УДК 517:519.6

А.В. ГЛАДКИЙ, Ю.А. ГЛАДКАЯ

ОБ ОДНОЙ СХЕМЕ РАСЩЕПЛЕНИЯ В ЗАДАЧАХ ДИФФУЗИИ И ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

Аннотация. Рассмотрена задача математического моделирования и оптимизации нестационарных процессов диффузии и теплопроводности. Для численного решения многомерных начально-краевых задач диффузии и теплопроводности предложен подход, использующий идею расщепления и реализацию полученных разностных схем с помощью явных схем бегущего счета. Исследованы вопросы построения разностных схем расщепления, аппроксимации и устойчивости по начальным данным. Для численного решения задачи оптимального управления для параболического уравнения изучены дифференциальные свойства функционала качества, предложен итерационный алгоритм определения оптимального управления.

Ключевые слова: параболическое уравнение, задача оптимального управления, численный метод, методы расщепления, разностная схема, устойчивость.

ВВЕДЕНИЕ

Математическое моделирование является важнейшим и наиболее перспективным направлением исследования актуальных задач экологии, многочисленных динамических тепловых и диффузионных процессов, описываемых параболическими уравнениями второго порядка [1–5].

Основой компьютерной технологии математического моделирования процессов с распределенными параметрами являются базовые модели и эффективные численные алгоритмы решения дифференциальных уравнений в частных производных, которые базируются на использовании конечно-разностных, конечно-объемных и конечно-элементных аппроксимаций [5–20].

Для вычислительной практики значительный интерес представляют методы факторизации и расщепления, позволяющие свести решение исходных задач к решению уравнений с меньшей размерностью.

Целью настоящей работы является разработка дискретных математических моделей и построение безусловно устойчивых схем для численного моделирования и оптимизации нестационарных тепловых и диффузионных процессов на основе разностных схем бегущего счета с явной организацией вычислений.

В основе схем расщепления переход на новый временной слой связан с решением ряда более простых задач. Предложенный подход к построению дискретных моделей использует идею расщепления и реализацию полученных схем на основе явных схем бегущего счета, приведенных в [7] для одномерного уравнения диффузии.

В работе для построенных разностных схем бегущего счета исследованы вопросы аппроксимации и устойчивости по начальным данным. В целях применения предложенных разностных схем для численного решения задачи оптимального управления изучены дифференциальные свойства функционала качества, приведен итерационный алгоритм определения оптимального управления.

Отметим, что реализация предложенного подхода к решению пространственных нестационарных уравнений на графических процессорах и многопроцессорных вычислительных системах с распределенной памятью позволяет значительно сократить временные затраты по сравнению с последовательными алгоритмами.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧ

Вопросы построения и исследования устойчивости разностных схем расщепления проиллюстрируем на примере краевой задачи для параболического уравнения второго порядка вида

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \operatorname{div}(k \operatorname{grad} u) + f,$$

которое является базовым при моделировании и оптимизации многочисленных нестационарных теплофизических или диффузионных процессов [2, 3, 6].

Пусть в декартовой системе координат (x, y) на временном интервале $0 < t \le T$ функция $u(x, y, t)$ удовлетворяет в прямоугольной области $G = \{(x, y)|,\ 0 < x < l_1, 0 < y < l_2\}$ с границей ∂G двумерному нестационарному параболическому уравнению

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x}\left(k_1 \frac{\partial u}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial y}\left(k_2 \frac{\partial u}{\partial y}\right) = f(x, y, t),\ (x, y) \in G,\ t \in (0, T], \tag{1}$$

в котором $u(x, y, t)$ — искомая функция (характеристика исследуемых процессов), коэффициенты $k_\alpha = k_\alpha(x, y) > \chi > 0,\ \alpha = 1, 2,$ — положительные непрерывно-дифференцируемые функции, $f(x, y, t)$ — функция распределения источников. Уравнение (1) дополняется однородными граничными условиями Дирихле

$$u(x, y, t) = 0,\ (x, y) \in \partial G,\ 0 < t \le T. \tag{2}$$

Кроме того, для корректной постановки математических моделей граничные условия следует дополнить начальным условием

$$u(x, y, 0) = u_0(x, y),\ (x, y) \in G. \tag{3}$$

Сформулируем математическую постановку задачи оптимального управления для параболического уравнения (1) в случае, когда требуется найти характеристики распределенной системы с заданными свойствами.

Для задач управления процессами диффузии (теплофизики), происходящими в некоторой ограниченной односвязной области G с границей ∂G на отрезке времени $0 < t \le T$, состояние распределенной системы описывается параболическим уравнением

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x}\left(k_1 \frac{\partial u}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial y}\left(k_2 \frac{\partial u}{\partial y}\right) = f(x, y, t) + v(x, y, t),\ (x, y) \in G,\ t \in (0, T], \tag{4}$$

где $f(x, y, t)$ — заданная функция, $v(x, y, t)$ — управляющая функция, $k_1(x, y, k_2(x, y)),$ — заданные положительные функции, $k_\alpha(x, y) > \chi > 0,\ \alpha = 1, 2$.

Для уравнения (4) будем рассматривать начальное

$$u(x, y, 0) = u_0(x, y),\ (x, y) \in G \tag{5}$$

и граничное

$$\left.\left(\frac{\partial u}{\partial N} + \beta(x, y, t) u\right)\right|_{\partial G} = \sigma(x, y, t),\ (x, y) \in \partial G,\ 0 < t \le T, \tag{6}$$

условия соответственно, где $\partial u / \partial N$ — конормальная производная, которая определяется

$$\frac{\partial u}{\partial N} = k_1 \frac{\partial u}{\partial x} \cos(n, x) + k_2 \frac{\partial u}{\partial y} \cos(n, y),$$

n — единичный вектор внешней нормали к ∂G, $\sigma(x, y, t)$ —заданная функция, $\beta(x, y, t) > 0$ — некоторая функция, определенная на ∂G.

