

УДК 519.6+517.912+517.972+574

## Вариационные методы построения монотонных аппроксимаций для моделей химии атмосферы\*

В.В. Пененко, Е.А. Цветова

Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук, просп. Акад. М.А. Лаврентьева, 6, Новосибирск, 630090

E-mails: penenko@sscc.ru (Пененко В.В.), E.Tsvetova@ommgp.sccc.ru (Цветова Е.А.)

**Пененко В.В., Цветова Е.А.** Вариационные методы построения монотонных аппроксимаций для моделей химии атмосферы // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2013. — Т. 16, № 3. — С. 243–256.

Представлен новый метод построения экономичных монотонных численных схем для решения основных, сопряженных и обратных задач атмосферной химии. Он является синтезом применения вариационного принципа в сочетании с методами декомпозиции, расщепления и конструктивной реализации идеи интегрирующих множителей Эйлера (ИМЭ) с помощью аппарата локальных сопряженных задач. Для обеспечения эффективности вычислений предложен также способ декомпозиции операторов трансформации многокомпонентных субстанций по механизмам реакций. С применением аналитических ИМЭ декомпозированные системы жестких ОДУ приводятся к эквивалентным системам интегральных уравнений, для решения которых построены прямые многостадийные алгоритмы заданного порядка точности. Разработан оригинальный вариационный метод построения взаимно согласованных алгоритмов для прямых и сопряженных задач и методов теории чувствительности функционалов для сложных дискретно-аналитических моделей с ограничениями.

**Ключевые слова:** *вариационный принцип, жесткие системы ОДУ, интегрирующие множители, дискретно-аналитические аппроксимации, химия атмосферы, алгоритмы исследования чувствительности моделей.*

**Penenko V.V., Tsvetova E.A.** Variational methods for constructing of monotone approximations for atmospheric chemistry models // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2013. — Vol. 16, № 3. — P. 243–256.

A new method for constructing efficient monotone numerical schemes for solving direct, adjoint, and inverse atmospheric chemistry problems is presented. It is a synthesis of a variational principles combined with splitting and decomposition methods and a constructive realization of the Eulerian integrating factors (EIM) by means of the local adjoint problem technique. To provide the efficiency of calculations, a method to decompose the multi component substances transformation operators in terms of mechanisms of reactions is also proposed. With the analytical EIMs, the decomposed systems of stiff ODEs are reduced to the equivalent systems of integral equations. To solve them, non-iterative multistage algorithms of given order of accuracy are developed. An original variational method for constructing of mutually consistent algorithms for direct and adjoint problems, and sensitivity studies for complex models with constraints is developed.

**Key words:** *variational principle, stiff systems ODE, integrating multipliers, discrete-analytical approximations, atmospheric chemistry, algorithms for sensitivity studies.*

---

### 1. Введение

Основные задачи природоохранного прогнозирования состоят в оценке качества атмосферы, которое определяется составом химических веществ, содержащихся в воздухе.

---

\*Работа поддержана Программами № 4 Президиума РАН и № 3 ОМН РАН, РФФИ (проект № 11-01-00187), а также Интеграционными проектами СО РАН № 8 и № 35.

В математическом моделировании качества атмосферы и его изменчивости участвуют совместные модели гидротермодинамики и химии. При реализации этих моделей значительная часть алгоритмической и вычислительной работы приходится на численное решение систем “жестких” дифференциальных уравнений, описывающих процессы химической трансформации газовых примесей и динамики аэрозольных популяций. Свойство “жесткости” соответствующих систем уравнений является следствием широкого диапазона характерных времен жизни различных субстанций, участвующих в реакциях. Задачи атмосферной динамики и химии чрезвычайно сложны: в современных моделях учитываются порядка сотни различных субстанций, механизмы трансформации которых включают несколько сотен химических реакций. Эти параметры определяют структуру и размерность задач атмосферной химии. Для их численного решения используются методы расщепления по физическим процессам и декомпозиции по пространству [1–6]. Они позволяют свести многомерные задачи к совокупности менее сложных и меньшей размерности. Рассмотрение блока химической трансформации на отдельном этапе в методе расщепления позволяет выполнять интегрирование уравнений химии атмосферы формально независимо для каждого конечного объема трехмерной сеточной пространственной области в пределах каждого шага по времени [6].

Известно, что явные схемы для интегрирования жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) довольно затратны в вычислительном отношении для практических целей, так как в них, вследствие требований аппроксимации и устойчивости, очень сильны ограничения на величину шагов по времени. Поэтому наиболее употребительными для решения жестких систем дифференциальных уравнений являются многошаговые неявные методы: методы Рунге–Кутты в сочетании с модификациями итерационного метода Ньютона для нелинейных систем, методы Гира и Розенброка, а также комбинированные методы Рунге–Кутты и Розенброка, методы квазистационарных концентраций и др. Теоретические и конструктивные аспекты этих методов детально описаны в монографиях [7–10]. Во многих научных центрах мира накоплен значительный опыт использования методов этого класса для решения систем ОДУ. Разработаны также различные алгоритмы и комплексы программ, специально ориентированные на задачи атмосферной химии (см., напр., [12, 13] и имеющиеся там обзоры литературы). С позиций вычислительной эффективности наиболее трудоемкими элементами технологий с неявными численными схемами являются обращения на каждом этапе вычислений предобуславливающих матриц высокой размерности, содержащих матрицы Якоби линеаризованных систем уравнений. Дополнительную трудность представляет также необходимость обеспечения положительности искомых функций в процессе вычислений. В работах [12, 13] представлены результаты сравнительного тестирования девяти наиболее распространенных алгоритмов и комплексов программ для задач атмосферной химии, созданных на основе традиционных подходов к решению жестких систем ОДУ. Из этого анализа следует, что даже для решения прямых задач по изучению качества атмосферы требуются практически неограниченные объемы вычислений. Современные тенденции развития природоохранного прогнозирования направлены на решение обратных задач с усвоением данных наблюдений [5, 14, 16]. Эти задачи, по сравнению с прямыми, требуют качественно новых методов прямого и обратного моделирования.

