



НОВЫЙ ПОДХОД К ОЦЕНКЕ КОЭФФИЦИЕНТА ПЕРЕНОСА

Г.Г. Малинецкий, А.Б. Потапов, И.В. Фельдштейн

В работе рассмотрен возможный подход к оценке коэффициента диффузии в среде по временным рядам наблюдений в нескольких точках. Подход основан на анализе зависимости наибольшего собственного значения матрицы ковариации от коэффициента диффузии. Показано, что такая зависимость для широкого круга систем имеет монотонный характер и может рассматриваться как характеристика среды. Рассмотрен вопрос о том, при каких условиях на границе монотонность имеет место.

Введение

Одной из важнейших задач современной математической физики является анализ обратных задач [1]. По своей постановке они могут быть условно разделены на несколько типов. Например, оценка начальных условий по значениям переменной в некоторый момент времени, определение пространственного распределения некоторой величины по интегральным характеристикам и некоторые другие. Среди них особое место занимают задачи структурной и параметрической идентификации исследуемых систем. Это включает в себя получение уравнений (обычно в частных производных), описывающих наблюдаемое динамическое поведение системы, и параметров, входящих в эти уравнения. Важность такой постановки задачи заключается в том, что развитие эффективных методов ее решения позволит кардинально изменить подходы к моделированию пространственно-распределенных систем.

Широкий круг процессов в физике, химии, медицине, климатологии описывается следующей краевой задачей:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \Lambda \mathbf{u} + \mathbf{f}(\mathbf{u}, t), \quad \mathbf{u} = \mathbf{u}(\xi, t),$$

$$\xi \in \Omega, \quad \text{где } \Omega - \text{область в } R^n,$$

$$\mathbf{u}|_{t=0} = \mathbf{u}_0(\xi), \quad \mathbf{u}|_{\xi \in \partial\Omega} = 0,$$

где Λ - оператор, содержащий пространственные производные переменной \mathbf{u} .

Таким образом, задача сводится к определению вида функции \mathbf{f} и оператора Λ , а также входящих в них параметров, исходя из знания поведения системы, например, в форме временных рядов наблюдений величины \mathbf{u} в нескольких точках области Ω .

Отметим, что для решения задачи определения правых частей системы

обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\dot{\mathbf{u}} = \mathbf{f}(\mathbf{u}), \quad \mathbf{u} = \mathbf{u}(t), \quad \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_0$$

разработаны методики, изложенные, например, в [2,3].

Рассмотрим случай, когда динамика элемента среды определяется одно- или двумерным отображением, или системой обыкновенных дифференциальных уравнений, а оператор Λ - диффузионного типа, то есть

$$\Lambda = D \partial^2 / \partial \xi^2.$$

Тогда процессы в изучаемой среде определяются следующими уравнениями:

$$\mathbf{x}^{j+1} = \mathbf{f}(\mathbf{x}^j) + D \partial^2 \mathbf{x}^j / \partial \xi^2, \quad (1a)$$

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) + D \partial^2 \mathbf{x} / \partial \xi^2. \quad (1б)$$

Здесь $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\xi, t)$, верхний индекс j - момент времени для отображений, $0 \leq \xi \leq 1$. В качестве граничных условий выбрано условие $\mathbf{x} = 0$ на границе, то есть $\mathbf{x}(0, t) = \mathbf{x}(1, t) = 0$. Поставим задачу определения матрицы диффузии D по рядам наблюдений в нескольких точках.

Задача оценки некоторого параметра (в данном случае - коэффициента диффузии) может считаться решенной, если будет найдена величина, которая в широком диапазоне изменения параметра монотонно зависит от него. Величина, обладающая такими свойствами, может рассматриваться и как самостоятельная характеристика среды. Например, ее значение для разных сред с одинаковым поведением элементов может использоваться для сравнения сил связей в этих средах. Подобная постановка задачи имеет смысл для широкого круга задач диагностики состояния систем в физике, медицине, климатологии и т.д.

