



ПРОГНОЗ НЕЛИНЕЙНОЙ ДИНАМИКИ В КИНЕТИЧЕСКОЙ ОБЛАСТИ НА ОСНОВЕ МЕТОДОВ ИНТЕРВАЛЬНОГО АНАЛИЗА

В.И. Быков, Б.С. Добронец

Впервые методы интервального анализа динамических систем предлагается использовать с целью прогноза динамики нелинейных процессов в кинетической области. Для уравнений химической кинетики поставлена задача интервального анализа их решений при вариациях кинетических параметров и начальных данных. Выделены классы механизмов химических реакций, для которых могут быть получены точные двусторонние оценки решений. Приведена серия нелинейных примеров, которые характеризуются множественностью стационарных состояний и автоколебаниями и для которых выделены особенности прогноза динамики реакций в кинетической области на больших интервалах времени.

Введение

Успехи нелинейной динамики позволяют по-новому подойти к проблеме прогноза поведения сложных систем, предсказания катастроф, оценки рисков аварий технических объектов [1-3]. Оказывается, что для систем, поведение которых адекватно описывается детерминированными моделями, существуют режимы, имеющие весьма ограниченные временные рамки точного прогноза. Локальная неустойчивость их фазовых траекторий при значениях параметров, близких к бифуркационным, делает проблему прогноза поведения нелинейной динамической системы путем ее интегрирования «в лоб» на больших интервалах времени неразрешимой. Аналогичные задачи возникают при моделировании сложных нелинейных реакций в кинетической области [4-8]. Варьирование параметров модели и ее начальных данных приводит к неопределенности поведения системы во времени. Умение дать по возможности точные оценки динамики процесса является важной научной и прикладной проблемой. Один из способов ее решения дают методы, развиваемые в рамках интервального анализа [9-15].

В данной работе впервые методы интервального анализа динамических систем предлагается использовать с целью прогноза динамики нелинейных процессов в кинетической области. Для уравнений химической кинетики поставлена задача интервального анализа их решений при вариациях кинетических параметров и начальных данных. Выделены классы механизмов химических реакций, для которых могут быть получены точные двусторонние оценки решений. Приведена серия нелинейных примеров, которые характеризуются множественностью стационарных состояний и автоколебаниями и для которых выделены

особенности прогноза динамики реакций в кинетической области на больших интервалах времени.

Уравнения химической кинетики в общем виде можно записать как систему обыкновенных дифференциальных уравнений с параметрами

$$dx/dt = f(x, k, t), \quad x(0) = x^0, \quad t \in [0, t_k], \quad (1)$$

где x, x^0 - векторы текущих и начальных концентраций реагентов; f - вектор-функция кинетических зависимостей, которые строятся в соответствии с принятым механизмом химических превращений; k - вектор параметров, в качестве которых могут выступать, например, константы скоростей элементарных реакций; t, t_k - текущее и конечное время. Правые части системы (1) могут явно зависеть от времени, что отражает возможность управления процессом, например, за счет варьирования во времени температуры $T(t)$, так как некоторые k_i зависят от T :

$$k_i = k_i^0 \exp(-E_i/(RT)), \quad (2)$$

где k_i^0 - предэкспонента, E_i - энергия активации, R - универсальная газовая постоянная. В (1) предполагается возможность варьирования и других свободных параметров. Для (1) естественным образом возникает задача построения двусторонних оценок решения $x(t)$ при варьировании k и x^0 в некоторых заданных интервалах. Интервальными могут быть и сами функции правых частей f , что может отражать изменчивость структуры самой кинетической модели. Особенности уравнений химической кинетики являются их нелинейность и «жесткость», что предъявляет повышенные требования к алгоритмам численного интегрирования таких систем и затрудняет применение стандартных методов анализа чувствительности.

Схема двустороннего метода

Кратко опишем схему двустороннего метода анализа задачи (1) в интервальной постановке.