В дальнейшем без ограничения общности будем предполагать, что $k_1(x, y) = k_2(x, y) = k(x, y)$, т.е. конормальная производная $\partial u / \partial N$ совпадает с выражением $k \partial u / \partial n$.

Математическую постановку экстремальной задачи сформулируем как решение задачи минимизации некоторого функционала в целях обеспечения минимального отклонения характеристик моделируемого поля от заданных в области G. При этом в качестве управления принимается распределение $v(x, y, t)$ в правой части параболического уравнения (4). Тогда одну из экстремальных задач можно сформулировать следующим образом.

Требуется найти допустимое управление $v = v_0(x, y, t)$ и соответствующее ему решение $u = u_0(x, y, t)$ задачи (4)–(6), чтобы функционал

$$J_\varepsilon(v) = \int_G (u(x, y, T) - h(x, y))^2 dxdy + \frac{1}{\varepsilon^2} \int_0^T dt \int_G v^2(x, y, t) dxdy \tag{7}$$

принимал наименьшее возможное значение. Здесь T — фиксированный момент времени, $h(x, y)$ — заданная функция, $v(x, y, t)$ — управление из некоторого выпуклого замкнутого множества $U = \{ v(x, y, t) \in L_2(Q)\}$, где $L_2(Q)$ — пространство вещественных функций, интегрируемых с квадратом в области

$$Q = \{(x, y, t)|, 0 < x < l_1, 0 < y < l_2, 0 < t \le T\}. \tag{8}$$

Скалярное произведение и норма в $L_2(Q)$ определяются по формулам

$$(u, v) = \int_Q u(x, y, t) v(x, y, t) dGdt, \ || v || = (v, v)^{1/2} = \left(\int_Q v(x, y, t)^2 dGdt \right)^{1/2}.$$

Отметим, что для выделения ограниченного решения в функционал качества (7) добавлен стабилизирующий функционал $\frac{1}{\varepsilon^2} || v ||^2$ при некотором заданном $\varepsilon > 0$.

Будем рассматривать задачу управления без ограничений ($U = H = L_2(Q)$), т.е. оптимизационная задача состоит в определении управления w, при котором функционал (7) достигает своей нижней грани

$$J_\varepsilon(w) = \inf_{v \in H} J_\varepsilon(v). \tag{9}$$

РАЗНОСТНАЯ СХЕМА БЕГУЩЕГО СЧЕТА

Для численного решения многомерных задач распространения загрязнений разработано большое количество вычислительных алгоритмов, которые базируются, в основном, на методах расщепления [6, 8, 16]. При этом значительный интерес представляет построение разностных схем расщепления с заданными свойствами, в частности, с явной организацией вычислений.

Двухшаговая схема расщепления. Изложим подход к построению разностных схем расщепления для решения многомерных задач на примере двухшаговой схемы расщепления для начально-краевой задачи (1)–(3). В рамках этого подхода двухшаговую схему расщепления на дифференциальном уровне можно получить, представляя параболическое уравнение (1) в операторном виде

$$\frac{\partial u}{\partial t} + (L_1 + L_2) u = f, \tag{10}$$

где

$$L_1 u = L_2 u = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x}\left(k_1 \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial y}\left(k_2 \frac{\partial u}{\partial y} \right).$$

Пусть для некоторого момента времени t решение уравнения (10) известно, тогда для момента $\hat{t} = t + \tau$ значение $u(x, y, \hat{t})$ можно представить с помощью ряда Тейлора в виде

$$u(x, y, \hat{t}) = u(x, y, t) + \tau \frac{\partial u(x, y, t)}{\partial t} + O(\tau^2) =$$

$$= [E - \tau L_1 - \tau L_2] u(x, y, t) + \tau f + O(\tau^2). \tag{11}$$

Рассмотрим две вспомогательные задачи:

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} + L_1 u_1 = \frac{1}{2} f, \ u_1(x, y, t) = u(x, y, t), \tag{12}$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} + L_2 u_2 = \frac{1}{2} f, \ u_2(x, y, t) = u_1(x, y, \hat{t}). \tag{13}$$

Легко видеть, что решения рассматриваемых задач (12), (13) можно записать в виде

$$u_1(x, y, \hat{t}) = [E - \tau L_1] u_1(x, y, t) + \frac{\tau}{2} f + O(\tau^2),$$

$$u_2(x, y, \hat{t}) = [E - \tau L_2] u_2(x, y, t) + \frac{\tau}{2} f + O(\tau^2).$$

Учитывая, что $u_2(x, y, t) = u_1(x, y, \hat{t})$, имеем

$$u_2(x, y, \hat{t}) = [E - \tau L_1 - \tau L_2] u(x, y, t) + \tau f + O(\tau^2). \quad (14)$$

Принимая $u(x, y, \hat{t}) = u_2(x, y, \hat{t})$ и сравнивая выражения (11) и (14), приходим к утверждению, что решая последовательно задачи (12), (13), получаем решение уравнения (10) для момента времени $\hat{t}$ с погрешностью $O(\tau)^2$.