Традиционный подход к построению феноменологических моделей по результатам наблюдений связан с процедурой реконструкции аттрактора в соответствии с методом Такенса или модификациями этого алгоритма. Однако, для задач гидродинамики и ряда других систем использование этого метода, позволяющего восстановить некоторую динамическую систему, сталкивается с принципиальными трудностями. Кроме того, этот подход не позволяет ничего сказать об уравнениях в частных производных или цепочках связанных отображений, описывающих изучаемую пространственно-распределенную систему. Восстановление таких уравнений или цепочек требует других подходов, один из которых и рассматривается в настоящей работе.

Метод и модельные системы

Для решения поставленной задачи представляется разумным (по крайней мере в качестве отправной точки) проанализировать зависимость корреляций между точками среды от параметра типа коэффициента диффузии. Будем использовать временные ряды наблюдений первой компоненты вектора \mathbf{x} в нескольких точках отрезка $0 \leq \xi \leq 1$: $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$, то есть $x_1(\xi_1), x_1(\xi_2), \dots, x_1(\xi_n)$ (в дальнейшем индекс 1 у первой компоненты вектора \mathbf{x} опускается). Рассмотрим наибольшее собственное значение матрицы ковариации

$$C = (1/N) M^T M,$$

где M - матрица наблюдений

$$M = \begin{bmatrix} u_1^0 & u_2^0 & \dots & u_n^0 \\ u_1^1 & u_2^1 & \dots & u_n^1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ u_1^{N-1} & u_2^{N-1} & \dots & u_n^{N-1} \end{bmatrix}, \quad (2)$$

где N - число наблюдений, u_i^j - отклонение от среднего i -го элемента среды для j -го наблюдения [4]

$$u_i^j = x_i^j - 1/N \sum_{k=0}^{N-1} x_i^k.$$

Выбор максимального собственного значения матрицы C в качестве объекта анализа объясняется следующими соображениями. При отсутствии связей (случай $D=0$) в фазовом пространстве системы не существует выделенного направления - проекции на все направления равнозначны. С ростом диффузии элементы среды начинают участвовать в общем движении. Это приводит к тому, что появляется направление, проекции фазовых векторов на которое максимальны. Решение задачи об определении максимума суммы квадратов проекций множества векторов сводится к задаче о наибольшем собственном значении матрицы, построенной аналогично матрице C , причем величина этого максимума равна λ_1 . В работе подобный анализ проведен для следующих отображений:

$$x^{j+1} = c - (x^j)^2, \quad (3a)$$

$$x^{j+1} = 1 - c|x^j|, \quad (3б)$$

$$x^{j+1} = 1 - |x^j - c|^{1/2} / [1 + (x^j - c)^2], \quad (3в)$$

$$\begin{cases} x^{j+1} = (2x^j + y^j) \bmod 2\pi, \\ y^{j+1} = (x^j + y^j) \bmod 2\pi, \end{cases} \quad (3г)$$

$$\begin{cases} x^{j+1} = 1 + y^j - c(x^j)^2, \\ y^{j+1} = bx^j \end{cases} \quad (3д)$$

и системы Лоренца

$$\begin{cases} \dot{x} = -\sigma x + \sigma y, \\ \dot{y} = -xz + rz - y, \\ \dot{z} = xy - bz. \end{cases} \quad (3e)$$

При численной реализации на отрезке $0 \leq \xi \leq 1$ строилась сетка $\{\xi_i\}$ с равномерным расположением узлов ($\xi_i = ih$, где $h=1/n$, $i=0 \dots n$) и использовалась разностная аппроксимация оператора диффузии

$$\partial^2 x(\xi_i) / \partial \xi^2 \approx [x(\xi_{i-1}) - 2x(\xi_i) + x(\xi_{i+1})] / h^2.$$