Первоначально интервальный анализ возник как средство автоматического контроля над ошибками округления, далее он развился в систему методов, учитывающих все ошибки, включая и ошибки численных методов. Применительно к задачам Коши для систем нелинейных дифференциальных уравнений в рамках двусторонних и интервальных методов используются несколько подходов, включая теоремы сравнения, дифференциальные неравенства и теорию операторов монотонного типа.

В данной работе мы будем опираться на достаточно простую оценку [16], которую можно отнести к области дифференциальных неравенств.

Рассмотрим две линейные системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$dx/dt = A(t)x + f(t), \quad x(0) = x^0, \quad t \in [0, t_k],$$

$$dz/dt = B(t)z + g(t), \quad z(0) = z^0, \quad t \in [0, t_k],$$

где $A=(a_{ij}(t)), B=(b_{ij}(t))$ - матрицы; $f(t), g(t)$ - вектор-функции. Причем выполнены следующие соотношения:

$$b_{ij}(t) \geq |a_{ij}(t)|, \quad i \neq j, \quad b_{ii}(t) \geq a_{ii}(t),$$

$$g(t) \geq |f(t)|, \quad z^0 \geq x^0.$$

Тогда справедлива мажоранта

$$z(t) \geq |x(t)|. \quad (3)$$

Таким образом, пусть нам известно некоторое приближенное решение s задачи (1). Запишем тождество

$$ds/dt = f(s, k, t) - \phi(s, t), \quad s(0) = x^0, \quad t \in [0, t_k],$$

где $\phi(s, t) = f(s, k, t) - s'$. Вычитая последнее тождество из уравнения (1), получаем уравнения для разности $\varepsilon = x - s$:

$$d\varepsilon/dt = F\varepsilon + \phi,$$

где $F = (F_{ij})$, $F_{ij} = \partial f_i(\xi, k, t) / \partial x_j$, ξ - функции из интервалов с концами x , s . Применим мажоранту (3) для оценки уклонения ε приближенного решения s от точного x . Следовательно, если известна оценка $z \geq |\varepsilon|$, то

$$s - z \leq x \leq s + z.$$

Для нахождения z мы будем использовать методы интервального анализа. Под *интервальным числом* a будем понимать вещественный отрезок $[a, \bar{a}]$, где $a \leq \bar{a}$. Множество интервальных чисел будем обозначать через R , $f(x): R \rightarrow R$ - интервальные функции. При $a = \bar{a} = a$ интервальное число будем отождествлять с вещественным числом a , следовательно $R \subset R$. В дальнейшем будем называть интервальные числа просто интервалами. *Шириной* a называется величина

$$\text{wid}(a) = \bar{a} - a,$$

серединой будем называть полусумму

$$\text{med}(a) = (a + \bar{a})/2.$$

Арифметические операции над интервальными числами введем следующим образом. Пусть $a, b \in R$, тогда положим

$$a * b = \{x * y \mid x \in a, y \in b\},$$

где знак $(*)$ означает одну из операций $+$, $-$, \cdot , $/$. При делении интервал $b = [b, \bar{b}]$ не должен содержать ноль. Если $f(x)$ - непрерывная функция, то

$$f(x) = [\min_{x \in x} f(x), \max_{x \in x} f(x)]$$

определяет соответствующую ей интервальную функцию.

Пусть f_i являются представителями некоторых интервальных функций $f_i(x, k, t) \in f_i(x, k, t)$, так же как и начальные условия $x^0 \in x^0$ и параметры $k_i \in k_i$, где $x^0 = [x^0, \bar{x}^0]$, $k_i = [k_i, \bar{k}_i]$ - интервальные числа, f_i - интервальные функции [15]. Для построения двустороннего решения $x_i(t)$ сначала приближенно решим задачу (1) для конкретных представителей f , x^0 , k , то есть на разностной сетке ω_h с шагом h получим решение $x^h(t)$, $t \in \omega_h$. Проведем через точки x^h_i сплайны s_i . Далее рассмотрим две вспомогательные задачи [15]:

