наблюдений. Их роль подобна роли невязки в методе минимальных невязок в линейной алгебре. Это значит, что в процессе решения задачи с усвоением данных мы получаем диагностическую оценку качества системы прогнозирования. По ней можно судить о предсказуемости моделируемых процессов по отношению к данным их мониторинга различными системами наблюдений. Если используется метод расщепления, то система для нахождения этих трех искоемых функций также представляет совокупность локально-одномерных этапов расщепления, которые решаются прямыми неитерационными алгоритмами. Если модель предполагается точной, то функция неопределенностей не участвует непосредственно в постановке задачи в системе уравнений, и вариационный принцип получается со строгими ограничениями. В этом случае оценке подлежит только функция начального состояния модели. И для решения задачи усвоения данных в модели требуется организация итерационных процессов.

Исходную задачу можно рассматривать также с позиций оптимального управления системой по заданному целевому функционалу. В этом случае, в рамках вариационного принципа со слабыми ограничениями, искомые функции неопределенностей и управления формально равноправны. Поэтому для их нахождения применимы предлагаемые прямые алгоритмы с использованием множителей Лагранжа в роли сопряженных функций.

## 2 Сопряженные интегрирующие множители в технологиях моделирования

В структуре вариационных принципов для решения многомерных и разномасштабных задач мы используем концепцию сопряженных интегрирующих множителей. Конструктивно она применяется вместе с методами декомпозиции и расщепления и техникой конечных элементов/объемов [12]. При таком сочетании базовых объектов вычислительной математики получаются совокупности локально-одномерных задач по координатным переменным и по процессам с учетом их характерных масштабов. Все задачи согласованы в рамках функционала интегрального тождества для общей модели процессов и обладают свойствами суммарной аппроксимации [6]. Схемы расщепления выбираем так, чтобы они допускали параллельную реализацию [7].

После вычисления функций состояния, сопряженных функций, функций неопределенностей, которые связаны в единую структуру, на их основе проводится расчет функций чувствительности целевых функционалов для общей системы уравнений к вариациям параметров моделей, источников, начальных данных и граничных условий. Эти функции необходимы для организации алгоритмов решения обратных задач, для идентификации перечисленных объектов с использованием данных наблюдений. При этом нет ограничений на состав и объемы данных и на пространственно-временное разрешение численных моделей. Количество таких функций чувствительности равно числу варьируемых компонент в дискретном представлении моделей и областей их определения.

Фундаментальные свойства концепции сопряженных интегрирующих множителей проявляются в том,

что при её применении понижается порядок исходной задачи на единицу. Для нахождения решений строятся соотношения баланса типа законов сохранения. Эти соотношения определяются для всей области в целом и для каждого конечного элемента её декомпозиции. При этом в рамках вариационного принципа набор сопряженных задач согласован на границах конечных элементов/объемов с условиями непрерывности и дифференцируемости функции состояния основной задачи. Как следствие, численные схемы получаются сбалансированными во всей области решения задачи. Например, для операторов задач конвекции-диффузии-реакции в предположении кусочно-постоянных коэффициентов и источников получаются точные дискретно-аналитические схемы с точным учетом граничных условий всех известных типов.

Такие свойства численных схем безусловно востребованы в задачах конвекции-диффузии с преобладающей конвекцией. Обсуждение возникающих проблем имеется в [10]. Аналогично, модели процессов трансформации различных субстанций основаны на системах жестких уравнений. В них каждый из механизмов реакции имеет свой горизонт предсказуемости. Методы их согласования с использованием технологии сопряженных интегрирующих множителей представлены в [11].

Сопряженные уравнения, возникающие при реализации нашей концепции в рамках вариационного принципа, однородны, а сопряженные задачи на их основе мы формулируем так, чтобы они были безусловно корректными. Это обеспечивает корректность алгоритма в целом для корректных и условно корректных постановок исходных задач. Алгоритмы на основе вышеупомянутых соотношений баланса организуются так, чтобы одновременно с расчетом функций состояния получались и функции потоков этих субстанций. Это необходимо для решения обратных задач.

### 3 Эффективность применения методики

К условно-корректным задачам можно отнести задачи в многомерных областях со сложными границами. Часто такие задачи формулируются в рамках метода «фиктивных» областей. Суть этого метода состоит в следующем. Область со сложной геометрией дополняется «фиктивными» частями до более простой регулярной структуры. Соответственно, исходная математическая постановка заменяется близкой, в некотором смысле, задачей, но уже в расширенной простой области. Здесь возможны различные подходы в организации метода фиктивных областей.