Таким образом, исходные уравнения (1) принимали вид

$$\dot{x}_i^{j+1} = f(x_i^j) + Dn^2 (x_{i-1}^{j+1} - 2x_i^{j+1} + x_{i+1}^{j+1}), \quad (4a)$$

$$\dot{x}_i = f(x_i) + Dn^2 (x_{i-1} - 2x_i + x_{i+1}). \quad (4б)$$

Здесь нижний индекс i - номер элемента среды, $i=1 \dots n$; верхний индекс j - момент времени для отображений. Предполагается, что отображения связаны только по первой компоненте вектора x , то есть в матрице D отличен от нуля только элемент D_{11} . В качестве граничных условий выбрано условие $x=0$ на границе, то есть для 1-го и n -го элемента соотношения (4) имеют вид

$$x_1^{j+1} = f(x_1^j) + Dn^2 (-2x_1^{j+1} + x_2^{j+1}),$$

$$\mathbf{x}_{it}^{j+1} = \mathbf{f}(\mathbf{x}_{it}^j) + Dn^2 (\mathbf{x}_{i-1}^{j+1} - 2\mathbf{x}_{it}^{j+1}),$$

$$\dot{\mathbf{x}}_1 = \mathbf{f}(\mathbf{x}_1) + Dn^2 (-2\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2),$$

$$\dot{\mathbf{x}}_n = \mathbf{f}(\mathbf{x}_n) + Dn^2 (\mathbf{x}_{n-1} - 2\mathbf{x}_n).$$

Начальные условия полагаются несущественными, так как все переходные процессы считаются завершенными. В дальнейшем D_{11} будем обозначать D .

Некоторые результаты

Рассмотрим вначале вопрос о зависимости величины λ_1 от масштаба разбиения, то есть величины n . Рис. 1 иллюстрирует зависимость λ_1/n от n при $D=0.03, 0.05$ для отображения (36). При построении матрицы M использовались все n значений динамической переменной (ДП). Видно, что уже при $n > 20$ происходит выход на предельное значение.

Следующим и основным в рамках поставленной задачи является вопрос о зависимости величины наибольшего собственного значения матрицы ковариации от коэффициента диффузии. Рис. 2 демонстрирует зависимость λ_1 от величины Dn^2 для систем (3). Полученные значения λ_1 поделены на максимальную величину λ_{\max} для каждой кривой. Такая нормировка используется и в дальнейшем. При расчетах n бралось равным 10 и при формировании матрицы M использовались все значения ДП. Видно, что за исключением области малых D зависимости носят монотонный характер. Таким образом, подобные зависимости могут быть использованы для оценки коэффициента диффузии в среде. Резкое падение кривой, соответствующей отображению (36) при $Dn^2 \approx 6$, связано с тем, что при этом значении параметра синхронизация происходит скачком.

Отметим, что для того, чтобы введенная величина действительно являлась параметром среды, она должна быть независимой от расчетных параметров, а именно, числа n . Зависимость $\lambda_1(D)$ не обладает таким свойством, однако, зависимость $(1/n)\lambda_1(D)$ является универсальной для данного отображения при фиксированных параметрах (рис. 3). Именно это позволяет говорить о том, что она характеризует свойства среды.

Рассмотрим требования, накладываемые на множество точек среды, по значениям ДП в которых строится матрица M . Так, рис. 4 демонстрирует зависимость $\lambda_1(Dn^2)$, причем при расчетах $n=10$, но матрица M формировалась по значениям ДП в трех точках, неравноотстоящих друг от друга,