В настоящей статье представлен новый метод построения экономичных численных схем для решения основных задач, описывающих процессы химической трансформации примесей, а также сопряженных к ним в смысле Лагранжа, являющихся одним из элементов решения обратных задач. Для этих целей используется вариационный подход в сочетании с методами декомпозиции и расщепления. В нем реализуется идея интегриру-

ющих множителей Эйлера с помощью развитого нами алгоритмического аппарата локальных сопряженных задач [15]. Такой подход позволяет рассматривать пространственно-временные задачи химии атмосферы в рамках схемы декомпозиции сумматорных аналогов вариационных функционалов отдельно на каждом временном шаге и в каждом трехмерном элементе области по пространственным переменным. В рамках глобального расщепления решаются также системы уравнений конвекции–диффузии, описывающие процессы распространения субстанций в пространстве. За основу декомпозиции взят метод построения аддитивно-усредненных схем покомпонентного расщепления [17]. Схемы этого вида удобны для решения рассматриваемого класса задач. Они имеют параллельную организацию, и все этапы расщепления реализуются независимо друг от друга при одних и тех же начальных условиях с предыдущего шага по времени. В этой статье мы лишь упоминаем о задачах конвекции–диффузии, отсылая читателя к работе [15], где представлены монотонные устойчивые дискретно-аналитические численные схемы, сохраняющие свойства положительности искомых функций состояния и обладающие свойствами сохранения энергии и количества вещества, постулируемыми в формулировке общего вариационного принципа, используемого авторами для решения задач рассматриваемого класса [18].

Алгоритм решения задачи в целом на каждом временном интервале состоит в решении четырех подзадач, соответствующих этапам расщепления. На первых трех из них решаются задачи конвекции–диффузии для каждой из субстанций независимо от других во всей пространственной области по трем координатным направлениям. Здесь используются дискретные по времени и аналитические по пространственным координатам численные схемы [15]. На четвертом этапе осуществляется взаимодействие всех субстанций: решается задача химической трансформации, которая рассматривается в каждой точке трехмерной сеточной области как система ОДУ по времени на этом же интервале. Входные параметры и начальные условия всей совокупности задач зависят от пространственных координат. В качестве приближенного решения задачи в целом для каждой из субстанций на текущий момент времени, следуя [17], принимаются осредненные с весами значения решений всех четырех этапов расщепления.

## 2. Постановка задачи трансформации примесей

Рассмотрим один из блоков четырехмерной модели конвекции–диффузии–реакции, отвечающий за процессы трансформации в атмосфере многокомпонентных примесей в газовом состоянии [6]:

$$L_i(\varphi, \mathbf{Y}) \equiv \left\{ \frac{\partial \varphi_i}{\partial t} + S_i(\varphi) - q_i(\mathbf{x}, t) = 0 \right\}, \quad \varphi_i(\mathbf{x}, t) = \varphi_i^0(\mathbf{x}), \quad i = \overline{1, n}. \quad (1)$$

Здесь  $\varphi = \{\varphi_i(\mathbf{x}, t) \geq 0, i = \overline{1, n}\}$  — вектор-функция состояния из пространства неотрицательных, достаточно гладких функций  $Q(D_t)$ , представляющих концентрации примесей в области  $D_t = D \times [0, \bar{t}]$ ;  $D$  — область изменения пространственных координат  $\mathbf{x} = \{x_1, x_2, x_3\}$ ,  $[0, \bar{t}]$  — интервал изменения времени  $t$ ;  $\mathbf{q} = \{q_i(\mathbf{x}, t), i = \overline{1, n}\}$  — функции источников примесей;  $S_i(\varphi)$  — нелинейные операторы, которые описывают скорости трансформации соответствующих субстанций;  $\mathbf{Y}$  — вектор параметров модели, принадлежащий области допустимых значений  $R(D_t)$ . В состав параметров включены функции, характеризующие начальные состояния, источники примесей, константы скоростей реакций и другие объекты, участвующие в постановке задачи и не являющиеся перемен-

ными состояниями. Для газовых примесей, рассматриваемых в настоящей статье,  $S_i$  имеют полиномиальный вид и не содержат операций дифференцирования и интегрирования.

Мы предполагаем, что задача (1) имеет единственное решение  $\varphi(\mathbf{x}, t, \mathbf{Y})$ , если соответствующим образом определены все параметры модели.

Число уравнений  $n$  в системе (1) совпадает с числом искоемых функций концентраций примесей  $\varphi_i$ . Эти уравнения получаются по известным правилам [11] из исходного набора стехиометрических уравнений, описывающих количественные соотношения реагентов и продуктов химических реакций. Для представления структуры системы (1) введем несколько определений. Пусть у нас имеется упорядоченная совокупность из  $n_k$  стехиометрических уравнений ( $n_k \geq n$ ) с соответствующим набором констант скоростей реакций, которые обозначим как вектор  $\mathbf{k} = (k(r), r = \overline{1, n_k})$ . Далее проведем классификацию уравнений по отношению к каждой субстанции  $\varphi_i$ . Последняя в разных уравнениях может быть как реагентом, так и продуктом. Обозначим через  $R_i$  совокупность номеров таких уравнений. Поскольку субстанции взаимодействуют между собой, и одна и та же субстанция может участвовать в различных химических реакциях, то одни и те же номера уравнений будут включены в различные  $R_i$ . Эта совокупность реакций учитывается в определении оператора  $S_i$  в (1) для вычисления скорости изменения концентрации  $\varphi_i$ . Теперь определим в  $R_i$  набор номеров  $N_{ri}$  субстанций  $\varphi_i$ , участвующих в расходной части уравнений реакций с номерами  $r \in R_i$ .

С использованием этих определений запишем форму оператора  $S_i$  в кинетических уравнениях (1), описывающего скорость трансформации субстанции с номером  $i$ :

$$S_i(\varphi) = \sum_{r \in R_i} \left[ k_i(r) (s_i(r_-) - s_i(r_+)) \prod_{\alpha \in N_{ri}} \varphi_\alpha^{s_\alpha(r_-)} \right], \quad i = \overline{1, n}. \quad (2)$$

В формулах (2)  $k_i(r) > 0$  — константы скоростей реакций с номерами  $r \in R_i$ ;  $s_i(r_\pm) \geq 0$  — стехиометрические коэффициенты в уравнениях реакций. Символы  $(r_-)$  и  $(r_+)$  отмечают в реакции с номером  $r$  соответственно принадлежность слагаемого к расходной и приходной частям соответствующего стехиометрического уравнения. Сомножители произведений в (2) — это концентрации субстанций-реагентов с номерами из  $N_{ri}$ . По функциональному содержанию операторы трансформации можно разделить на две части:

$$S_i(\varphi) = \hat{A}_i(\varphi) - P_i(\varphi). \quad (3)$$

По отношению к субстанции  $\varphi_i$  первое слагаемое в (3) описывает расходную часть механизмов реакций, а второе — приходную:

$$\hat{A}_i(\varphi) = \sum_{r \in R_i} \left[ k_i(r) s_i(r_-) \prod_{\alpha \in N_{ri}} \varphi_\alpha^{s_\alpha(r_-)} \right], \quad P_i(\varphi) = \sum_{r \in R_i} \left[ k_i(r) s_i(r_+) \prod_{\alpha \in N_{ri}} \varphi_\alpha^{s_\alpha(r_-)} \right]. \quad (4)$$

В каждом слагаемом оператора  $\hat{A}_i(\varphi)$  все произведения содержат функцию  $\varphi_i$ , поэтому для него можно ввести квазилинейное представление  $\hat{A}_i(\varphi) = A_i(\varphi)\varphi_i$ . Заметим, что в операторах (3), (4) имеется явная зависимость от  $\mathbf{k}$ . Для краткости там, где это не вызывает сомнений, мы этот параметр опустим.