$$du/dt = Wu + w, \quad u(0) = 0, \quad (4)$$

и

$$dv/dt = Wv, \quad v(0) = z, \quad (5)$$

где векторы w и z имеют компоненты $w_i = 1$, $z_i = (x^0_i, \bar{x}^0_i)/2$; матрица W состоит из элементов

$$W_{ii} = \partial f_i(s, k, t) / \partial x_i, \quad i = 1, \dots, n,$$

$$W_{ij} = |\partial f_i(s, k, t) / \partial x_j|, \quad i \neq j, \quad i, j = 1, \dots, n,$$

$$s = (s_1, \dots, s_n).$$

Решим задачи (4), (5) на той же разностной сетке ω_h , затем аппроксимируем полученные решения u_i^h, v_i^h сплайнами $s_i^{(1)}, s_i^{(2)}$. Искомое двустороннее решение может быть представлено в виде

$$x_i = s_i + [-1, 1]s_i^{(2)} + \alpha s_i^{(1)}, \quad (6)$$

где $\alpha = [-\alpha, \alpha]$ - некоторая интервальная константа, ее величина может быть выбрана такой, чтобы обеспечить необходимые точные оценки точного решения (1). Двустороннее решение (6) можно уточнять, организовав специальным образом итерационный процесс уменьшения α . С уменьшением α двустороннее решение (6) будет иметь меньшую ширину. Описанная общая схема построения искомой трубки решений x_i достаточно трудоемка, однако в ряде случаев использование специфики задачи позволяет ее существенно упростить.

Рассмотрим частный случай модели (1):

$$dx/dt = W(t)x + \phi(t), \quad x(0) = x^0, \quad (7)$$

где матрица $W(t) = \{W_{ij}\}$, $i, j = 1, \dots, n$, вектор $\phi(t) = (\phi_1(t), \dots, \phi_n(t))$, причем известно, что

$$W_{ij} \in [\underline{W}_{ij}, \bar{W}_{ij}] \quad \text{и} \quad \underline{W}_{ij} \geq 0 \quad \text{при} \quad i \neq j, \quad i, j = 1, \dots, n, \quad (8)$$

$$\phi_i \in [\underline{\phi}_i, \bar{\phi}_i], \quad x_i^0 \in [\underline{x}_i^0, \bar{x}_i^0], \quad i = 1, \dots, n.$$

Для задачи (7), (8) границы двустороннего решения $x \in [\underline{x}(t), \bar{x}(t)]$ можно представить как решения следующих двух задач:

$$d\underline{x}/dt = \underline{W}(t)\underline{x} + \underline{\phi}(t), \quad \underline{x}(0) = \underline{x}^0, \quad (9)$$

$$d\bar{x}/dt = \bar{W}(t)\bar{x} + \bar{\phi}(t), \quad \bar{x}(0) = \bar{x}^0. \quad (10)$$

Этот прием построения двусторонних решений можно распространить и на системы нелинейных уравнений, якобиан которых удовлетворяет условию (8) [17]. Он позволяет оценивать границы двустороннего решения путем численного интегрирования двух задач (9), (10), которые по сложности сравнимы с (7).

Кинетические модели

Важным классом линейных кинетических моделей являются уравнения кинетики для сложных мономолекулярных реакций [5,6]

$$dx/dt = Kx, \quad x(0) = x^0, \quad (11)$$

где матрица K составлена из констант скоростей стадий k_{ij} и обладает тем свойством, что ее внедиагональные элементы неотрицательны [5]. В соответствии с (8) это позволяет достаточно просто построить двустороннее решение для задачи (11). Для этого (11) нужно дважды проинтегрировать с матрицами \underline{K}, \bar{K} , отвечающими нижним и верхним значениям интервалов $k_{ij} \in [k_{ij}, \bar{k}_{ij}]$. Тогда $x_i(t) \in [\underline{x}_i(t), \bar{x}_i(t)]$.

