

РЕАЛИЗАЦИЯ МЕТОДА ПРОДОЛЖЕНИЯ ПО ПАРАМЕТРУ ДЛЯ СИСТЕМЫ ДВУХ УРАВНЕНИЙ

В. И. БЫКОВ

Институт вычислительного моделирования СО РАН

Красноярск, Россия

С. Б. ЦЫБЕНОВА

Красноярский государственный технический университет, Россия

e-mail: bykov@fivt.krasn.ru

The modified method of continuation on parameter for two nonlinear equations system is described. The method is illustrated by Slinko-Chumakov's model from the theory of oscillating catalytic reactions and by Volter-Salnikov's model from the theory of polymerization. Parametric dependences of steady states are constructed.

В нашей предыдущей работе [1] общая схема параметрического анализа решений системы нелинейных уравнений была модифицирована для важного, но частного случая, когда система в результате процедуры исключения переменных может быть сведена к одному уравнению. Однако при анализе конкретных нелинейных моделей не всегда удается осуществить такое исключение [2]. Зачастую исходную систему можно свести к системе двух уравнений. Как показано в настоящей работе, общая схема метода продолжения по параметру может быть модифицирована и в этом случае. Ее компьютерная реализация существенно проще по сравнению с общим подходом [2–7].

Рассматривается система двух нелинейных уравнений с параметром

$$\begin{aligned} f(x, y, \alpha) &= 0, \\ g(x, y, \alpha) &= 0, \end{aligned} \quad (1)$$

где x, y — неизвестные; α — параметр; f, g — в общем случае нелинейные функции. Система двух уравнений (1) неявным образом задает зависимости

$$x = x(\alpha), \quad y = y(\alpha). \quad (2)$$

Целью параметрического анализа решений системы (1) является построение функций (2). Согласно одному из подходов реализации метода продолжения по параметру [3] после подстановки (2) в (1) и дифференцирования полученных тождеств имеем

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{d\alpha} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{d\alpha} + \frac{\partial f}{\partial \alpha} &= 0, \\ \frac{\partial g}{\partial x} \frac{dx}{d\alpha} + \frac{\partial g}{\partial y} \frac{dy}{d\alpha} + \frac{\partial g}{\partial \alpha} &= 0. \end{aligned} \quad (3)$$

Вводя обозначения

$$\Delta = \begin{vmatrix} \frac{\partial f}{\partial x} & \frac{\partial f}{\partial y} \\ \frac{\partial g}{\partial x} & \frac{\partial g}{\partial y} \end{vmatrix}, \quad \Delta_1 = \begin{vmatrix} -\frac{\partial f}{\partial \alpha} & \frac{\partial f}{\partial y} \\ -\frac{\partial g}{\partial \alpha} & \frac{\partial g}{\partial y} \end{vmatrix}, \quad \Delta_2 = \begin{vmatrix} \frac{\partial f}{\partial x} & -\frac{\partial f}{\partial \alpha} \\ \frac{\partial g}{\partial x} & -\frac{\partial g}{\partial \alpha} \end{vmatrix},$$

из (3) получаем

$$\frac{dx}{d\alpha} = \frac{\Delta_1}{\Delta}, \quad \frac{dy}{d\alpha} = \frac{\Delta_2}{\Delta}. \quad (4)$$

Для построения искомым параметрических зависимостей (2) в рассматриваемой реализации метода продолжения по параметру система двух дифференциальных уравнений (4) решается при заданных начальных данных:

$$x(\alpha_0) = x_0, \quad y(\alpha_0) = y_0. \quad (5)$$

Особенность системы (4) состоит в том, что в точках поворота кривой (2) в трехмерном пространстве (x, y, α) один из определителей Δ , Δ_1 , Δ_2 равен нулю. Поэтому, следуя [6], можно ввести так называемый текущий параметр (одну из переменных x , y , α) и наряду с (4) рассматривать еще две системы дифференциальных уравнений:

$$\frac{d\alpha}{dx} = \frac{\Delta}{\Delta_1}, \quad \frac{dy}{dx} = \frac{\Delta_2}{\Delta_1} \quad (6)$$