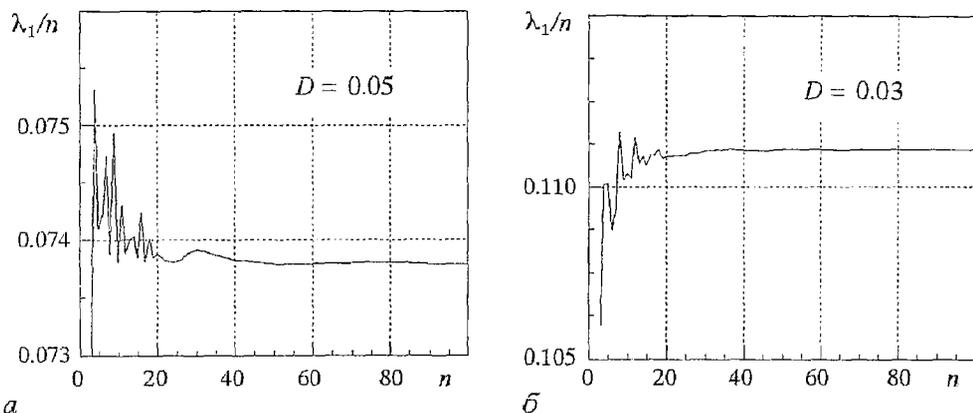


Рис. 1. Зависимость λ_1/n от масштаба разбиения при разных коэффициентах диффузии

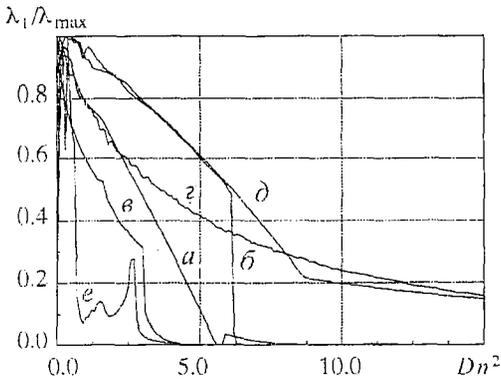


Рис. 2. Зависимость нормированного значения λ_1^n от величины Dn^2 , для исследуемых систем, обозначения кривых соответствуют отображениям (3а)-(3е)

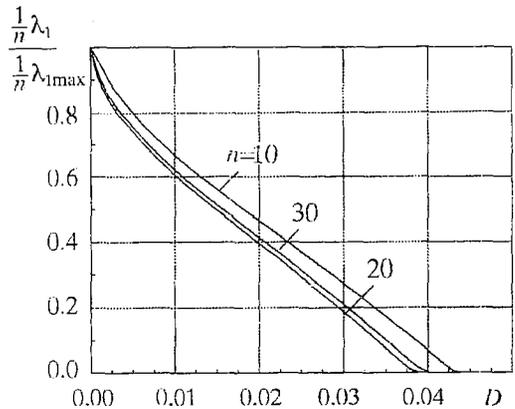


Рис. 3. Зависимость нормированного значения λ_1/n от D

$$M = \begin{bmatrix} u_2^0 & u_5^0 & u_7^0 \\ \dots & \dots & \dots \\ u_2^{N-1} & u_5^{N-1} & u_7^{N-1} \end{bmatrix}.$$

Видно, что зависимость качественно та же, что и в том случае, когда в каждый момент времени берется полный вектор наблюдений. Ход кривой «б» при $D \approx 6$ демонстрирует возникновение синхронизации.

Еще один вопрос, который необходимо рассмотреть, связан с оценкой влияния на λ_1 расстояния между точками, по значениям ДП в которых формируется матрица M . Поясним значение этого вопроса следующим примером. Если расстояние между соседними точками заметно больше корреляционной длины (то есть характерного расстояния затухания автокорреляционной функции), то трудно ожидать от метода разумных результатов - элементы среды практически не «чувствуют» друг друга, как если бы диффузионная связь отсутствовала. Рис. 5 представляет линии уровня автокорреляционной функции в зависимости от D и расстояния между точками для отображения (3г). Из рисунка следует, что при расстоянии между точками Δn больше $30 \div 35$ значение автокорреляционной функции становится менее 0.2. То, как это влияет на оценку