Для численного решения нестационарных уравнений (12), (13) в области $\overline{G}$ введем равномерную разностную сетку

$$\overline{\omega}_h = \omega_h \cup \gamma_h = \{(x, y) : x = x_i = ih_1,\ i = \overline{0, N_1};$$

$$y = y_j = jh_2,\ j = \overline{0, N_2};\ h_\alpha = l_\alpha / N_\alpha,\ \alpha = 1, 2\},$$

где ω_h — множество внутренних узлов, а γ_h — граничных узлов. Определим конечномерное гильбертово пространство H_h сеточных функций, заданных на сетке $\overline{\omega}_h$ и равных нулю на ее границе. Скалярное произведение в H_h зададим соотношением

$$(\varphi, \psi) = \sum_{(x, y \in \omega_h)} \varphi(x, y) \psi(x, y) h_1 h_2, \quad (15)$$

тогда норма $||\varphi|| = \sqrt{(\varphi, \varphi)}$. Для самосопряженного и положительного разностного оператора D можно определить энергетическое пространство H_D со скалярным произведением $(\varphi, \psi)_D = (D\varphi, \psi)$ и нормой $||\varphi||_D = \sqrt{(D\varphi, \varphi)}$.

Пусть $\omega_\tau = \{t : t = t_n = n\tau,\ n = \overline{0, N},\ N\tau = T\}$ — равномерная временная сетка с шагом τ. В дальнейшем при исследовании нестационарных задач будем рассматривать сеточные функции $\varphi(t_n)$ дискретного аргумента $t_n \in \omega_\tau$ со значениями из конечномерного пространства H_h, т.е. $\varphi(t_n) \in H_h$.

Дифференциальные операторы L_1, L_2 будем аппроксимировать разностными схемами с помощью интегро-интерполяционного метода, использовав для аппроксимации диффузионных операторов в момент времени $t = t_n$ сеточные операторы

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(k_1 \frac{\partial u}{\partial x}\right) \cong \frac{1}{h_1}\left(k_1\Big|_{i+\frac{1}{2}, j} \frac{(\varphi_{i+1,j}^n - \varphi_{i,j}^n)}{h_1} - k_1\Big|_{i-\frac{1}{2}, j} \frac{(\varphi_{i,j}^n - \varphi_{i-1,j}^n)}{h_1}\right),$$

$$\frac{\partial}{\partial y}\left(k_2 \frac{\partial u}{\partial y}\right) \cong \frac{1}{h_2}\left(k_2\Big|_{i, j+\frac{1}{2}} \frac{(\varphi_{i,j+1}^n - \varphi_{i,j}^n)}{h_2} - k_2\Big|_{i, j-\frac{1}{2}} \frac{(\varphi_{i,j}^n - \varphi_{i,j-1}^n)}{h_2}\right).$$

Тогда, например, оператору L_1 в узлах (x_i, y_j) двумерной сетки можно поставить в соответствие разностный оператор

$$\Lambda_1 \varphi = -\frac{1}{2}(a_1 \varphi_{\bar{x}})_x - \frac{1}{2}(a_2 \varphi_{\bar{y}})_y,\ (x, y) \in \omega_h,$$

который аппроксимирует дифференциальный оператор со вторым порядком. Здесь φ — сеточная функция, заданная в узлах сетки ω_h, и используются общепринятые обозначения теории разностных схем [6, 21]

$$\varphi = \varphi(x_i, y_j, t_n) = \varphi^n_{i,j} = \varphi^n = \varphi_{i,j},$$

$$\varphi_t = (\varphi^{n+1} - \varphi^n)/\tau, \ \varphi_x = (\varphi_{i+1,j} - \varphi_{i,j})/h_1, \ \varphi_{\bar{x}} = (\varphi_{i,j} - \varphi_{i-1,j})/h_1,$$

$$(a_1\varphi_{\bar{x}})_x = \frac{1}{h_1}(a_{1i+1}\varphi_x - a_{1i}\varphi_{\bar{x}}) = \frac{1}{h_1^2}(a_{1i+1}\varphi_{i+1} - (a_{1i+1} + a_{1i})\varphi_i + a_{1i}\varphi_{i-1}),$$

$$a_1 = a_{1i} = a_{1i,j,k} = k_{1i-1/2} = k_1(x_{i-1/2}, y_j).$$

Аналогично определяются разностные операторы по другому координатному направлению, которые используются для аппроксимации дифференциальных выражений L_1, L_2:

$$\varphi_y = (\varphi_{i,j+1} - \varphi_{i,j})/h_2, \ \varphi_{\bar{y}} = (\varphi_{i,j} - \varphi_{i,j-1})/h_2,$$

$$(a_2\varphi_{\bar{y}})_y = \frac{1}{h_2}(a_{2j+1}\varphi_y - a_{2j}\varphi_{\bar{y}}) =$$

$$= \frac{1}{h_2^2}(a_{2j+1}\varphi_{j+1} - (a_{2j+1} + a_{2j})\varphi_j + a_{2j}\varphi_{j-1}),$$

$$a_2 = a_{2j} = a_{2i,j} = k_{2i,j-1/2} = k_2(x_i, y_{j-1/2}).$$

Учитывая, что на решении дифференциальной задачи (12) справедливо соотношение

$$\Lambda_1 u_1 = L_1 u_1 + O(|h|^2), \ |h|^2 = h_1^2 + h_2^2,$$

легко убедиться, что неявная разностная схема

$$\varphi_t - \frac{1}{2}(a_1\varphi^{n+1}_{\bar{x}})_x - \frac{1}{2}(a_2\varphi^{n+1}_{\bar{y}})_y = \frac{1}{2}f^{\,n+1/2} \tag{16}$$

аппроксимирует уравнение (12) с первым порядком точности по времени и вторым порядком точности по пространству.