Сформулируем теорему.

**Теорема 1** (о свойствах операторов трансформации). *Если константы скоростей реакций положительны, стехиометрические коэффициенты неотрицательны и концентрации примесей положительны, то операторы (4) являются операторами монотонного типа в смысле определения [19]:*

$$\hat{A}_i(\varphi) \geq 0, \quad A_i(\varphi) \geq 0, \quad P_i(\varphi) \geq 0, \quad i = \overline{1, n}, \quad (5)$$

и матрицы Якоби  $\partial \hat{A}_i(\varphi)/\partial \varphi$  и  $\partial P_i(\varphi)/\partial \varphi$  операторов  $\hat{A}_i(\varphi)$  и  $P_i(\varphi)$  имеют неотрицательные элементы.

Доказательство неравенств очевидно: операторы (4) суть многочлены с положительными коэффициентами. Неотрицательность элементов матриц Якоби также следует из полиномиального вида операторов (4).

Операторы в моделях трансформации примесей обычно имеют высокую степень разреженности. Это следствие структуры матриц стехиометрических коэффициентов с элементами  $s_i(r_{\pm})$ . Вариационная организация технологии с представлением операторов по механизмам реакций  $R_i$  позволяет оптимальным образом спланировать процессы вычислений с учетом эффектов разреженности. Кроме того, при выбранном способе задания операторов трансформации модель представляет собой открытую развиваемую систему.

Введем пространство  $H = L_2(D_t)$  как основное вещественное гильбертово пространство со скалярным произведением и нормой:

$$(\varphi, \psi)_H \equiv (\varphi, \psi) \equiv \sum_{i=1}^n \int_{D_t} \varphi_i(\mathbf{x}, t) \psi_i(\mathbf{x}, t) dD dt; \quad \|\varphi\|_H = \|\varphi\| = (\varphi, \varphi)^{1/2}. \quad (6)$$

Наряду с дифференциальной постановкой задачи рассмотрим вариационную формулировку модели (1) в виде интегрального тождества [5, 6]:

$$I(\varphi, Y, \varphi^*) = \int_{D_t} \sum_{i=1}^n \{L_i(\varphi, Y) \varphi_i^*\} dD dt = 0, \quad (7)$$

где  $\varphi^* = \{\varphi_i^*(\mathbf{x}, t), i = \overline{1, n}\}$  — вектор-функция такой же структуры, как и  $\varphi$ , с произвольными достаточно гладкими компонентами  $\varphi_i^*$ , определенными в области  $D_t$ .

Предположим также, что параметры модели и функции  $\varphi$  и  $\varphi^*$  обладают такими свойствами гладкости и интегрируемости, что для операторов задачи в исходной дифференциальной формулировке и в тождестве (7) можно выполнять все операции дифференцирования и интегрирования по частям. В частности, для дифференциальных форм операторов  $L_i(\varphi, Y)$  должны быть справедливы обобщенные формулы Грина и тождество Лагранжа, построенное на их основе (см. [20, 21]). Обобщенные формулы Грина дают возможность работать как с обыкновенными дифференциальными уравнениями, так и с многомерными задачами для уравнений в частных производных. Все это позволяет строить операторы, формально сопряженные к  $L_i(\varphi, Y)$  [22]. Заметим, что, поскольку “химический блок” является частью общей модели, здесь мы формально оставляем символ частной производной по времени.

### 3. Общая схема вариационного подхода для прямых и обратных задач

Для анализа поведения системы в целом и для решения различных прямых и обратных задач с помощью математических моделей и фактических данных введем совокупность обобщенных характеристик изучаемых процессов типа функционалов, определяя их как скалярное произведение вида

$$\Phi_l(\varphi) = \int_{D_t} \Psi_l(\varphi) \chi_l(\mathbf{x}, t) dD dt = (\Psi_l(\varphi), \chi_l(\mathbf{x}, t))_{D_t}, \quad l = \overline{1, l_k}, \quad (8)$$

где  $\Psi_l(\varphi)$  — оцениваемые функции, ограниченные, суммируемые и дифференцируемые относительно функций состояния и независимых переменных;  $\chi_l(\mathbf{x}, t) \geq 0$  — весовые функции;  $\chi_l(\mathbf{x}, t) dD dt$  — соответствующие им меры Радона и Дирака, удовлетворяющие условиям нормировки  $\int_{D_t} \chi_l(\mathbf{x}, t) dD dt = 1$ . При подходящем выборе оцениваемых и весовых функций с помощью функционалов этого типа можно единообразно описать глобальные, распределенные и локализованные характеристики поведения системы в континуальных и дискретных формах представления в области  $D_t$ ; экологические ограничения и результаты наблюдений различных типов; многоплановые по содержанию и назначению критерии: целевые, управления, проектирования, качества моделей, усвоения данных, идентификации параметров и др. Интегральная форма функционалов (8) выбирается согласованной со структурой тождества (7) для удобства их совместного использования в рамках вариационного принципа.

Для оценок целевых функционалов и тенденций их изменения в пространстве параметров моделей, а также для решения обратных задач по идентификации различных объектов, таких, например, как начальные состояния или параметры моделей в (1)–(4), используется вариационный принцип на основе расширенных функционалов в следующей формулировке:

$$\tilde{\Phi}_l^h(\varphi, \mathbf{Y}, \varphi^*) = \Phi_l^h(\varphi) + I^h(\varphi, \mathbf{Y}, \varphi^*), \quad l = \overline{1, l_k}. \quad (9)$$

Уравнения математической модели (1) здесь рассматриваются как ограничения на класс функций, на которых определяются функционалы (8), а также как связи между функциями состояния и параметрами моделей. При таком подходе функции  $\varphi^*$  играют роль распределенных множителей Лагранжа. Верхним индексом  $h$  отмечены дискретные аналоги соответствующих объектов.

Для построения дискретных аналогов модели введем декомпозицию области  $D_t$  в соответствии с методом конечных объемов:  $D_t^h = \omega_t^h \times D^h$ ;  $D^h = \omega_{x_1}^h \times \omega_{x_2}^h \times \omega_{x_3}^h$ . Здесь  $\omega_t^h = \{ \cup_{j=1}^J [t_{j-1}, t_j]; t_j = t_{j-1} + \Delta t_j, j = \overline{1, J}; t_0 = 0, t_J = \bar{t} \}$ . Декомпозиция области по пространственным переменным определяется аналогично.