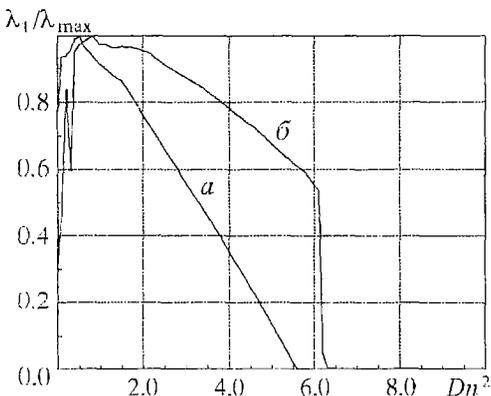


Рис. 4. Зависимость нормированного значения λ_1 от Dn^2 при анализе рядов наблюдений в трех точках; кривая «а» соответствует отображению (3а), кривая «б» - отображению (3б)

величины λ_1 , показано на рис. 6. При расчетах бралось $n=200$, матрица M формировалась по рядам наблюдений в 5 точках. Видно, что зависимость при заданном D становится более пологой, что затрудняет определение значения коэффициента диффузии при наличии погрешности в определении наибольшего собственного значения матрицы ковариации. Следовательно, предлагаемый алгоритм необходимо использовать при расстоянии между точками наблюдений меньшем, чем корреляционная длина.

Существенным для применения предлагаемого подхода в задачах построения моделей пространственно-