Если в уравнении (16) операторы φ_x^{n+1}, φ_y^{n+1} заменить соответствующими операторами при $t = t_n$, то в результате получим двухслойную схему бегущего счета

$$\varphi_t - \frac{1}{2h_1}(a_{1i+1}\varphi_x^n - a_{1i}\varphi^{n+1}_{\bar{x}}) - \frac{1}{2h_2}(a_{2j+1}\varphi_y^n - a_{2j}\varphi^{n+1}_{\bar{y}}) = \frac{1}{2}f^{\,n+1/2}. \tag{17}$$

Поступая аналогично, для решения уравнения (13) можно получить двухслойную схему бегущего счета. Действительно, в этом случае рассматривается неявная разностная схема

$$\varphi_t - \frac{1}{2}(a_1\varphi^{n+1}_{\bar{x}})_x - \frac{1}{2}(a_2\varphi^{n+1}_{\bar{y}})_y = \frac{1}{2}f^{\,n+1/2}.$$

В отличие от предыдущего случая в этом уравнении операторы $\varphi^{n+1}_{\bar{x}}$, $\varphi^{n+1}_{\bar{y}}$ следует заменить соответствующими операторами на предыдущем слое $t = t_n$. В результате получим двухслойную схему бегущего счета

$$\varphi_t - \frac{1}{2h_1}(a_{1i+1}\varphi_x^{n+1} - a_{1i}\varphi^n_{\bar{x}}) - \frac{1}{2h_2}(a_{2j+1}\varphi_y^{n+1} - a_{2j}\varphi^n_{\bar{y}}) = \frac{1}{2}f^{\,n+1/2}. \tag{18}$$

Отличительной особенностью рассматриваемых разностных схем бегущего счета (17), (18) является возможность их реализации по явным рекуррентным соотношениям. Действительно, анализ шаблона разностной схемы (17) свидетельствует о том, что для определения значения функции φ_i^{n+1} необходимо знать значение функции в соседней слева точке на разностной сетке. Поэтому, используя граничные условия, можно последовательно рассчитать значение сеточной функции на $(n+1)$-м шаге по времени.

Из анализа шаблона разностной схемы (18) следует, что для определения сеточной функции φ_i^{n+1} необходимо знать значение функции φ в соседней справа точке на разностной сетке, что тоже дает возможность проводить расчеты по рекуррентным соотношениям.

При этом решение уравнения (17) в момент времени $t = t_{n+1}$ является стартовым для разностного уравнения (18).

Легко видеть, что численную реализацию алгоритма расщепления (17), (18) можно представить следующим образом. Интервал τ между точками t_n и t_{n+1} расщепляется на две равные части, полученную промежуточную точку обозначим $t_{n+1/2}$. На первой части интервала рассматривается явная разностная схема

$$\frac{(\varphi^{n+1/2}-\varphi^n)}{\tau}=\frac{1}{2}\left(\frac{1}{h_1}(a_{1i+1}\varphi_x^n - a_{1i}\varphi_{\bar{x}}^{n+1/2})+\right.$$

$$\left.+\frac{1}{h_2}(a_{2j+1}\varphi_y^n - a_{2j}\varphi_{\bar{y}}^{n+1/2})\right)+\frac{1}{2}f^{n+1/2}, \qquad (19)$$

на второй — записывается вторая подсистема

$$\frac{(\varphi^{n+1}-\varphi^{n+1/2})}{\tau}=$$

$$=\frac{1}{2}\left(\frac{1}{h_1}(a_{1i+1}\varphi_x^{n+1} - a_{1i}\varphi_{\bar{x}}^{n+1/2})+\frac{1}{h_2}(a_{2j+1}\varphi_y^{n+1} - a_{2j}\varphi_{\bar{y}}^{n+1/2})\right)+\frac{1}{2}f^{n+1/2}. \quad (20)$$

В отдельности каждое из разностных уравнений (19), (20) не аппроксимирует исходные дифференциальные уравнения (12), (13). Однако в совокупности (19), (20) составляют разностную схему бегущего счета, аппроксимирующую исходную дифференциальную задачу. Действительно, складывая уравнения (19), (20), получаем

$$\frac{1}{\tau}(\varphi^{n+1}-\varphi^n)=$$

$$=\frac{1}{2}\left(\frac{1}{h_1}(a_{1i+1}\varphi_x^n - a_{1i}\varphi_{\bar{x}}^{n+1/2})+\frac{1}{h_2}(a_{2j+1}\varphi_y^n - a_{2j}\varphi_{\bar{y}}^{n+1/2})\right)+\frac{1}{2}f^{n+1/2}+$$

$$+\frac{1}{2}\left(\frac{1}{h_1}(a_{1i+1}\varphi_x^{n+1} - a_{1i}\varphi_{\bar{x}}^{n+1/2})+\frac{1}{h_2}(a_{2j+1}\varphi_y^{n+1} - a_{2j}\varphi_{\bar{y}}^{n+1/2})\right)+\frac{1}{2}f^{n+1/2}$$

или после преобразований

$$\frac{1}{\tau}(\varphi^{n+1}-\varphi^n)=\frac{1}{h_1}(a_{1i+1}\varphi_x^{n+1/2} - a_{1i}\varphi_{\bar{x}}^{n+1/2})+$$

$$+O(\tau^2/|h|^2)+\frac{1}{h_2}(a_{2j+1}\varphi_y^{n+1/2} - a_{2j}\varphi_{\bar{y}}^{n+1/2})+f^{n+1/2}=$$

$$=(a_1\varphi_{\bar{x}})_x^{n+1/2}+(a_2\varphi_{\bar{y}})_y^{n+1/2}+f^{n+1/2}+O(\tau^2/|h|^2).$$

Отсюда следует, что разностная схема (19), (20) аппроксимирует дифференциальное уравнение (1) с погрешностью $O(|h|^2+\tau^2+\tau^2/|h|^2)$, где слагаемое $\tau^2/|h|^2$ влияет на погрешность аппроксимации. Поэтому точность результатов, получаемых при использовании разностной задачи (19), (20), будет зависеть от соотношения шагов сетки.