или

$$\frac{dx}{dy} = \frac{\Delta_1}{\Delta_2}, \quad \frac{d\alpha}{dy} = \frac{\Delta}{\Delta_2}. \quad (7)$$

Таким образом, движение по кривой параметрических зависимостей (2) может быть осуществлено путем интегрирования одной из трех систем — (4), (6) или (7). Чередувание этих систем определяется значениями трех величин — Δ , Δ_1 , Δ_2 . Если $\Delta_1 < \Delta$ и $\Delta_2 < \Delta$, то в качестве текущего параметра выбирается α и интегрируется система (4); если $\Delta < \Delta_1$ и $\Delta_2 < \Delta_1$, то интегрируется (5) по текущему параметру x ; если $\Delta_1 < \Delta_2$ и $\Delta < \Delta_2$, то текущий параметр y , т. е.

$$\begin{aligned} &\text{если } \Delta_1 < \Delta, \quad \Delta_2 < \Delta, \quad \text{то (4);} \\ &\text{если } \Delta < \Delta_1, \quad \Delta_2 < \Delta_1, \quad \text{то (6);} \\ &\text{если } \Delta_1 < \Delta_2, \quad \Delta < \Delta_2, \quad \text{то (7).} \end{aligned}$$

При компьютерной реализации предлагаемой схемы продолжения по параметру движение по кривой в пространстве (x, y, α) должно осуществляться таким образом, что соответствующий интегратор содержит сравнение величин Δ , Δ_1 , Δ_2 , выбор текущего параметра и интегрирование одной из систем — (4), (6) или (7). В нашей реализации в качестве интегратора использовалась схема (m, k) -метода решения жестких систем, предложенная Е. А. Новиковым [8]. Преимуществом предлагаемого варианта движения по параметру является отсутствие по сравнению с общим случаем технических трудностей, связанных с прохождением бифуркационных точек на кривой (2) — точек поворота, в которых происходит вырождение матрицы Якоби системы (1) [9, 10]. При этом движение по текущему параметру осуществляется с заданным постоянным шагом. Вместе с тем, как и в общей ситуации, трудноформализуемым моментом является задание хорошего начального приближения (5) и направления движения по параметру. Начальные данные (5)

обычно уточняются в результате нескольких ньютоновских итераций. Кроме того, в качестве исходных данных задаются границы изменения параметров. Различные ветви (если таковые существуют) кривой параметрических зависимостей (2) строятся при варьировании начальных данных в широких пределах. Заметим, что в некоторых реализациях общей схемы метода продолжения по параметру решений системы n уравнений движение в пространстве $(x_1, \dots, x_n, \alpha)$ осуществляется интегрированием системы n дифференциальных уравнений, у которой в качестве независимой переменной выступает не параметр α , а длина дуги кривой $x_i(\alpha)$, $i = 1, \dots, n$ [3]. В этом случае проблема прохождения точек поворота снимается, однако правые части интегрируемой системы становятся более громоздкими. В нашей реализации эта техническая трудность отсутствует. Движение по длине дуги заменяется движением по текущему параметру с несложной логикой процедуры сравнения текущих значений Δ , Δ_1 , Δ_2 .

Приведем примеры, иллюстрирующие предлагаемую схему реализации метода продолжения по параметру для систем двух нелинейных уравнений. Один пример взят из теории полимеризации (модель Вольтера — Сальникова [11, 12]), а второй — из теории осциллирующих каталитических реакций (модель Слинько — Чумакова [13, 14]). Полученные параметрические зависимости не только подтверждают эффективность предлагаемого подхода, но и имеют самостоятельное прикладное значение.

Нестационарная математическая модель Вольтера — Сальникова для реакции n -го порядка имеет вид [11]

$$\begin{aligned} \frac{dx}{d\tau} &= -x^n \exp(-1/y) + \lambda(x_0 - x), \\ \frac{dy}{d\tau} &= x^n \exp(-1/y) + \mu(y_0 - y), \end{aligned} \quad (8)$$

где x , y — безразмерные концентрация и температура соответственно; τ — безразмерное время; x_0 , y_0 , λ , μ , n — безразмерные параметры. Стационарные состояния для динамической системы (8) определяют как решения системы двух нелинейных уравнений:

$$\begin{aligned} f(x, y, p) &= -x^n \exp(-1/y) + \lambda(x_0 - x) = 0, \\ g(x, y, p) &= x^n \exp(-1/y) + \mu(y_0 - y) = 0, \end{aligned}$$

где p — вектор параметров x_0 , y_0 , λ , μ , n . Целью параметрического анализа модели (8) является прежде всего построение параметрических зависимостей $x(p_i)$, $y(p_i)$, где p_i — один из параметров.