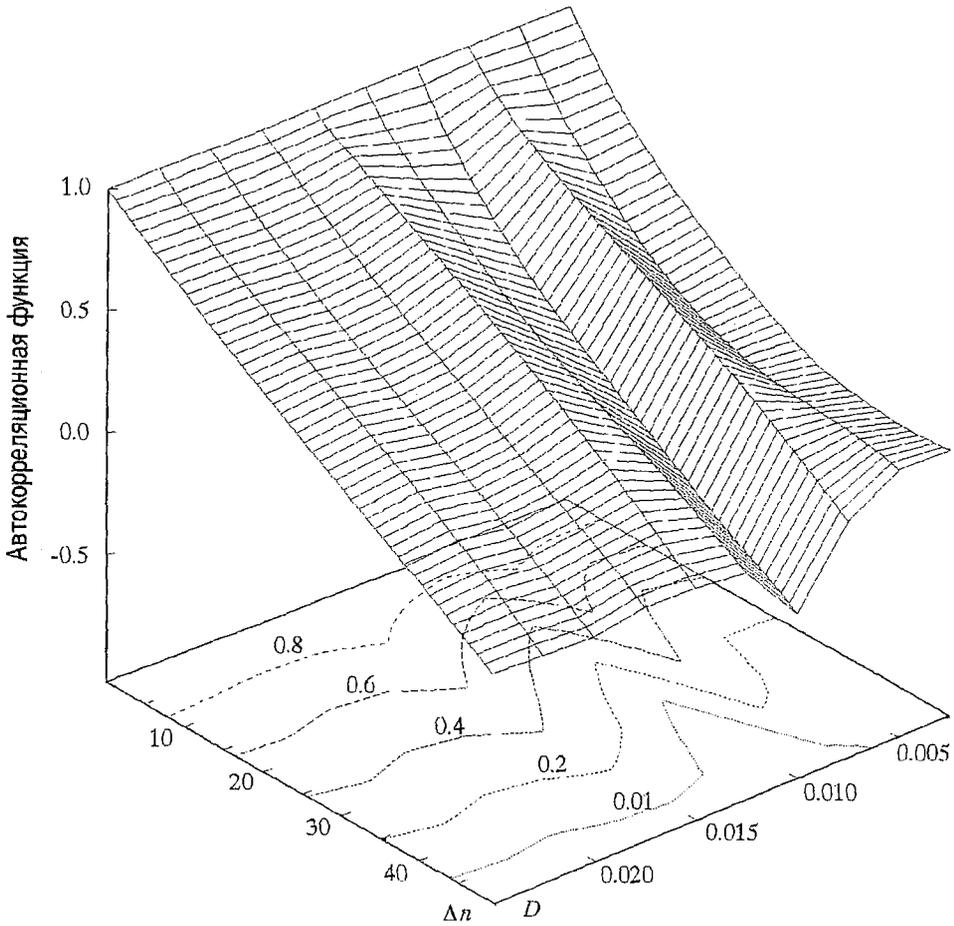


Рис. 5. Автокорреляционная функция для системы (3г) при разных D и Δn

распределенных систем является вопрос о том, как влияют неточности определения остальных параметров модели (входящих в функцию f) на оценку коэффициента диффузии. На рис. 7 приведены результаты расчетов λ_1 для (3б) при $n=20$ и $c = 1.48, 1.50, 1.52$. Видно, что в области $0.015 \leq D \leq 0.05$ кривые практически совпадают. То есть в рассмотренном случае метод не является чувствительным к небольшим ошибкам при определении остальных параметров системы.