Теперь исследуем важное свойство устойчивости разностных схем (17), (18) по начальным данным и покажем равномерную устойчивость. Для исследования устойчивости сеточных задач используем подход, основанный на получении априорных оценок для каждой вспомогательной задачи.

Для получения априорной оценки воспользуемся принципом замороженных коэффициентов [11] и преобразуем однородные уравнения (17), (18) с постоянными коэффициентами диффузии $a_\alpha(x, y, z) = c_\alpha = \text{const}$, $\alpha = 1, 2$, к каноническому операторному виду

$$B\varphi_t + A\varphi = 0, \tag{21}$$

где линейные операторы A, B действуют в гильбертовом пространстве H_h, $\varphi = \varphi^n \in H_h$.

Как известно [6, 21], необходимое и достаточное условие устойчивости по начальным данным двухслойной разностной схемы (21) с самосопряженными положительными операторами A, B означает выполнение операторного неравенства

$$B \geq 0{,}5\tau A, \tag{22}$$

причем для решения φ^{n+1} справедлива оценка в энергетической норме $||\cdot||_A$:

$$||\varphi^{n+1}||_A \leq ||\varphi^n||_A, \quad n = \overline{0, N}.$$

Для определенности вначале рассмотрим однородное уравнение (17) с нулевой правой частью

$$\varphi_t - \frac{1}{2h_1}(a_{1i+1}\varphi_x^n - a_{1i}\varphi_{\bar{x}}^{n+1}) - \frac{1}{2h_2}(a_{2j+1}\varphi_y^n - a_{2j}\varphi_{\bar{y}}^{n+1}) = 0, \tag{23}$$

которое с учетом выражений

$$\frac{1}{h_1}(a_{1i+1}\varphi_x^n - a_{1i}\varphi_{\bar{x}}^{n+1}) = (a_1\varphi_{\bar{x}}^n)_x - \frac{\tau}{h_1}a_{1i}\varphi_{\bar{x}t}^n,$$

$$\frac{1}{h_2}(a_{2j+1}\varphi_y^n - a_{2j}\varphi_{\bar{y}}^{n+1}) = (a_2\varphi_{\bar{y}}^n)_y - \frac{\tau}{h_2}a_{2j}\varphi_{\bar{y}t}^n$$

запишем в эквивалентном виде

$$\varphi_t + \frac{c_1}{2}\Lambda_1\varphi + \frac{c_2}{2}\Lambda_2\varphi + \frac{\tau c_1}{2h_1}\Lambda_x\varphi_t + \frac{\tau c_2}{2h_2}\Lambda_y\varphi_t = 0,$$

где $\Lambda_1\varphi = -\varphi_{\bar{x}x}$, $\Lambda_2\varphi = -\varphi_{\bar{y}y}$, $\Lambda_x\varphi = \varphi_{\bar{x}}$, $\Lambda_y\varphi = \varphi_{\bar{y}}$. Отсюда следует, что разностное уравнение (23) можно записать в операторном виде (21), где линейные операторы A, B действуют в сеточном пространстве H_h и определяются формулами

$$A\varphi = \frac{c_1}{2}\Lambda_1\varphi + \frac{c_2}{2}\Lambda_2\varphi, \quad B\varphi = E\varphi + \frac{\tau c_1}{2h_1}\Lambda_x\varphi_t + \frac{\tau c_2}{2h_2}\Lambda_y\varphi_t,$$

где E — единичный оператор.

Поскольку

$$\varphi_{\bar{x}} = \varphi_{\overset{\circ}{x}} - 0{,}5h_1\varphi_{\bar{x}x} = \varphi_{\overset{\circ}{x}} + 0{,}5h_1\Lambda_1\varphi, \quad \varphi_{\overset{\circ}{x}} = 0{,}5(\varphi_{\bar{x}} + \varphi_x),$$
$$\varphi_{\bar{y}} = \varphi_{\overset{\circ}{y}} - 0{,}5h_2\varphi_{\bar{y}y} = \varphi_{\overset{\circ}{y}} + 0{,}5h_2\Lambda_2\varphi, \quad \varphi_{\overset{\circ}{y}} = 0{,}5(\varphi_{\bar{y}} + \varphi_y),$$

окончательно получаем выражения для операторов A, B:

$$A = \frac{c_1}{2}\Lambda_1 + \frac{c_2}{2}\Lambda_2, \quad B = B_0 + B_1, \quad B_0 = E + \frac{\tau c_1}{4}\Lambda_1 + \frac{\tau c_2}{4}\Lambda_2, \tag{24}$$

$$B_1\varphi = \frac{\tau c_1}{2h_1}\varphi_{\overset{\circ}{x}} + \frac{\tau c_2}{2h_2}\varphi_{\overset{\circ}{y}}. \tag{25}$$

Используя разностные формулы Грина [6, 21], можно показать самосопряженность и положительную определенность операторов A, B_0 в смысле скалярного произведения (15). Аналогично можно установить кососимметричность операторов B_1, тогда $(B_1\varphi, \varphi) = 0$. Поэтому условие устойчивости (22) эквивалентно условию $B_0 \geq 0{,}5\tau A$. Поскольку

$$B_0 = E + \frac{\tau c_1}{4}\Lambda_1 + \frac{\tau c_2}{4}\Lambda_2 = E + \frac{\tau}{2}A,$$

запишем условие устойчивости в виде

$$E + \frac{\tau}{2}A \geq \frac{\tau}{2}A.$$

Это условие всегда выполняется, поэтому разностная схема (23) равномерно устойчива по начальным данным в энергетической норме $||\cdot||_A$.