Среди нелинейных схем превращений, для которых выполняется условие (8), таким свойством обладают механизмы без взаимодействия различных веществ [5]. Якобиан соответствующей кинетической модели (1) характеризуется неравенствами (8). Таким образом, отсутствие критических явлений в кинетической области для этих систем существенно упрощает и процедуру их интервального анализа.

Приведем несколько типичных примеров построения двусторонних оценок для линейных и нелинейных кинетических моделей.

Рассмотрим нестационарную кинетическую модель

$$\begin{aligned} dx_1/dt &= -k_1(T)x_1, \\ dx_2/dt &= k_1(T)x_1 - k_2x_2 \end{aligned} \quad (12)$$

с начальными условиями $x_1(0)=0.95$, $x_2(0)=0.05$ для последовательной схемы превращений $A \rightarrow B \rightarrow C$. Константы скоростей k_i от температуры T зависят аррениусовским образом [2]. Пусть $T=T(t)$ и известно, что

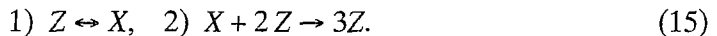
$$T_* \leq T(t) \leq T^*, \quad (13)$$

T_* , T^* - некоторые константы. Тогда, используя описанную выше технику интервального анализа, можно получить двустороннее решение x , содержащее все решения задачи (12) при варьировании температуры, удовлетворяющей неравенствам (13). На рис. 1 приведено поведение $x_2(t)$ при различных T и полученное двустороннее решение $x_2(t)$. Обратим внимание на то, что трубка решений $x_2(t)$ имеет существенно меняющуюся по t ширину. Наибольшую неопределенность прогноз динамики системы имеет в некоторой переходной области. В начале идет быстрое расширение двусторонней оценки, а при больших t идет ее сужение до нуля.

В качестве нелинейного примера приведем кинетическую модель [5]

$$dz/dt = -k_1z + k_{-1}(1-z) + k_2(1-z)z^2, \quad z(0) = z_0, \quad (14)$$

отвечающую автокаталитической схеме превращений



Модель (14) является простейшей, допускающей три стационарных состояния z_1 , z_2 , z_3 (например, при наборе параметров: $k_1=1/6$, $k_2=1$, $k_{-1}=10^{-3}$). Задача (14) решалась при различных интервальных начальных данных. Поведение двусторонних решений показано на рис. 2. Расчеты показывают, что интервальное решение имеет тенденцию к расширению, если интервал начальных значений содержит неустойчивое стационарное состояние z_2 . При этом интервальное расширение ограничивается устойчивыми стационарными состояниями z_1 , z_3 . Если же интервальные начальные данные не содержат z_2 , то двустороннее решение сужается и со временем стремится к одному из устойчивых стационарных состояний. Таким образом, локальная неустойчивость системы приводит к неопределенности прогноза ее динамики, если начальные данные варьируются в окрестности неустойчивого стационарного состояния. Прогноз точен, если он делается вне области неустойчивости системы.

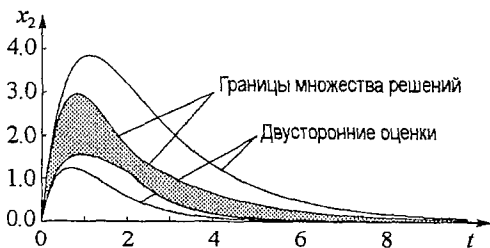


Рис. 1. Двустороннее решение модели (12), $k_1=[0.5,1]$, $k_2=[1.5,2]$

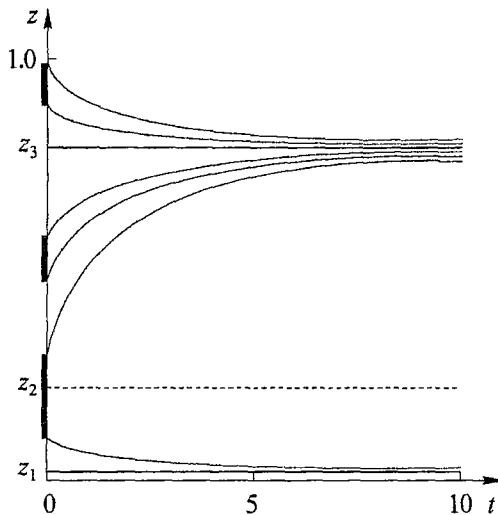


Рис. 2. Двусторонние решения модели (14) при различных начальных интервальных данных