В соответствии с рассматриваемой схемой метода продолжения по параметру вычисляются производные

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x} &= -nx^{n-1} \exp(-1/y) - \lambda, & \frac{\partial f}{\partial y} &= -\frac{x^n}{y^2} \exp(-1/y), \\ \frac{\partial g}{\partial x} &= nx^{n-1} \exp(-1/y), & \frac{\partial g}{\partial y} &= \frac{x^n}{y^2} \exp(-1/y) - \mu. \end{aligned}$$

Далее, выбирая в качестве параметра, например, x_0 , вычисляем

$$\frac{\partial f}{\partial x_0} = \lambda, \quad \frac{\partial g}{\partial x_0} = 0;$$

наконец

$$\Delta = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial g}{\partial y} - \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial g}{\partial x}, \quad \Delta_1 = \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial g}{\partial x_0} - \frac{\partial f}{\partial x_0} \frac{\partial g}{\partial y}, \quad \Delta_2 = \frac{\partial f}{\partial x_0} \frac{\partial g}{\partial x} - \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial g}{\partial x_0}.$$

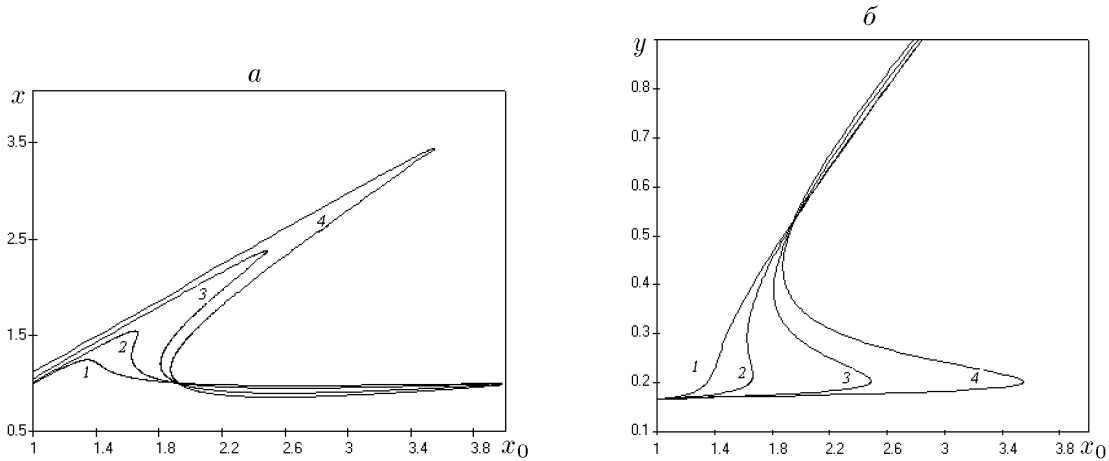


Рис. 1. Параметрические зависимости стационарных состояний системы (8) при $\mu = 0.4$, $\lambda = 0.15$, $y_0 = 0.16$: $a - x(x_0)$, $b - y(x_0)$; $n = 4, 2, 1, 0.7$ — кривые 1 — 4 соответственно.

Примеры построения параметрических зависимостей $x(x_0)$, $y(x_0)$ по описанной выше схеме реализации метода продолжения по параметру приведены на рис. 1.

Эти зависимости имеют характерную S-образную форму. При определенных значениях параметра существуют три стационарных состояния. Точки поворота на кривых $x(x_0)$, $y(x_0)$ отвечают бифуркациям, которые ограничивают область множественности стационарных состояний. Варьирование второго параметра (на рис. 1 это n) позволяет в плоскости выделенных двух параметров численно построить эту область. При движении по кривой параметрических зависимостей $x(x_0)$, $y(x_0)$ в пространстве (x, y, x_0) смена текущего параметра осуществлялась несколько раз в соответствии с прохождением точек поворота на кривых $x(x_0)$, $y(x_0)$. Расчеты показывают, что порядок реакции (параметр n) существенно влияет на размер области множественности стационарных состояний модели (8). При прочих равных условиях в случае роста n эта область уменьшается.