Алгоритм построения аппроксимаций состоит в следующем. Сначала интегралы в (7)–(9) представляются в виде суммы интегралов по интервалам области  $\omega_t^h$  и конечным объемам в  $D^h$ , а затем соответствующие подынтегральные выражения аппроксимируются дискретно-аналитическими агрегатами заданного порядка точности. Дискретные аналоги уравнений основных моделей получаются из условий стационарности расширенных функционалов (9) к произвольным и независимым вариациям функций  $\varphi^*$ . Условия стационарности сумматорных аналогов расширенных функционалов (9) к вариациям функций состояния  $\varphi$  приводят к дискретным аналогам сопряженных задач. Краевые, начальные условия и функции источников для них получаются так же, как следствия условий стационарности. Окончательно вариации целевых функционалов выражаются через вариации параметров  $\delta \mathbf{Y}$ . Полученные таким образом соотношения принято называть соотношениями чувствительности для целевых функционалов.

Поскольку основная задача распространения и трансформации примесей решается как начально-краевая задача математической физики в прямом направлении времени, реализацию соответствующих алгоритмов принято называть прямым моделированием. Сопряженные задачи решаются в обратном времени. С помощью соотношений чувствительности, в которых участвуют решения прямых и сопряженных задач, организуются обратные связи от функционалов к параметрам. В связи с этим поиск решений сопряженных задач, идентификация параметров, уточнение начальных данных и т. д. составляют предмет обратного моделирования [4, 14, 16, 18].

Определенные выше операторы (3), (4) используются при решении традиционных прямых задач. Для построения методов теории чувствительности и методов решения обратных задач, включая задачи усвоения данных, в дальнейшем нам потребуются соответствующие сопряженные задачи. Построим их, также используя вариационную технику. Для этих целей применяются производные Гато для нелинейных операторов уравнений (1), (2) в окрестности текущей траектории полей концентраций примесей в предположении, что функции состояния положительны.

Линеаризованные уравнения в вариациях имеют вид:

$$\frac{\partial \delta \varphi_i}{\partial t} + \sum_{r \in R_i} \left\{ \left[ k_i(r) (s_i(r_-) - s_i(r_+)) \prod_{\alpha=1}^{N_{ri}} \varphi_\alpha^{s_\alpha(r_-)} \right] \left[ \sum_{\beta \in N_{ri}} \frac{s_\beta(r_-)}{\varphi_\beta} \delta \varphi_\beta \right] \right\} = 0. \quad (10)$$

Эти уравнения получаются с помощью правил дифференцирования сложных функций, включающих произведения степенных функций. Для компактности записи используется определение логарифмической производной (см. [21, с. 14]). В результате уравнения, сопряженные по отношению к (10), записываются как

$$-\frac{\partial \varphi_i^*}{\partial t} + \sum_{r \in R_i} \left\{ \left[ k_i(r) \frac{s_i(r_-)}{\varphi_i} \prod_{\alpha \in N_{ri}} \varphi_\alpha^{s_\alpha(r_-)} \right] \left[ \sum_{\beta \in N_{ri}} (s_\beta(r_-) - s_\beta(r_+)) \varphi_\beta^* \right] \right\} = 0. \quad (11)$$

Заметим, что операции деления в (10) и (11) используются формально для компактности записи, чтобы не вводить суммы частичных производений при дифференцировании полиномов. Если же какая-либо из функций равна нулю, то соответствующие произведения, содержащие эту функцию, исключаются из варьирования, поскольку они также будут равны нулю. Чтобы не следить за поведением функций  $\varphi_i$ , можно работать по стандартным правилам дифференцирования произведений [21]. В этом случае выписать (10), (11) в компактном виде не удастся — их запись будет содержать множество сумм произведений, содержащих  $N_{ri}$  слагаемых.

Сопоставляя выражения (10), (11) с (1), (2), видим, что операторы, определяемые в (10) коэффициентами при значениях вариаций функций состояния  $\delta \varphi_i$ , представляют собой матрицы Якоби  $\partial \dot{A}_i(\varphi) / \partial \varphi$  и  $\partial P_i(\varphi) / \partial \varphi$  операторов  $\dot{A}_i(\varphi)$  и  $P_i(\varphi)$  соответственно. В (11) участвуют их транспонированные аналоги. Неотрицательность элементов этих матриц показана выше. Поэтому имеются все предпосылки для построения монотонных численных схем для решения прямых, сопряженных и обратных задач трансформации примесей.

#### 4. Метод построения численных схем с интегрирующими множителями

Рассмотрим один фрагмент тождества (7), соответствующий описанию модели трансформации примесей (1) на интервале времени  $t_j \leq t \leq t_{j+1}$  в квазилинейном приближении,

$$\int_{t_j}^{t_{j+1}} \left\{ \sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial \varphi_i}{\partial t} + A_i(\varphi) \varphi_i - P_i(\varphi) - q_i \right) \varphi_i^*(t) \right\} dt = 0, \quad (12)$$

где  $\varphi_i^*(t)$  — произвольные, достаточно гладкие функции. Напомним, что задачи (12) решаются на каждом шаге по времени и на каждом этапе расщепления формально независимо во всех точках трехмерной пространственной области. Это значит, что производятся многократные запуски одних и тех же алгоритмов с разными стартовыми данными,

т.е. с различными начальными условиями при  $t = t_j$  и наборами входных параметров, зависящих от координат сеточной области  $D_t^h$ . Характеристики жесткости системы по пространственным переменным меняются от точки к точке. В этом контексте нашей целью является создание робастного алгоритма.

Введем обозначения:  $F_i = F_i(\varphi, \mathbf{k}, \mathbf{q}) = P_i(\varphi) + q_i$ ,  $A_i = A_i(\varphi)$  и переобозначим  $\varphi_i^*(t) = \psi_i^*(t)$ . Проведя интегрирование по частям, преобразуем (12) к виду

$$\sum_{i=1}^n \left\{ \int_{t_j}^{t_{j+1}} \left[ \left( -\frac{\partial \psi_i^*}{\partial t} + A_i \psi_i^* \right) \varphi_i(t) - F_i \psi_i^* \right] dt + (\varphi_i \psi_i^*)^{j+1} - (\varphi_i \psi_i^*)^j \right\} = 0. \quad (13)$$

Находясь в рамках метода расщепления и декомпозиции и используя свойства аддитивности функционалов (13), рассмотрим систему, состоящую из  $n$  уравнений:

$$\int_{t_j}^{t_{j+1}} \left( -\frac{\partial \psi_i^*}{\partial t} + A_i \psi_i^* \right) \varphi_i(t) dt - \int_{t_j}^{t_{j+1}} F_i \psi_i^* dt + (\varphi_i \psi_i^*)^{j+1} - (\varphi_i \psi_i^*)^j = 0, \quad i = \overline{1, n}. \quad (14)$$

Суть декомпозиции здесь состоит в том, что вместо исследования суммы агрегатов (13) рассматривается система уравнений (14).