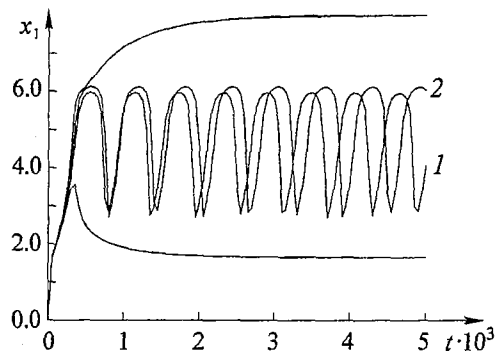


Рис. 3. Двустороннее решение модели (16); 1, 2 - частные решения

Наконец, рассмотрим кинетическую модель, которая является осциллятором [5],

$$\begin{aligned} dx/dt &= k_1(1-x-y) - k_{-1}x - k_2x(1-x-y)^2, \\ dy/dt &= k_3(1-x-y) - k_{-3}y, \end{aligned} \quad (16)$$

и отвечает схеме (15), дополненной буферной стадией 3) $Z \leftrightarrow Y$. При значениях параметров $k_1=0.12$, $k_{-1}=0.01$, $k_2=1$, $k_3=0.0032$, $k_{-3}=0.002$ система (16) имеет автоколебания. На рис. 3 приведены результаты построения двустороннего решения при варьировании k_1 . Расчеты показывают, что трубка решений сначала расширяется, охватывая с двух сторон незатухающие колебания, а затем достаточно близко к ним приближается.

Заключение

Таким образом, методы интервального анализа позволяют адекватно решать проблему прогноза динамики сложных нелинейных систем. Интервальная техника для динамических систем в настоящее время активно развивается, она может быть использована и для решения задач чувствительности, построения областей достижимости в задачах оптимального управления, апостериорных двусторонних оценок жестких систем, интервального анализа систем с распределенными параметрами. Наш опыт интервального анализа уравнений химической кинетики показывает, что достаточно точные оценки динамики системы и на этой основе прогноз ее поведения на больших временах вполне реалистичен. Понимание нелинейных и нестационарных особенностей детерминированных моделей в сочетании с методами интервального анализа являются залогом успешного прогноза поведения их решений.

Библиографический список

1. Капица С.П., Курдюмов С.П., Малинецкий Г.Г. Синергетика и прогнозы будущего. 2-е изд. М.: Эдиториал УРСС, 2001. 288 с.