Таким образом, справедливо следующее утверждение.

Теорема 1. Двухслойная разностная схема бегущего счета (21), (24), (25) равномерно устойчива по начальным данным в энергетической норме $||\cdot||_A$, и для ее решения имеет место априорная оценка

$$||\varphi^{n+1}||_A \leq ||\varphi^n||_A,\ n = \overline{0, N}.$$

Из предыдущих рассуждений следует, что для вспомогательной задачи (17) при всех возможных значениях коэффициентов диффузии $a_\alpha(x, y)$, $\alpha = 1,2$, выполняется операторное условие устойчивости.

Согласно принципу замороженных коэффициентов схема (17) равномерно устойчива по начальным данным, если условие (22) выполнено при всех возможных значениях коэффициентов диффузии.

Аналогично можно установить равномерную устойчивость вспомогательной задачи (18), что в целом гарантирует устойчивость вычислений при переходе с n-го на $(n+1)$-й временной слой.

ЗАДАЧА ОПТИМАЛЬНОГО УПРАВЛЕНИЯ

Численные методы, разработанные для решения прямых задач вида (1)–(3), применяются для решения обратных задач, задач оптимального управления и др.

Для задачи оптимального управления (4)–(9) в целях получения условий оптимальности и использования градиентных методов оптимизации исследуем дифференциальные свойства критерия качества (7). Покажем, что функционал (7) является дифференцируемым в произвольной точке $v \in U$. Для этого оценим главную линейную часть приращения функционала $\Delta J_\varepsilon(v) = J_\varepsilon(v + \delta v) - J_\varepsilon(v)$ в зависимости от приращения управления v.

Зададим управлению $v(x, y, t)$ некоторое приращение $\delta v = \delta v(x, y, t)$ и обозначим $\delta u = \delta u(x, y, t)$ соответствующее ему приращение функции $u = u(x, y, t)$.

Легко видеть, что приращение решения $\delta u(x, y, t)$ удовлетворяет начально-краевой задаче $(k_1 = k_2 = k)$

$$\frac{\partial\,\delta u}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x}\left(k\frac{\partial\,\delta u}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial y}\left(k\frac{\partial\,\delta u}{\partial y}\right) = \delta v(x, y, t),\ (x, y) \in G,\ t \in (0, T], \tag{26}$$

$$\left.\left(k\frac{\partial \delta u}{\partial n} + \beta(x, y, t)\delta u\right)\right|_{\partial G} = 0,\ (x, y) \in \partial G,\ 0 < t \leq T, \tag{27}$$

$$\delta u(x, y, 0) = 0,\ (x, y) \in G. \tag{28}$$

Тогда выражение для приращения функционала (7) можно записать в виде

$$\Delta J_\varepsilon(v) = \int_G [\,(u(x, y, T) + \delta u(x, y, T) - h(x, y))^2 - (u(x, y, T) - h(x, y))^2\,]dxdy +$$

$$+\frac{1}{\varepsilon^2}\int_0^T dt\int_G [(v(x, y, t) + \delta v(x, y, t))^2 - v^2(x, y, t)]dxdy.$$

Поскольку

$$(u(x, y, T)+\delta u(x, y, T)-h(x, y))^2-(u(x, y, T)-h(x, y))^2=$$

$$=2\delta u(x, y, T)[u(x, y, T)-h(x, y)]+\delta u^2(x, y, T),$$

$$(v(x, y, t)+\delta v(x, y, t))^2-v^2(x, y, t)=2v(x, y, t)\delta v(x, y, t)+\delta v^2(x, y, t),$$

приращение функционала принимает вид

$$\Delta J_\varepsilon(v)=2\int_G [u(x, y, T)-h(x, y)]\delta u(x, y, T)dxdy+\frac{2}{\varepsilon^2}\int_0^T dt\int_G v(x, y, t)\delta v(x, y, t)dxdy+$$
$$+\int_G (\delta u(x, y, T))^2 dxdy+\frac{1}{\varepsilon^2}\int_0^T dt\int_G (\delta v(x, y, t))^2 dxdy. \tag{29}$$

Чтобы окончательно определить выражение для главной линейной части, введем в рассмотрение сопряженную функцию $\psi(x, y, t)$ как решение в области Q некоторой начально-краевой задачи. Классическая процедура вывода сопряженного оператора состоит в следующем. Обе части уравнения (26) умножаются на функцию $\psi(x, y, t)$ и интегрируются во времени и пространстве в пределах, обусловленных постановкой начально-краевой задачи (26)–(28)

$$\int_0^T dt\int_G \psi\left[\frac{\partial\delta u}{\partial t}-\frac{\partial}{\partial x}\left(k\frac{\partial\delta u}{\partial x}\right)-\frac{\partial}{\partial y}\left(k\frac{\partial\delta u}{\partial y}\right)\right]dxdy=\int_0^T dt\int_G \psi\delta v\,dxdy. \tag{30}$$

Далее проведем преобразования в (30) с целью ввести функцию $\psi(x, y, t)$ в дифференциальные выражения вместо δu. Интегрируя по частям, для первого слагаемого в (30) с учетом начального условия (28) находим

$$\int_0^T dt\int_G \psi\frac{\partial\delta u}{\partial t}dxdy=$$
$$=\int_G \psi\delta u\Big|_{t=0}^{T}dxdy-\int_0^T dt\int_G \delta u\frac{\partial\psi}{\partial t}dxdy=\int_G \psi\delta u\Big|_{t=T}dxdy-\int_0^T dt\int_G \delta u\frac{\partial\psi}{\partial t}dxdy. \tag{31}$$