Математическая модель Слинько — Чумакова, описывающая сложное динамическое поведение процесса окисления водорода на поверхности катализатора, имеет вид [12, 13]

$$\begin{aligned} \dot{y}_1 &= k_1(1 - y_1 - y_2)^2 - k_{-1}y_1^2 - 2k_3y_1^2y_2, \\ \dot{y}_2 &= k_2(1 - y_1 - y_2)^2 - k_4y_2 - k_3y_1^2y_2, \\ \dot{y}_3 &= \varepsilon(y_2(1 - y_3) - \alpha y_3(1 - y_1 - y_2)), \end{aligned} \quad (9)$$

где $\dot{y}_i = dy_i/d\tau$, $i = 1, 2, 3$; y_i — концентрации реагентов; k_i — константы скоростей реакций, некоторые из них зависят от концентраций реагентов:

$$\begin{aligned} k_3 &= k_3^0 \exp(-\mu_3 y_2), \\ k_4 &= k_4^0 \exp(-\mu_4 y_2 - \mu_5 y_3); \end{aligned} \quad (10)$$

$k_1, k_2, k_{-1}, k_3^0, k_4^0, \alpha, \mu_3, \mu_4, \mu_5, \varepsilon$ — параметры модели. Стационарные состояния системы (9) определяются из условий стационарности

$$\begin{aligned} k_1(1 - y_1 - y_2)^2 - k_{-1}y_1^2 - 2k_3y_1^2y_2 &= 0, \\ k_2(1 - y_1 - y_2)^2 - k_4y_2 - k_3y_1^2y_2 &= 0, \\ y_2(1 - y_3) - \alpha y_3(1 - y_1 - y_2) &= 0. \end{aligned} \quad (11)$$

После элементарных преобразований из (11) получаем систему двух нелинейных уравнений относительно неизвестных y_1, y_2 :

$$\begin{aligned} f_1(y_1, y_2) &= k_1(1 - y_1 - y_2)^2 - k_{-1}y_1^2 - 2k_3(y_2)y_1^2y_2 = 0, \\ f_2(y_1, y_2) &= k_2(1 - y_1 - y_2)^2 - k_4(y_1, y_2)y_2 - k_3(y_2)y_1^2y_2 = 0, \end{aligned} \quad (12)$$

где $k_3(y_2), k_4(y_1, y_2)$ определены в (10) и

$$y_3 = \frac{y_2}{y_2 + \alpha(1 - y_1 - y_2)}. \quad (13)$$

В качестве варьируемого параметра выберем константу скорости k_1 (физически это означает, что меняется парциальное давление водорода). Вычисляя соответствующие производные для системы (12), (13), имеем

$$\begin{aligned} \Delta &= f'_{1y_1}f'_{2y_2} - f'_{1y_2}f'_{2y_1}, \\ \Delta_1 &= -f'_{1k_1}f'_{2y_2}, \\ \Delta_2 &= f'_{1k_1}f'_{2y_1}, \end{aligned} \quad (14)$$

где $f'_{iy_j} = \partial f_i / \partial y_j, i, j = 1, 2$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_1}{\partial y_1} &= -2k_1(1 - y_1 - y_2) - 2k_{-1} - 4k_3(y_2)y_1y_2, \\ \frac{\partial f_1}{\partial y_2} &= -2k_1(1 - y_1 - y_2) + 2k_3(y_2)y_1^2(\mu_3y_2 - 1), \\ \frac{\partial f_1}{\partial k_1} &= (1 - y_1 - y_2)^2, \\ \frac{\partial f_2}{\partial y_1} &= -2k_2(1 - y_1 - y_2) - 2k_3(y_2)y_1y_2 + \frac{k_4(y_1, y_2)\mu_5y_2^2\alpha}{(y_2 + \alpha(1 - y_1 - y_2))^2}, \\ \frac{\partial f_2}{\partial y_2} &= -2k_2(1 - y_1 - y_2) + k_3(y_2)y_1^2(\mu_3y_2 - 1) + \\ &+ k_4(y_1, y_2) \left[y_2 \left(\mu_4 + \frac{\mu_5\alpha(1 - y_1)}{(y_2 + \alpha(1 - y_1 - y_2))^2} \right) - 1 \right], \\ \frac{\partial f_2}{\partial k_1} &= 0. \end{aligned}$$