2. *Малинецкий Г.Г., Курдюмов С.П.* // Вестник Российской Академии наук. 2001. Т. 71, № 3. С. 210.
3. *Малинецкий Г.Г., Подлазов А.В.* // Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика. 1997. Т. 56, № 5. С. 32.
4. *Слинько М.Г.* Пленарные лекции конференций по химическим реакторам: «Химреактор-1» - «Химреактор-13». Новосибирск: ИК СО РАН, 1996. 180 с.
5. *Быков В.И.* Моделирование критических явлений в химической кинетике. М.: Наука, 1988. 264 с.
6. *Yablonskii G.S., Bykov V.I., Gorban A.N., Elokhin V.I.* Kinetic models of catalytic reactions. Amsterdam: Elsevier, 1991. 400 p.
7. *Горбань А.Н.* Обход равновесия. Уравнения химической кинетики и их термодинамический анализ. Новосибирск: Наука, 1984. 226 с.
8. *Горбань А.Н., Каганович Б.М., Филиппов С.П.* Термодинамические равновесия и экстремумы. Анализ областей достижимости и частичных равновесий в физико-химических и технических системах. Новосибирск: Наука, 2001. 296 с.
9. *Калмыков С.А., Шокин Ю.И., Юлдашев З.Х.* Методы интервального анализа. Новосибирск: Наука, 1986. 224 с.
10. *Черноустько Ф.Л.* Оценивание фазового состояния динамических систем. Метод эллипсоидов. М.: Наука, 1988. 320 с.
11. *Быков В.И., Добронетц Б.С.* // Численные методы механики сплошной среды. 1985. Т. 16, № 4. С.13.
12. *Быков В.И., Добронетц Б.С.* // Математические проблемы химической кинетики / Под. ред. К.И. Замараева, Г.С. Яблонского. Новосибирск: Наука, 1989. С.226.
13. *Добронетц Б.С.* // Математические методы в химической кинетике / Под. ред. В.И. Быкова. Новосибирск: Наука, 1990. С. 68.
14. *Добронетц Б.С.* Численное моделирование задач с неопределенностями в данных: Автореф. дис. ... д-ра физ-мат. наук. Красноярск: КГТУ, 1998. 36 с.
15. *Добронетц Б.С., Шайдуров В.В.* Двусторонние численные методы. Новосибирск: Наука, 1990. 208 с.
16. *Лозинский С.М.* // Докл. АН СССР. 1953. Т. 92, № 2. С. 225.
17. *Dobronets B.S.* On some two-sided methods for solving systems of ordinary differential equations // Interval Computations. 1992. № 1(3). P. 6.

*Вычислительный центр
Сибирского отделения РАН,
Красноярск*

*Поступила в редакцию 29.05.2003
после доработки 08.04.2004*

THE FORECAST OF NONLINEAR DYNAMICS IN KINETIC REGION BY INTERVAL ANALYSIS METHODS

V.I. Bykov, B.S. Dobronets

For the first time methods of the interval analysis of dynamic systems are offered to use with the purpose of forecast of dynamics of nonlinear processes in kinetic region. For the equations of chemical kinetic the problem of the interval analysis of their decisions at variations kinetic parameters and initial data is formulated. The classes of chemical reactions mechanisms are determined, for which the exact bilateral estimations of decisions can be received. A series of nonlinear examples with the multiplicity steady-

states and oscillations is given. The features of the forecast of the reactions dynamic in kinetic region are determined on the large intervals of time.



Быков Валерий Иванович - родился в Срегенске Читинской обл. (1945). Окончил Новосибирский государственный университет (1967). После окончания НГУ до 1977 года работал в Институте катализа СО РАН, где защитил кандидатскую диссертацию по методам оптимизации каталитических процессов (1973). С 1977 года работает в ВЦ СО РАН в Красноярске. В 1985 году в Институте химической физики РАН (Черноголовка, Московской обл.) защитил диссертацию на звание доктора физико-математических наук по моделированию критических явлений в кинетической области. С 1995 года зав. кафедрой моделирования и оптимизации систем КГТУ. Автор 9 монографий, 3 учебных пособий и более 200 статей в области математического моделирования физико-химических процессов. Член редакционного совета журнала «Физика горения и взрыва», редактор серии сборников научных работ по математическим проблемам химической кинетики и горения. Соросовский профессор (1997, 2000, 2001). Действительный член Международной академии наук высшей школы.
E-mail: bykov@fivt.krasn.ru



Добронец Борис Станиславович - родился в г. Шахты, Ростовской обл. (1954). Окончил Новосибирский государственный университет (1976). После окончания НГУ работает в ВЦ СО РАН Красноярска. Защитил диссертацию на звание кандидата физико-математических наук в ВЦ СО РАН (Новосибирск, 1985) и доктора физико-математических наук (1998) в области математического моделирования процессов с интервальными неопределенностями в данных. Соавтор монографии «Двусторонние численные методы». Опубликовал более 80 работ в области вычислительной математики. Член редакционной коллегии международного журнала «Reliable Computing».
E-mail: dobronec@fivt.krasn.ru