Применяя первую формулу Грина [22] и учитывая граничное условие (27), в результате преобразования эллиптического оператора в (30) последовательно получаем

$$\int_0^T dt\int_G \psi\left[-\frac{\partial}{\partial x}\left(k\frac{\partial\delta u}{\partial x}\right)-\frac{\partial}{\partial y}\left(k\frac{\partial\delta u}{\partial y}\right)\right]dxdy=\int_0^T dt\int_G k\left[\frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\delta u}{\partial x}+\frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{\partial\delta u}{\partial y}\right]dxdy-$$
$$-\int_0^T dt\int_{\partial G}\psi k\frac{\partial\delta u}{\partial n}ds=\int_0^T dt\int_G k\left[\frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\delta u}{\partial x}+\frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{\partial\delta u}{\partial y}\right]dxdy+\int_0^T dt\int_{\partial G}\beta\psi\delta u\,ds, \tag{32}$$

$$\int_0^T dt\int_G \delta u\left[-\frac{\partial}{\partial x}\left(k\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)-\frac{\partial}{\partial y}\left(k\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)\right]dxdy=$$
$$=\int_0^T dt\int_G k\left[\frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\delta u}{\partial x}+\frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{\partial\delta u}{\partial y}\right]dxdy-\int_0^T dt\int_{\partial G}\delta uk\frac{\partial\psi}{\partial n}ds. \tag{33}$$

Таким образом, из (30)–(33) следует преобразованное выражение

$$\int_G \psi\delta u\Big|_{t=T}dxdy+\int_0^T dt\int_G \delta u\left[-\frac{\partial\psi}{\partial t}-\frac{\partial}{\partial x}\left(k\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)-\frac{\partial}{\partial y}\left(k\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)\right]dxdy+\int_0^T dt\int_{\partial G}\beta\psi\delta u\,ds=$$
$$=-\int_0^T dt\int_{\partial G}\delta uk\frac{\partial\psi}{\partial n}ds+\int_0^T dt\int_G \psi\delta v\,dxdy. \tag{34}$$

Отсюда следует, что с вводом функции $\psi(x, y, t)$ как решения сопряженного уравнения

$$\frac{\partial \psi}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}\left(k \frac{\partial \psi}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(k \frac{\partial \psi}{\partial y}\right)=0,\ (x, y) \in G,\ t \in(0, T], \tag{35}$$

с граничным условием

$$\left.\left(k \frac{\partial \psi}{\partial n}+\beta \psi\right)\right|_{\partial G}=0, \quad (x, y) \in \partial G,\ 0< t \leq T, \tag{36}$$

выражение (34) принимает вид

$$\int_G \psi \delta u\big|_{t=T} dxdy=\int_0^T dt \int_G \psi \delta v\, dxdy. \tag{37}$$

Если определить начальное условие для ретроспективной задачи формулой

$$\psi\big|_{t=T}=u(x, y, T)-h(x, y), \tag{38}$$

то из (37) следует

$$\int_G(u(x, y, T)-h(x, y)) \delta u\big|_{t=T} dxdy=\int_0^T dt \int_G \psi \delta v dxdy. \tag{39}$$

На основании (39) приращение функционала (29) можно записать в виде

$$\Delta J_{\varepsilon}(v)=2 \int_0^T dt \int_G\left[\psi+\frac{1}{\varepsilon^2} v\right] \delta v dxdy+o\|\delta u\|+o\|\delta v\|.$$

Отсюда следует дифференцируемость функционала $J_{\varepsilon}(v)$ по v в пространстве $L_2(Q)$.

Таким образом, установлена следующая теорема.

Теорема 2. Функционал (7) является дифференцируемым по Фреше в пространстве $L_2(Q)$. Градиент функционала определяется через сопряженное состояние выражением

$$\operatorname{grad} J_{\varepsilon}(v)=2\left(\psi(x, y, t)+\frac{1}{\varepsilon^2} v(x, y, t)\right), \tag{40}$$

где ψ — решение сопряженной задачи (35), (36), (38).

Условие оптимальности задачи оптимального управления (4)–(9) $\operatorname{grad} J_{\varepsilon}(v)=0$ с учетом (40) принимает вид

$$\psi(x, y, t)+\frac{1}{\varepsilon^2} v(x, y, t)=0,\ (x, y) \in G,\ t \in(0, T].$$

Из изложенного следует, что для определения градиента необходимо при фиксированном v получить решение двух краевых задач. Вначале с помощью прямой задачи (4)–(6) следует определить функцию $u(x, y, t)$, а затем из (35), (36), (38) найти значение сопряженной функции.