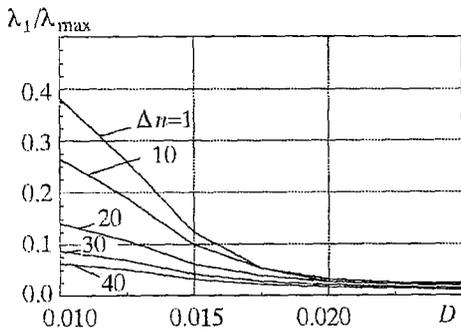


Рис. 6. Влияние расстояния между точками среды Δn на оценку λ_1

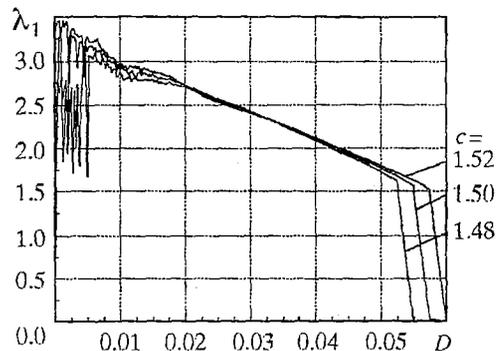


Рис. 7. Влияние параметра c отображения (3б) на оценку λ_1

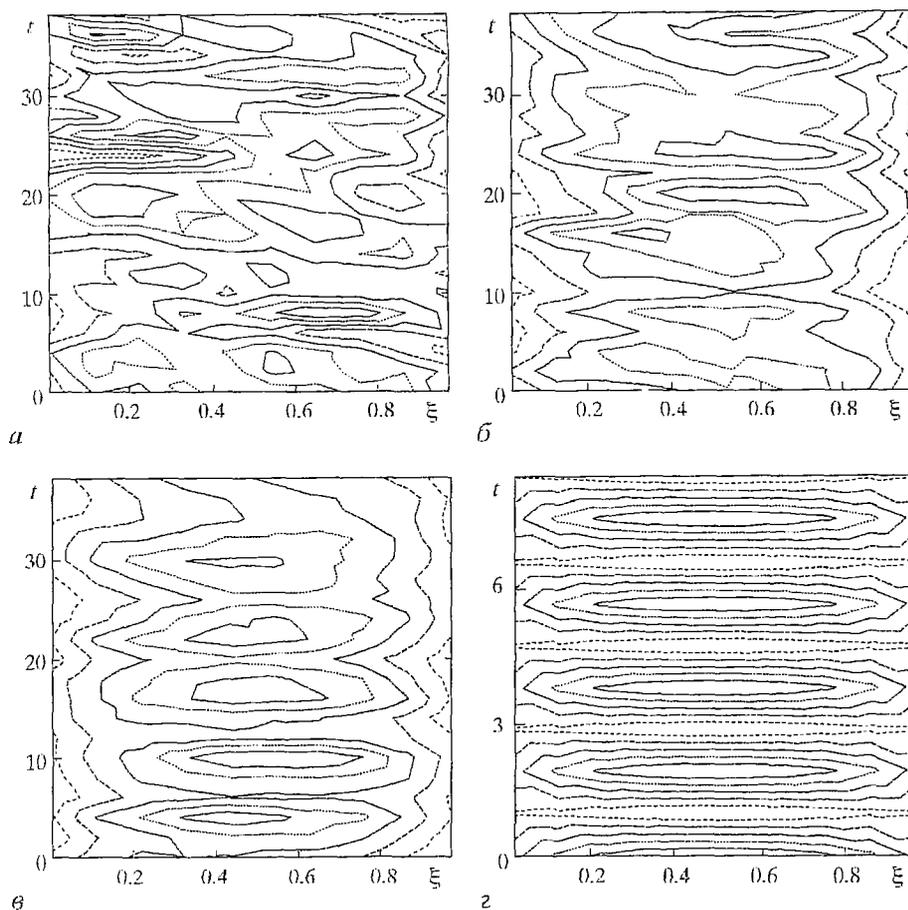


Рис. 8. Пространственно-временная динамика для отображения (3г) при различных D : a - 0.01; $б$ - 0.05; $в$ - 0.10; $г$ - периодическая пространственно-временная динамика для отображения (3б) при $D=0.05$

Интересным представляется вопрос об изменении характера поведения системы при изменении коэффициента диффузии. Хотя подобный анализ далеко не завершен, наглядное представление об изменениях в системе дает рис. 8. На рис. 8, a - $в$ показаны линии уровня в координатах (пространственная переменная, время) для отображения (3г) при $D = 0.01, 0.05, 0.10$, соответственно. Видно, что с ростом коэффициента диффузии движение переходит от неупорядоченного к почти периодическому. Для отображения (3б) при $D=0.05$ (рис. 8, $г$) движение становится в точности периодическим. Из рис. 8, a - $в$ следует, что кривые рис. 1,2 были получены для случая, когда в системе реализуется хаотический режим с размерностью аттрактора, которой соответствует корреляционный показатель $\nu < 4$.

Рис. 9 представляет результаты расчетов корреляционного интеграла в n -мерном фазовом пространстве для различных коэффициентов диффузии. Динамика элемента среды определяется отображением (3б) при $c=1.5, n=20$. Видно, что корреляционная размерность, определяемая наклоном кривой, с ростом D уменьшается и достигает некоторой предельной величины. Это, по-видимому, можно трактовать как «упрощение» поведения системы, вызванное тем, что отдельные элементы системы начинают участвовать в общем движении из-за наличия внутренних связей, растущих с увеличением коэффициента диффузии.

Рассмотрим вопрос о граничных условиях. Расчеты показывают, что

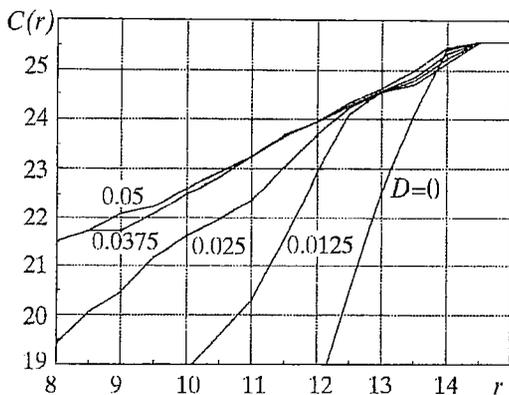


Рис. 9. Корреляционный интеграл для отображения (36) при различных D

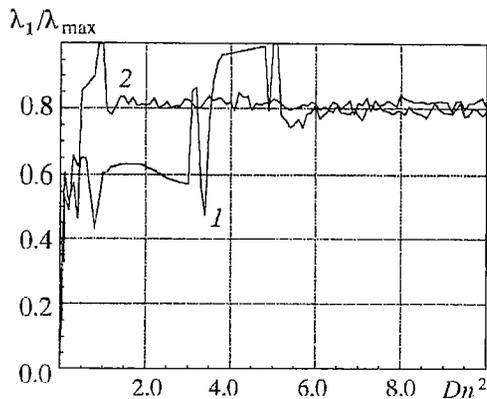


Рис. 10. Результаты оценки нормированного значения λ_1 для случаев периодических граничных условий (кривая 1) и условий нулевого потока на границе (кривая 2)