Теперь вспомним, что функции  $\psi_i^*$  произвольны, и конкретизируем их выбор. Воспользуемся идеей интегрирующих множителей Эйлера (ИМЭ) [20, 23], уже примененной нами при построении численных схем для операторов конвекции–диффузии [15]. Для решения на ее основе дифференциальных уравнений (1) выберем в (14) функции  $\psi_i^*(t)$  как решения локальных сопряженных задач:

$$\frac{\partial \psi_i^*}{\partial t} - A_i \psi_i^* = 0, \quad t_j \leq t \leq t_{j+1}, \quad \psi_i^* |_{t_{j+1}} = 1. \quad (15)$$

В этом случае функции  $\psi_i^*(t)$  играют роль интегрирующих множителей для уравнений из системы (1). В результате система уравнений (14) преобразуется к эквивалентной системе интегральных уравнений:

$$\varphi_i^{j+1} = (\varphi_i \psi_i^*)^j + \int_{t_j}^{t_{j+1}} F_i(\varphi, t) \psi_i^* dt, \quad i = \overline{1, n}. \quad (16)$$

Преимущество использования системы интегральных уравнений (16) для решения задач химической кинетики по сравнению с исходной системой (1) состоит в том, что мы избегаем операций численного дифференцирования, которые в некоторых случаях могут быть некорректными, в то время как операции построения квадратурных формул в (16) для вычисления интегралов корректны и хорошо обусловлены.

В предположении, что коэффициенты  $b_i^j \equiv A_i^j(\varphi^j)$  кусочно-постоянны на интервале  $t_j \leq t \leq t_{j+1}$ , приближенные решения сопряженных задач (15) имеют вид:

$$\psi_i^*(\tau) = \psi_i^{*j+1} e^{-b_i^j(\Delta t_j - \tau)}, \quad 0 \leq \tau \leq \Delta t_j. \quad (17)$$

Подставляя (17) в (16), получаем

$$\varphi_i^{j+1} = \varphi_i^j e^{-b_i^j \Delta t_j} + \int_0^{\Delta t_j} F_i(\varphi, \tau) e^{-b_i^j(\Delta t_j - \tau)} d\tau, \quad i = \overline{1, n}. \quad (18)$$

Система уравнений (18) является основой для построения численных схем и алгоритмов их реализации для нахождения значений функций состояния  $\{\varphi_i^{j+1}, i = \overline{1, n}\}$ .



Сформулируем теорему.

**Теорема 2.** Если операторы продукции и деструкции (4) удовлетворяют условиям (5) и функции источников  $q_i$  неотрицательны, то операторы перехода от момента времени  $t_j$  к  $t_{j+1}$ , содержащие экспоненциальные функции и интегральные операторы системы (18), обладают свойствами монотонности в пространстве неотрицательных функций  $\varphi_i$  из  $Q(D_t)$ . Алгоритм (18) обладает свойством устойчивости.

Доказательство монотонности следует из свойства матрицы Якоби  $\partial F_i/\partial \varphi \geq 0$  [19]. Неотрицательность матрицы также проверяется непосредственно с использованием определения оператора продукции в (4). Свойство устойчивости алгоритма (18) получается из сравнения порядков роста показательных и степенных функций в интегральном операторе. Порядок роста степенных функций, содержащихся в  $F_i$ , меньше, чем скорость убывания показательных функций в (18) [24].

## 5. Решение систем интегральных уравнений

Для решения задач (18) будем строить схемы с порядком точности не ниже  $o(\Delta t)^2$ . Для этого достаточно использовать для аппроксимации интегралов квадратурные формулы требующегося нам порядка точности. Для аппроксимации подынтегральных функций воспользуемся идеей многостадийных методов Рунге–Кутты–Розенброка о рекурсивном вычислении взвешенных приближенных значений функций [7, 9]. При различных сочетаниях квадратурных формул и формул вычисления подынтегральных выражений получаются семейства численных схем [5]. Из них выберем схемы, обладающие свойствами безусловной положительности. Приведем две такие схемы второго и четвертого порядка.

**Схема второго порядка точности.** Предполагается, что в момент времени  $t_j$  известен вектор  $\varphi^j = \{\varphi_i^j, i = \overline{1, n}\} \equiv \eta_1$ . Алгоритм решения задач (18) для  $t_j \leq t \leq t_{j+1}$  и  $i = \overline{1, n}$  состоит из следующих операций:

$$\varphi_i^{j+1} = \varphi_i^j e^{-a_i^j} + \frac{1 - e^{-a_i^j/2}}{a_i^j/2} (f_{1i} e^{-a_i^j/2} + f_{2i}) \frac{\Delta t_j}{2}; \quad (19)$$

$$a_i^j = A_i^j(\varphi^j, \mathbf{k}^j) \Delta t_j; \quad f_{\gamma i} = F_i^j(\eta_\gamma, \mathbf{k}^j, \mathbf{q}^j); \quad \eta_2 = \left\{ \varphi_i^j e^{-a_i^j} + \frac{1 - e^{-a_i^j}}{a_i^j} f_{1i} \Delta t_j; i = \overline{1, n} \right\}.$$

Векторы  $\eta_\gamma$ ,  $\gamma = \overline{1, 2}$ , здесь и далее представляют собой результаты промежуточных вычислений. Монотонный характер алгоритма при  $a_i^j \geq 0$  непосредственно следует из свойств неотрицательности всех сомножителей и слагаемых в (19).

**Схема четвертого порядка точности.** По аналогии с (19)  $\varphi^j \equiv \eta_1$  имеем:

$$\begin{aligned} \varphi_i^{j+1} &= \varphi_i^j e^{-a_i^j} + \frac{\Delta t_j}{6} (f_{1i} e^{-a_i^j} + 2e^{-a_i^j/2} (f_{2i} + f_{3i}) + f_{4i}); \quad i = \overline{1, n}; \\ \eta_{2i} &= \left( \varphi_i^j + \frac{\Delta t_j}{2} f_{1i} \right) e^{-a_i^j/2}; \quad \eta_{3i} = \varphi_i^j e^{-a_i^j/2} + \frac{\Delta t_j}{2} f_{2i}; \quad \eta_{4i} = \varphi_i^j e^{-a_i^j} + \Delta t f_{3i} e^{-a_i^j/2}; \\ f_{\gamma i} &= F_i(t_j + \tau_\gamma \Delta t_j, \eta_\gamma); \quad \eta_\gamma = (\eta_{\gamma i}, i = \overline{1, n}); \quad \tau = \{\tau_\gamma\} \equiv (0, 0.5, 0.5, 1); \quad \gamma = \overline{1, 4}. \end{aligned} \quad (20)$$

Как и в схеме (19), здесь все слагаемые неотрицательны, и схема в целом монотонна. Условие  $a_i^j > 0$  обеспечивает устойчивость алгоритмов (19), (20).

Сделаем замечания по этим схемам.