Движение по кривой параметрических зависимостей $y_1(k_1), y_2(k_1)$ в пространстве (y_1, y_2, k_1) осуществляется в соответствии с интегрированием системы двух дифференциальных уравнений вида (4), (6) или (7). В данном случае система (12) является существенно нелинейной в том смысле, что из-за наличия экспонент (10) она не сводится к одному уравнению. В отличие от (12) система (9), рассмотренная выше, в результате простых преобразований может быть сведена к одному уравнению. Однако для (8) условия стационарности мы оставили в виде системы (9), для того чтобы использовать результаты параметрического анализа [12], тестирования предлагаемой модификации метода продолжения по параметру.

Результаты расчетов для системы (12), (13) представлены на рис. 2. Здесь приведены зависимости стационарных состояний от параметра k_1 : $y_i(k_1), i = 1, 2, 3$. Существует целый интервал значений k_1 , для которых система (12) имеет три решения, что отвечает

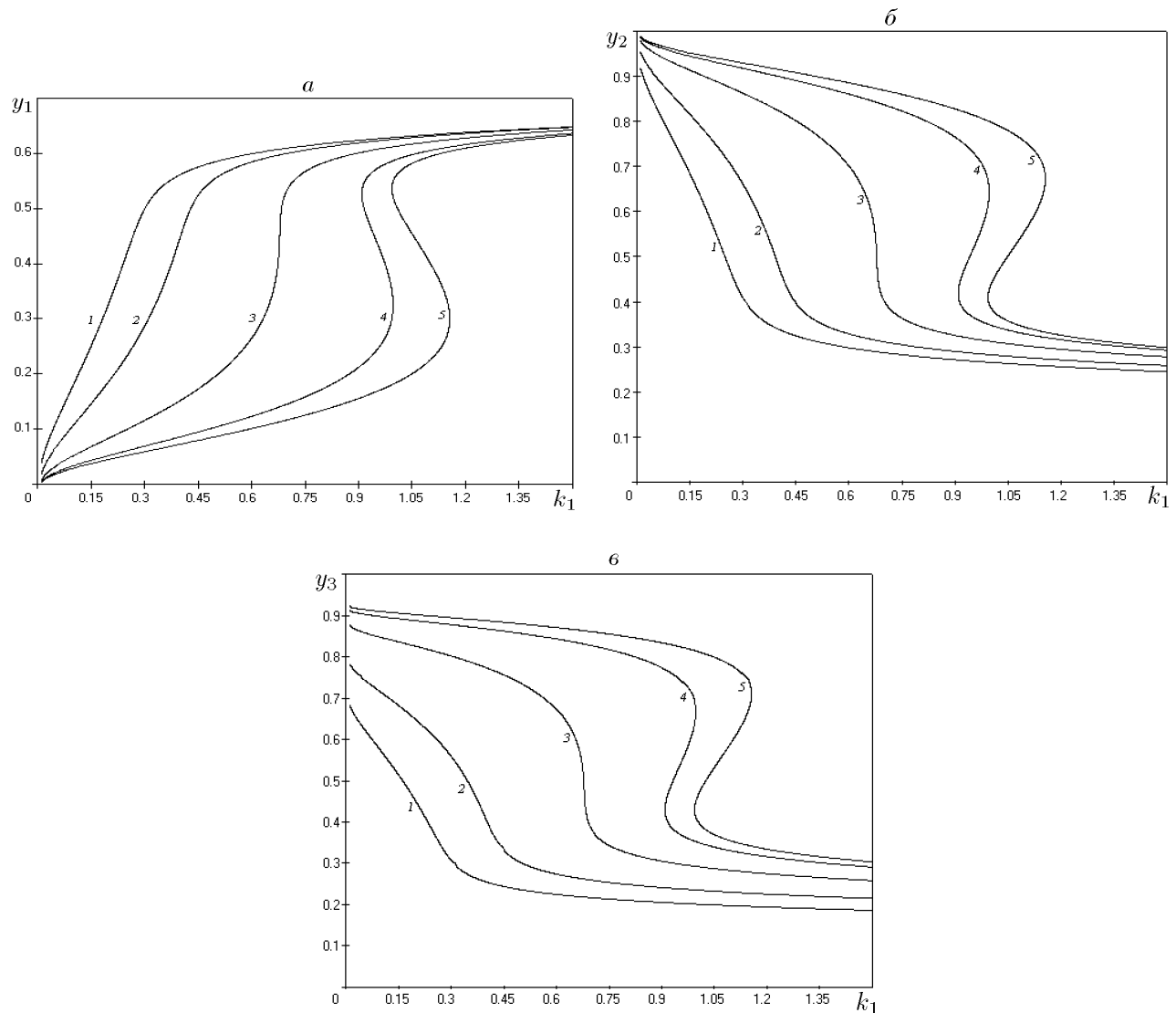


Рис. 2. Параметрические зависимости стационарных состояний системы (9) при $k_{-1} = 0.01$, $k_2 = 15$, $k_3^0 = 100$, $k_4^0 = 2$, $\mu_3 = 30$, $\mu_4 = 12$, $\varepsilon = 0.001$, $\alpha = 10$: а — $y_1(k_1)$, б — $y_2(k_1)$, в — $y_3(k_1)$; $\mu_5 = -10, -8, -6, -5, -4.7$ — кривые 1 — 5 соответственно.