Так, для задач эллиптического типа В.К.Саульев предложил метод с модификацией коэффициентов диффузии в фиктивной области [8]. Развитие этого метода представлено в [5]. Однако при таком подходе при построении численных схем часто возникают сингулярные, условно-корректные задачи в окрестности границ фиктивных областей при согласовании решений в основной и фиктивной частях расширенной области.

Аналогичные проблемы с этими и другими типами операторов возникают в задачах геофизической гидродинамики и охраны окружающей среды при необходимости учета рельефа Земной поверхности, сложной конфигурации береговых очертаний и рельефа дна водных объектов, компоновки объектов в структуре городских агломераций и т.д.

Использование в этих задачах вариационной концепции сопряженных интегрирующих множителей в структуре методов расщепления и методов конечных элементов дает возможность строить регулярные конструкции численных схем без модификации основной постановки задачи на границах фиктивной области с точным учетом условий Дирихле и естественных условий второго и третьего рода на фактических границах задачи в формате расширенной области. При этом дополнительные фиктивные области вводятся только для обеспечения регулярности структуры массивов с позиций удобства программирования и параллельной организации вычислений.

Для решения широкого класса задач в различных областях науки и техники активно используются вариационные методы конечных элементов/объемов, вариационно-разностные и проекционно-сеточные методы. С ними связаны так называемые разрывные методы Галеркина и Галеркина — Петрова. Для таких методов необходимо строить базисные функции с учетом специфики задачи [5,9].

В этом плане эффективное дополнение перечисленным методам составляют методы, основанные на применении концепции сопряженных интегрирующих множителей в сочетании с методами расщепления. В них не требуется формирование базисных пространств. Вместо этого, для построения аппроксимаций привлекаются решения однородных уравнений сопряженных задач на каждом интервале сеточной области. Затем на основании соотношений баланса строятся уравнения, связывающие значения функций и потоков на границах локальных областей. В результате получаются трехточечные дискретно-аналитические численные схемы. Этот подход также применим в случае методов конечных элементов на регулярных и нерегулярных представлениях конструкций сеточных областей [12].

## Заключение

Таким образом, применение вариационного подхода и концепции сопряженных интегрирующих множителей дает возможность построить корректные алгоритмы для решения широкого круга научных и практических задач, которые в принципе могут быть условно-корректными по постановке, методам решения или при наличии неопределённостей различного происхождения как в моделях, так и доступной информации, сопровождающей эти модели.

## Список литературы

- [1] Айнс Э.Л. Обыкновенные дифференциальные уравнения. Харьков: ОНТИ, 1939
- [2] Курант Р., Гильберт Д. Методы математической физики. т.1. М.— Л.: Государственное издательство технико-теоретической литературы. 1951. 476 с.
- [3] Льюинс Дж. Ценность. Сопряженная функцию М: Атомиздат, 1972. 174 стр.
- [4] Марчук Г. И. Численные методы расчёта ядерных реакторов. — М.: Атомная энергия, 1959. 162 с.
- [5] Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. М.:Наука 1980. 534 с.
- [6] Пененко В.В. Методы численного моделирования атмосферных процессов. Л.: Гидрометеиздат, 1981. 352 с
- [7] Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Аддитивные схемы для задач математической физики. — М., Наука, 2001, 319 с.
- [8] Саульев В.К. О решении некоторых краевых задач на быстродействующих вычислительных машинах методом фиктивных областей.— Сиб. Мат. журнал, 1963, №4
- [9] Buffa A., Hughes T.J.R. and Sangalli Analysis of a multiscale discontinuous Galerkin method for convection-diffusion problems. SIAM J. Numer. Anal. 44, 1420–1440 (2006).
- [10] John V., Knobloch, P.: On spurious oscillations at layers diminishing (SOLD) methods for convection-diffusion equations: part I—a review. Comput. Methods Appl.Mech.Engrg, 2007, v.196, p. 2197–2215.
- [11] Penenko, V.V., Tsvetova E.A. Variational methods of constructing monotone approximations for atmospheric chemistry models.— Numerical analysis and applications, 2013, vol. 6, p. 210–220.
- [12] Penenko V.V., Tsvetova E.A., Penenko A.V. Variational approach and Euler’s integrating factors for environmental studies//Computers and Mathematics with Applications. 2014. V. 67. P. 2240–2256.

*Владимир Викторович Пененко — д.ф.-м.н., проф., заведующий лабораторией Института  
вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;  
e-mail: penenko@sscc.ru.*

*Дата поступления — 31 мая 2017 г.*