**Замечание 1.** Чтобы повысить точность решения сопряженных задач и алгоритмов в целом, можно пересчитывать значения операторов  $A_i^j$  в  $a_i^j$  на промежуточных этапах, используя функции  $\eta_\gamma$ .

**Замечание 2.** Если в каком-нибудь из уравнений системы (1) отсутствует оператор деструкции,  $A_i(\varphi) = 0$  и имеется только оператор продукции, то для повышения устойчивости алгоритма (18) и схем (19), (20) для этого уравнения предлагается ввести новую искомую функцию  $\tilde{\varphi}_i$  по формуле  $\varphi_i = e^{\lambda_i t} \tilde{\varphi}_i$ , где  $\lambda_i > 0$  — параметр и, получив значение новой функции, следует вернуться к функциям  $\varphi_i$ .

**Замечание 3.** В силу выполнения условий (5), выбор шагов по времени при аппроксимации операторов системы интегральных уравнений (18) определяется критерием репрезентативности вычисления значений экспоненциальных функций при больших значениях аргументов в формулах алгоритмов (19), (20) без потери точности. Конкретно, на практике достаточно, чтобы величины показателя экспонент находились в диапазонах значений  $z \equiv A_i^j(\varphi) \Delta t_j \leq 10$  для каждого механизма реакций в совокупности  $R_i$ , в деструктивной части которых участвует  $\varphi_i$ . Такой широкий диапазон интервалов времени позволяет достаточную степень селективного выбора локальных аппроксимаций для описания разномасштабных механизмов реакций.

**Замечание 4.** Сравним наш метод с широко распространенными неявными методами типа Рунге–Кутты на примере тестового уравнения Далквиста  $y' = \lambda y$ ,  $y_0 = 1$ ,  $z = \Delta t \lambda$ . В монографии [9, с. 54, табл. 3] представлены функции устойчивости для 10 методов Рунге–Кутты. Вид всех функций показывает, что все они приближают экспоненциальную функцию только при условии  $z < 1$ . Аналогичные критерии аппроксимации получаются и при использовании методов Розенброка ([9, с. 129, табл. 7.2]).

В нашем методе решения (17) локальных сопряженных задач (15) по существу играют роль функций устойчивости. Поскольку эти решения получаются аналитически, их репрезентативность остается приемлемой для расчетов и при условии  $z \leq 10$ .

## 6. Алгоритмы прямого и обратного моделирования

Для оценок целевых функционалов вида (8) в пространстве параметров, а также для решения основных и обратных задач с усвоением данных наблюдений требуются взаимно согласованные алгоритмы решения прямых и сопряженных задач. Для этих целей мы используем вариационную технику [5, 14, 18] с учетом специфики объектов (19), (20).

Схемы типа (19), (20) являются многошаговыми и рекурсивными. Нам же требуется пройти с помощью вспомогательных сопряженных задач путь от функционалов к параметрам модели и источникам в обратном времени через все этапы расщепления в глобальной схеме и через последовательности рекурсивных вычислений в схемах реализации алгоритмов (19) или (20). Поэтому для работы с ними мы строим специальные конструкции, имеющие последовательную экономичную схему реализации. При этом получается новый способ построения соотношений чувствительности для оценок вариаций функционалов (8) и соответствующих им функций чувствительности к вариациям обобщенных векторов параметров  $\{\delta \mathbf{Y} = (\delta \varphi^0, \delta \mathbf{k}, \delta \mathbf{q})^\top, \mathbf{Y} + \delta \mathbf{Y} \in R(D_t)\}$ .

Далее опишем суть способа построения вариационных алгоритмов прямого и обратного моделирования для задач химической кинетики. В качестве примера рассмотрим организацию этих алгоритмов для схем типа (19).

Вычисления осуществляются в режиме прямого моделирования на интервалах времени  $\Delta t_j = t_{j+1} - t_j$  для каждой точки пространственной области и для всех функций  $\varphi_i$ ,  $i = \overline{1, n}$ . Введем обозначения, которые, с одной стороны, представляют расчетные элементы алгоритмов (19), а с другой, выступают в роли ограничений на класс искомых функций при формулировке вариационного принципа:

$$\begin{aligned} H_{1i}^j &= e^{-a_i^j/2}; & H_{2i}^j &= (H_{1i}^j)^2; & a_i^j &= A_i^j(\varphi^j, \mathbf{k}^j)\Delta t_j; \\ W_i^j &= (1 - H_{2i}^j)/a_i^j; & V_{2i}^j &= 2(1 - H_{1i}^j)/a_i^j; & V_{1i}^j &= V_{2i}^j H_{1i}^j; \\ \eta_{1i}^j &= \varphi_i^j; & \eta_{2i}^j &= \varphi_i^j H_{2i}^j + W_i^j f_{1i}^j \Delta t_j; & \eta_\gamma^j &= (\eta_{\gamma i}^j, i = \overline{1, n}), \quad \gamma = 1, 2; \\ F_i^j(\varphi^j, \mathbf{k}^j, \mathbf{q}^j) &= P_i^j(\varphi^j, \mathbf{k}^j) + q_i^j; & f_{1i}^j &= F_i^j(\eta_1^j, \mathbf{k}^j, \mathbf{q}^j); & f_{2i}^j &= F_i^j(\eta_2^j, \mathbf{k}^j, \mathbf{q}^j); \\ \varphi_i^{j+1} &= \varphi_i^j H_{2i}^j + \frac{\Delta t_j}{2} (V_{1i}^j f_{1i}^j + V_{2i}^j f_{2i}^j). \end{aligned} \quad (21)$$

Теперь, используя соотношения (21), определим расширенный функционал типа (9) вариационного принципа для оценок целевого функционала (8). Он используется также и для построения локальных сопряженных задач и соотношений чувствительности:

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}_l(\varphi) &= \sum_{j=1}^J \Phi_l^j(\varphi) + \sum_{j=0}^{J-1} \left\{ \sum_{i=1}^n \left\{ (V_{2i}^j - 2(1 - H_{1i}^j)/a_i^j) V_{2i}^{*j} + (V_{1i}^j - V_{2i}^j H_{1i}^j) V_{1i}^{*j} + \right. \right. \\ & (W_i^j - (1 - H_{2i}^j)/a_i^j) W_i^{*j} + (H_{1i}^j - e^{-a_i^j/2}) H_{1i}^{*j} + (H_{2i}^j - (H_{1i}^j)^2) H_{2i}^{*j} + \\ & (a_i^j - A_i^j(\varphi^j, \mathbf{k}^j)\Delta t_j) a_i^{*j} + (\eta_{1i}^j - \varphi_i^j) \eta_{1i}^{*j} + (\eta_{2i}^j - (\varphi_i^j H_{2i}^j + W_i^j f_{1i}^j \Delta t_j)) \eta_{2i}^{*j} + \\ & (f_{1i}^j - F_i^j(\eta_1^j, \mathbf{k}^j, \mathbf{q}^j)) f_{1i}^{*j} \Delta t_j + (f_{2i}^j - F_i^j(\eta_2^j, \mathbf{k}^j, \mathbf{q}^j)) f_{2i}^{*j} \Delta t_j + \\ & \left. \left. \left( \varphi_i^{j+1} - \left( \varphi_i^j H_{2i}^j + \frac{\Delta t_j}{2} (V_{1i}^j f_{1i}^j + V_{2i}^j f_{2i}^j) \right) \right) \varphi_i^{*j+1} \right\} + \sum_{i=1}^n (\varphi_i^0 - \varphi_{ai}^0) \varphi_i^{*1}, \quad (22) \end{aligned}$$

где  $\varphi_{ai}^0$  — априорная оценка начального значения функций состояния, а символом \* отмечены объекты, которые вводятся в качестве множителей Лагранжа (МЛ) для учета ограничений (21).