Приближенное решение задачи оптимального управления (4)–(9) можно получить, используя градиентные методы [6, 23, 24], а также изложенную ранее методику построения разностных схем бегущего счета для численного решения прямой дифференциальной задачи. Отметим, что двухшаговые разностные схемы можно непосредственно применять и для численного решения сопряженных задач.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В статье развиваются методы математического моделирования и оптимизации процессов диффузии (теплопроводности) в виде прямых и экстремальных задач для многомерных параболических уравнений. Для численного решения нестационарных уравнений диффузии предложен подход, использующий идею расщепления и реализацию полученных разностных схем с помощью явных схем бегущего счета. Рассмотрены и исследованы вопросы построения схем расщепления, аппроксимации и устойчивости явных разностных схем по начальным данным. Для численного решения задачи оптимального управления изучены дифференциальные свойства функционала качества, предложен итерационный алгоритм определения оптимального управления. Реализация описанного подхода к решению пространственных нестационарных уравнений диффузии на многопроцессорных вычислительных системах с распределенной памятью позволит значительно сократить временные затраты.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. Москва: Наука, 1982. 320 с.
2. Егоров А.И. Оптимальное управление тепловыми и диффузионными процессами. Москва: Наука, 1978. 463 с.
3. Егоров А.И. Основы теории управдения. Москва: Физматгиз, 2004. 504 с.
4. Згуровский М.З., Скопецкий В.В., Хрущ В.К., Беляев Н.Н. Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде. Киев: Наук. думка, 1997. 368 с.
5. Сергиенко И.В., Скопецкий В.В., Дейнека В.С. Математическое моделирование и исследование процессов в неоднородных средах. Киев: Наук. думка, 1991. 432 с.
6. Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Вычислительная теплопередача. Москва: Едиториал УРСС, 2003. 784 с.
7. Саульев В.К. Интегрирование уравнений параболического типа методом сеток. Москва: Физматгиз, 1960. 324 с.
8. Samarskii A.A., Vabishchevich P.N. Numerical methods for solving inverse problems of mathematical physics. Berlin: Walter de Gruyter, 2007. 438 p.
9. Vabishchevich P.N., Vasil'ev V.I. Computational algorithms for solving the coefficient inverse problem for parabolic equations. *Inverse Probl. Sci. Engin*. 2016. Vol. 24, N 1. P. 42–59.
10. Вабищевич П.Н., Васильева М.В., Васильев В.И. Вычислительная идентификация правой части параболического уравнения. *Журн. вычисл. матем. и матем. физики*. 2015. Т. 55, № 6. С. 1020–1027.
11. Годунов С.К., Рябенький В.С. Разностные схемы. Москва: Наука, 1977. 440 с.
12. Агошков В.И. Методы оптимального управления и сопряженных уравнений в задачах математической физики. Москва: ИВМ РАН, 2004. 256 с.
13. Дейнека В.С., Сергиенко И.В. Модели и методы решения задач в неоднородных средах. Киев: Наук. думка, 2001. 606 с.
14. Ильин В.П. Методы конечных разностей и конечных объемов для эллиптических уравнений. Новосибирск: Изд. ИМ СО РАН, 2001. 318 с.
15. Vabishchevich P.N., Zakharov P.E. Explicit-implicit splitting schemes for parabolic equations and systems. *Numerical methods and applications*. Springer, 2015. P. 157–166.
16. Марчук Г.И. Методы расщепления. Москва: Наука, 1988. 264 с.
17. Gladky A.V. Stability of difference splitting schemes for convection diffusion equation. *Cybernetics and Systems Analysis*. 2017. Vol. 53, N 2. P. 193–203.
18. Gladky A.V. Analysis of splitting algorithms in convection–diffusion problems. *Cybernetics and Systems Analysis*. 2014. Vol. 50, N 4. P. 548–559.
19. Vabishchevich P.N. On a new class of additive (splitting) operator sub difference schemes. *Math. Comput*. 2012. Vol. 81, N 277. P. 267–276.
20. Vabishchevich P.N. Flux-splitting schemes for parabolic problems. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*. 2012. Vol. 52, N 8. P. 1128–113.
21. Самарский А.А., Гулин А.В. Устойчивость разностных схем. Москва: Наука, 1973. 416 с.
22. Марчук Г.И., Агошков В.Н. Введение в проекционно-сеточные методы. Москва: Наука, 1981. 416 с.

23. Алифанов О.М. Экстремальные методы решения некорректных задач. Москва: Наука, 1988. 288 с.

24. Васильев П.Ф. Методы оптимизации. Москва: Факториал Пресс, 2002. 824 с.

Надійшла до редакції 08.02.2019

А.В. Гладкий, Ю.А. Гладка

ПРО ОДНУ СХЕМУ РОЗЩЕПЛЕННЯ В ЗАДАЧАХ ДИФУЗІЇ ТА ТЕПЛОПРОВІДНОСТІ

Анотація. Розглянуто задачу математичного моделювання та оптимізації нестаціонарних процесів дифузії і теплопровідності. Для чисельного розв'язання багатовимірних початково-крайових задач дифузії і теплопровідності запропоновано підхід, який використовує ідею розщеплення та реалізацію отриманих різницевих схем за допомогою явних схем наскрізного розрахунку. Досліджено питання побудови різницевих схем розщеплення, апроксимації та стійкості за початковими даними. Для чисельного розв'язання задачі оптимального керування для параболічного рівняння досліджено диференціальні властивості функціонала якості, запропоновано ітераційний алгоритм визначення оптимального керування.

Ключові слова: параболічне рівняння, задача оптимального керування, чисельний метод, методи розщеплення, різницева схема, стійкість.

A.V. Gladky, Y.A. Gladka

ABOUT ONE SPLITTING SCHEME FOR DIFFUSION AND HEAT CONDUCTION PROBLEMS

Abstract. The problem of mathematical modeling and optimization of diffusion and heat conduction non-stationary processes is considered. An approach that uses the idea of splitting and computation of the obtained difference schemes using explicit schemes of running counting is proposed for the numerical solution of multidimensional diffusion and heat conduction initial-boundary-value problems. Construction of difference splitting schemes and approximation and stability on the initial data are investigated. Differential properties of the quality functional are analyzed for the numerical solution of the optimal control problem for a parabolic equation. An iterative algorithm for determining the optimal control is proposed.

Keywords: parabolic equation, optimal control problem, numerical method, splitting methods, difference scheme, stability.

Гладкий Анатолий Васильевич,
доктор физ.-мат. наук, профессор, заведующий лабораторией
Института кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины, Киев,
e-mail: gladky@ukr.net.

Гладкая Юлия Анатольевна,
доцент Киевского национального экономического университета имени Вадима Гетьмана,
e-mail: yuliyagladkaya@hotmail.com.