множественности стационарных состояний в динамической модели (9). Как и в предыдущем примере, варьирование второго параметра (на рис. 2 это μ_5) позволяет численно построить область множественности стационарных состояний в плоскости (k_1, μ_5) . Система (9) интересна тем, что имеет сложные динамические режимы типа “хаоса”, которые чаще всего возникают при единственном и неустойчивом стационарном состоянии и локальной неустойчивости самих фазовых траекторий [13, 14]. Параметрические зависимости, характеризующиеся единственным и в определенном интервале изменений параметра неустойчивым стационарным состоянием, приведены на рис. 3. Колебания здесь отвечают неустойчивости стационарного состояния и существованию незатухающих во времени решений $y_i(t)$, $i = 1, 2, 3$, системы (9). Параметрические зависимости на рис. 2 получены с использованием предлагаемого варианта реализации метода продолжения по параметру для системы двух нелинейных уравнений.

Таким образом, для системы двух нелинейных уравнений с параметрами общая схема

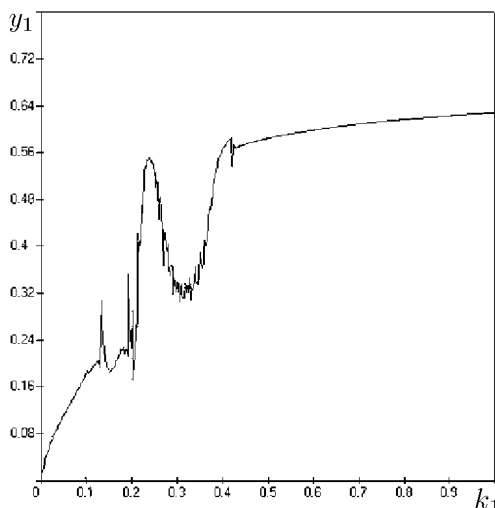


Рис. 3. Параметрическая зависимость $y_1(k_1)$ для стационарных состояний системы (9) при $k_{-1} = 0.01$, $k_2 = 15$, $k_3^0 = 100$, $k_4^0 = 2$, $\mu_3 = 30$, $\mu_4 = 12$, $\varepsilon = 0.001$, $\alpha = 10$, $\mu_5 = -10$.