Система основных уравнений прямой задачи (19), (21) представляет собой совокупность условий стационарности сумматорного функционала (22) к вариациям МЛ. Далее условия стационарности этого функционала к вариациям функций состояния  $\varphi^j$  и вспомогательных функций, введенных в совокупность ограничений (21), приводят к системе уравнений, сопряженных по отношению к исходной задаче (19). Запишем эту систему сразу в виде алгоритма, ее реализующего.

Начальные условия для сопряженных функций определим в момент времени  $t = t_J$ :

$$\varphi^{*J+1} = 0, \quad \varphi_i^{*J} = \partial \Phi_l(\varphi^J) / \partial \varphi_i^J, \quad i = \overline{1, n}. \quad (23)$$

Первое из них задается для удобства замыкания сопряженных задач, а второе является следствием условия стационарности расширенного функционала к вариациям искомых функций состояния в момент времени  $t = t_J$ .

Алгоритм решения сопряженной задачи представляет последовательность операций, которые реализуются в обратном времени  $[t_J, t_0]$  на интервалах  $\Delta t_j$  ( $j = \overline{J, 1}$ ) и для всех  $i = \overline{1, n}$ :

$$\begin{aligned}
1. \quad & f_{2i}^{*j} = 0.5V_{2i}^j \varphi_i^{*j+1}; \quad \eta_{\gamma i}^{*j} = \sum_{\alpha=1}^n \left[ \frac{\partial F_{\alpha}^j(\boldsymbol{\eta}^j, \mathbf{k}, \mathbf{q}^j)}{\partial \eta_{\gamma i}^j} \right] f_{\gamma \alpha}^{*j} \Delta t_j, \quad \gamma = 2, 1; \\
2. \quad & f_{1i}^{*j} = W_i^j \eta_{2i}^{*j} + 0.5V_{1i}^j \varphi_i^{*j+1}; \\
3. \quad & W_i^{*j} = f_{1i}^j \eta_{2i}^{*j} \Delta t_j; \quad V_{1i}^{*j} = 0.5 \Delta t_j f_{1i}^j \varphi_i^{*j+1}; \quad V_{2i}^{*j} = 0.5 \Delta t_j f_{2i}^j \varphi_i^{*j+1} + H_{1i}^j V_{1i}^{*j}; \\
4. \quad & H_{2i}^{*j} = \varphi_i^j \varphi_i^{*j+1} + \varphi_i^j \eta_{2i}^{*j} - W_i^{*j} / a_i^j; \quad H_{1i}^{*j} = 2H_{1i}^j H_{2i}^{*j+1} - 2V_{2i}^{*j} / a_i^j + V_{2i}^j V_{1i}^{*j}; \\
5. \quad & a_i^{*j} = -[2(1 - H_{1i}^j) V_{2i}^{*j} + (1 - H_{2i}^j) W_i^{*j}] / (a_i^j)^2 - 0.5 H_{1i}^j H_{1i}^{*j}; \\
6. \quad & \varphi_i^{*j} = \eta_{1i}^{*j} + H_{2i}^j (\varphi_i^{*j+1} + \eta_{2i}^{*j}) + \sum_{\alpha=1}^n \left[ \frac{\partial A_{\alpha}^j(\boldsymbol{\varphi}^j, \mathbf{k})}{\partial \varphi_i^j} a_{\alpha}^{*j} \right] \Delta t_j + \frac{\partial \Phi_i^j(\boldsymbol{\varphi}^j)}{\partial \varphi_i^j}.
\end{aligned} \tag{24}$$

После решения прямой задачи (19), (21) и сопряженной (23), (24) из определения (22) получаем соотношения чувствительности целевых функционалов к вариациям начальных полей, источников эмиссии примесей и констант скоростей реакций:

$$\begin{aligned}
\delta \Phi_l(\boldsymbol{\varphi}) = & \sum_{j=0}^J \left\{ \sum_{i=1}^n \left\{ \sum_{\gamma=1}^2 \left[ \left( \frac{\partial F_i^j(\boldsymbol{\eta}^j, \mathbf{k}^j, \mathbf{q}^j)}{\partial \mathbf{k}^j}, \delta \mathbf{k}^j \right) + \delta q_i^j \right] f_{\gamma i}^{*j} + \left( \frac{\partial A_i^j(\boldsymbol{\varphi}^j, \mathbf{k}^j)}{\partial \mathbf{k}^j}, \delta \mathbf{k}^j \right) a_i^{*j} \right\} \Delta t_j \right\} - \\
& \sum_{i=1}^n (\delta \varphi_{ai}^0 \varphi_i^{*0}) \equiv (\text{grad}_{\mathbf{Y}} \Phi_l(\boldsymbol{\varphi}), \delta \mathbf{Y}).
\end{aligned} \tag{25}$$

Здесь  $\delta \Phi_l(\boldsymbol{\varphi})$  и  $\delta \Phi_l^j(\boldsymbol{\varphi})$  — вариации глобального целевого функционала (8) и его частей, декомпозированных по интервалам времени  $\Delta t_j$ . Вариационные алгоритмы для схемы (20) строятся по аналогии с объектами (21)–(25). Выражения (25) представляют вариацию функционала в виде скалярного произведения в пространстве параметров. Они определяют алгоритм вычисления вариаций функционалов (8) в зависимости от вариаций параметров. Коэффициенты при вариациях компонент  $\delta \boldsymbol{\varphi}^0$ ,  $\delta \mathbf{k}^j$ ,  $\delta \mathbf{q}^j$  обобщенного вектора параметров  $\mathbf{Y}$  представляют собой функции чувствительности целевого функционала к этим вариациям соответственно. По физическому смыслу соотношения чувствительности (25) выражают тенденции изменений целевых функционалов в зависимости от возмущений входных параметров моделей, констант скоростей реакций в механизмах трансформации и источников эмиссии примесей. В свою очередь, функции чувствительности этих функционалов дают количественную основу для решения задач усвоения данных и обратных задач по уточнению перечисленных выше параметров и источников эмиссии при совместном использовании моделей и усваиваемых данных в задачах природоохранного прогнозирования [14, 16].

## 7. Обсуждение и заключение

В комбинированных методах прямого–обратного моделирования для решения задач атмосферной химии особо важно обеспечить высокую степень согласованности численных схем в цепочке: прямые–сопряженные задачи–соотношения теории чувствительности–обратные задачи. Здесь мы представили новый усовершенствованный вариант совокупности алгоритмов для этих целей.

Сделаем несколько замечаний о преимуществах предлагаемого нами подхода и особенностях численной реализации построенных алгоритмов.

1. Благодаря использованию идеи интегрирующих множителей, алгоритмы решения основных и сопряженных задач (19)–(24) являются прямыми. Аналитические решения локальных сопряженных задач в рамках вариационного принципа играют роль интегрирующих множителей для дифференциальных уравнений химической трансформации примесей. С их помощью система исходных дифференциальных уравнений преобразуется в эквивалентную систему интегральных уравнений. В результате исключается необходимость построения и обращения преобуславливающих операторов, содержащих матрицы Якоби операторов трансформации, возникающих в традиционных неявных схемах для решения ОДУ, и ослабляются ограничения на шаги по времени. В этом принципиальное отличие вариационного метода с интегральными уравнениями, которые здесь используются, от неявных методов Гира, Рунге–Кутты–Розенброка и других неявных решателей. Следует заметить, что в нашем подходе для аппроксимации подынтегральных выражений (18), взвешенных с экспоненциальными функциями ИМЭ, использованы идея и структура схемы многошаговых рекурсивных вычислений типа Рунге–Кутты–Розенброка для обеспечения требуемой точности численных схем.
2. Операции дифференцирования операторов относительно их функциональных аргументов в алгоритмах (23)–(25) выполняются аналитически. Это исключает неопределенности, связанные с приближенными вычислениями дифференциалов сложных нелинейных операторов.
3. При формировании вариационных принципов (22) для исследования сложных многостадийных процессов проявились замечательные свойства множителей Лагранжа. С их участием самые сложные алгоритмические конструкции рекурсивного характера легко реализуются с помощью сопряженных задач (23), (24) на элементарных стадиях. Это делает прозрачными соотношения чувствительности (25) целевых функционалов к вариациям входных данных, источников и параметров моделей, необходимых для решения обратных задач с усвоением данных наблюдений.
4. Построенные алгоритмы допускают многовариантное распараллеливание.

Таким образом, вариационный подход, используемый для решения взаимосвязанных задач экологии и климата, демонстрирует перспективность как с теоретической, так и технологической точек зрения. Он также является универсальным и может быть использован для широкого класса научных и практических задач математического моделирования.

*Благодарности.* Авторы благодарны рецензенту, замечания которого способствовали улучшению текста рукописи.

## Литература

1. **Яненко Н.Н.** Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. — Новосибирск: Наука, 1967.
2. **Марчук Г.И.** Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. — М.: Наука, 1982.
3. **Самарский А.А.** Теория разностных схем. — М.: Наука, 1983.
4. **Марчук Г.И.** Сопряженные уравнения и анализ сложных систем. — М.: Наука, 1992.
5. **Пененко В.В.** Методы численного моделирования атмосферных процессов. — Л.: Гидрометеоиздат, 1981.

6. **Пененко В.В., Алоян А.Е.** Модели и методы для задач охраны окружающей среды. — Новосибирск: Наука, 1985.
7. **Деккер К., Вервер Я.** Устойчивость методов Рунге–Кутты для жестких нелинейных дифференциальных уравнений. — М.: Мир, 1988.
8. **Gear C.W.** Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations. — Englewood Cliffs, New Jersey: Prentice-Hall, Inc., 1971.
9. **Хайрер Э., Ваннер Г.** Решения обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. — М.: Мир, 1999.
10. **Штеттер Х.** Анализ методов дискретизации для обыкновенных дифференциальных уравнений. — М.: Мир, 1978.
11. **Эйринг Г., Лин С.Г., Лин С.М.** Основы химической кинетики. — М.: Мир, 1983.
12. **Sandu A., Verwer J.G., van Loon M., Carmichael G.R., Potra F.A., Dabdub D., and Seinfeld G.H.** Benchmarking stiff ODE solvers for atmospheric chemistry problems I: Implicit versus explicit // Atmospheric Environment. — 1997. — Vol. 31. — P. 3151–3166.
13. **Sandu A., Verwer J.G., Blom J.G., Spee E.J., Carmichael G.R., and Potra F.A.** Benchmarking stiff ODE solvers for atmospheric chemistry problems II: Rosenbrock solvers // Atmospheric Environment. — 1997. — Vol. 31. — P. 3459–3472.
14. **Пененко В.В.** Вариационные методы усвоения данных и обратные задачи для изучения атмосферы, океана и окружающей среды // Сиб. журн. вычислит. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2009. — Т. 12, № 4. — С. 421–434.
15. **Penenko V., Tsvetova E.** Discrete-analytical methods for the implementation of variational principles in environmental applications // J. of Computational and Applied Mathematics. — 2009. — Vol. 226, iss. 1. — P. 319–330.
16. **Penenko V., Baklanov A., Tsvetova E., and Mahura A.** Direct and inverse problems in a variational concept of environmental modeling // Pure and Applied Geophysics. — 2012. — Vol. 169, № 4. — P. 447–465.
17. **Самарский А.А., Вабищевич П.Н.** Аддитивные схемы для задач математической физики. — М.: Наука, 2001.
18. **Пененко В.В.** О концепции природоохранного прогнозирования // Оптика атмосферы и океана. — 2010. — Т. 23, № 6. — С. 432–438.
19. **Коллатц Л.** Функциональный анализ и вычислительная математика. — М.: Мир, 1969.
20. **Kamke E.** Differentialgleichungen. Lösungsmethoden und Lösungen. Band 1. — Leipzig: Akademische Verlagsgesellschaft Geest & Portig, 1959.
21. **Араманович И.Г., Гутер Р.С., Люстерник Л.А., Раухваргер И.Л. и др.** Математический анализ // Дифференцирование и интегрирование. Серия СМБ. — М.: Физматгиз, 1961.
22. **Смирнов В.И.** Курс высшей математики. Т 4. — М.: Наука, 1974.
23. **Матвеев Н.М.** Методы интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений. 3-е изд-ние, испр. и доп. — М.: Высшая школа, 1967.
24. **Курант Р.** Курс дифференциального и интегрального исчисления. Том 1. — М.: Наука, 1967.

*Поступила в редакцию 28 апреля 2012 г.,  
в окончательном варианте 15 ноября 2012 г.*