реализации метода продолжения по параметру может быть существенно упрощена. Движение по кривой параметрических зависимостей решений системы осуществляется путем интегрирования системы двух дифференциальных уравнений типа (4), (6) или (7) по одному из трех текущих переменных. Переход от одной переменной к другой делается по условию сравнения величин Δ , Δ_1 , Δ_2 . Для систем более трех уравнений описанный подход также может быть реализован, однако он становится достаточно громоздким. При этом возникает проблема аналитического вычисления n^2 элементов матрицы Якоби системы плюс n производных по параметру. Численная процедура дифференцирования в общем случае вряд ли может быть рекомендована, так как в окрестности точек бифуркаций решений системы их чувствительность к вариациям параметров резко возрастает. Все это говорит о том, что при параметрическом анализе систем нелинейных уравнений необходима ее “предобработка”. Например, за счет исключения некоторых переменных желательно по возможности максимально понизить ее порядок. Если удастся исходную систему свести к одному или хотя бы к двум уравнениям, то для ее параметрического анализа можно применить описанную выше схему метода продолжения по параметру.

Список литературы

- [1] Быков В. И., Цыбенова С. Б. Модификация метода продолжения по параметру для одного уравнения // Вычисл. технологии. 2001. Т. 6, №4. С. 9–15.
- [2] Быков В. И. Моделирование критических явлений в химической кинетике. М.: Наука, 1988. 264 с.
- [3] Холодниок М., Клич А., Кубичек М., Марек М. Методы анализа нелинейных динамических моделей. М.: Мир, 1991. 365 с.
- [4] Когай В. В., Фадеев С. И. Применение продолжения по параметру на основе метода множественной стрельбы для численного исследования нелинейных краевых задач // СибЖИМ. 2001. Т. 4, №1. С. 83–101.

- [5] БАЛАБАЕВ Н. К., ЛУНЕВСКАЯ Л. В. Движение по кривой в n -мерном пространстве // Алгоритмы и программы на Фортране: Материалы по мат. обеспечению ЭВМ. Вып. 1. Пущино: ОНТИ НИВЦ АН СССР. 1978. 52 с.
- [6] ФАДЕЕВ С. И. ДР. Пакет программ “СТЕР” для численного исследования систем нелинейных уравнений и автономных систем общего вида. Описание работы пакета “СТЕР” на примерах из учебного курса “Инженерная химия каталитических процессов”: Учеб. пособие. Новосибирск: НГУ, 1998. 189 с.
- [7] РОМАНОВ А. Н. Программно-математическое обеспечение параметрического анализа математических моделей неизотермического проточного реактора идеального смешения: Автореф. дис... канд. техн. наук. Красноярск: КГТУ. 2001. 20 с.
- [8] НОВИКОВ Е. А. Явные методы для жестких систем. Новосибирск: Наука, 1997. 195 с.
- [9] БЫКОВ В. И., ЦЫБЕНОВА С. Б., СЛИНЬКО М. Г. Бифуркации Андронова — Хопфа в модели Ариса — Амундсона // Докл. РАН. 2001. Т. 378, №2. С. 214–217.
- [10] БЫКОВ В. И., ЦЫБЕНОВА С. Б., СЛИНЬКО М. Г. “Опасные” и “безопасные” границы критических явлений в кинетике экзотермических реакций // Докл. РАН. 2001. Т. 378, №3. С. 355–358.
- [11] ВОЛЬТЕР Б. В., САЛЬНИКОВ И. Е. Устойчивость режимов работы химических реакторов. М.: Химия, 1981. 200 с.
- [12] ЦЫБЕНОВА С. Б. Параметрический анализ математической модели Вольтера — Сальникова // Вестник КГТУ. Вып. 23: Математические методы и моделирование / Под ред. В. И. Быкова. Красноярск: ИПЦ КГТУ, 2001. С. 122–130.
- [13] ЧУМАКОВ Г. А., СЛИНЬКО М. Г., БЕЛЯЕВ В. Д. Сложные изменения скорости гетерогенных каталитических реакций // Докл. АН СССР. 1980. Т. 253, №3. С. 653–658.
- [14] ЧУМАКОВ Г. А., СЛИНЬКО М. Г. Кинетическая турбулентность (хаос) скорости реакции взаимодействия водорода с кислородом на металлических катализаторах // Докл. АН СССР. 1982. Т. 266, №5. С. 1194–1198.

Поступила в редакцию 27 марта 2002 г.