зависимости λ_1 , подобные рассмотренным ранее (имеющие монотонный участок в широкой области изменений D), встречаются только при фиксированных значениях переменной на краях. Так, рис. 10 представляет результаты расчетов для периодических граничных условий и условий нулевого потока на границе. В первом случае цепочка осцилляторов «замыкалась» в кольцо связями (для одномерного отображения)

$$x_1^{j+1} = f(x_1^j) + D(x_{n-1}^{j+1} - 2x_1^{j+1} + x_2^{j+1}),$$

$$x_n^{j+1} = f(x_n^j) + D(x_1^{j+1} - 2x_n^{j+1} + x_{n-1}^{j+1}),$$

а во втором случае ставились следующие условия:

$$-3x_1 + 4x_2 - x_3 = 0,$$

$$-x_{n-2} + 4x_{n-1} - 3x_n = 0.$$

Для двумерных отображений и обыкновенных дифференциальных уравнений делалось то же самое. Видно, что зависимость λ_1 является в обоих случаях нерегулярной и для задачи оценки параметра D интереса, по-видимому, не представляет. Влияние краевых условий при небольшой области и выбранных коэффициентах диффузии оказывается достаточно велико. Такое поведение показывает, при каких условиях описанный алгоритм может быть неэффективен. Однако вдали от краев при небольших коэффициентах диффузии (или при достаточно больших областях) кривые $\lambda_1(D)$ для первой и второй краевых задач практически совпадают и при увеличении D все больше расходятся.

Заключение

Показано, что для различных сред, описываемых системой уравнений диффузии с нелинейным источником либо цепочками диффузионно связанных отображений, может быть введен параметр - наибольшее собственное значение матрицы ковариации, составленной по результатам наблюдений в нескольких точках, - монотонно меняющийся с изменением коэффициента диффузии. Показано, что этот параметр может рассматриваться как самостоятельная характеристика среды. Рассмотрены вопросы зависимости такого рода параметра от расстояния между точками наблюдений, неточностей описания динамики элементов среды и др. Рассмотрено изменение поведения среды с ростом коэффициента диффузии.

На основе предложенного метода, зная закон, которому подчиняется динамическое поведение элемента среды (в форме отображения или обыкновенного дифференциального уравнения), возможно определение коэффициента диффузии по записи наблюдений в нескольких точках.

Настоящая работа была частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант 96-01-01161).

Библиографический список

1. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1974.
2. Aguirre L.A., Billing S.A. Retrieving dynamical invariants from chaotic data using NARMAX models // International journal of bifurcation and chaos. 1995. Vol.5, № 2. P. 449.
3. Фельдштейн И.В. Об одном подходе к восстановлению динамических уравнений по временным рядам // Международная конференция «Математика, компьютер, образование». Дубна, 29.01-3.02.1996.
4. Ababrbanel H.D.I., Brown R., Sidorowich J.J., Tsimring L.S. The analysis of observed chaotic data in physical systems // Rev. Mod. Phys. 1993. P. 1331.

Институт прикладной
математики РАН

Поступила в редакцию 6.12.96

NEW APPROACH TO TRANSITION COEFFICIENT ESTIMATION

G.G. Malinetskii, A.B. Potapov, I.V. Feldstein

The paper studies one possible approach to nonlinear media transition coefficient estimation from time series of observations in several points. The approach is based on the covariant matrix biggest eigenvalue dependence on diffusion coefficient. It is shown this dependence is monotone for various systems and it can be considered as a media characteristic.

System state vector reconstruction by Takens is not used in this approach. The problem of media points choice influence on results and some other problems are analyzed. Among them - the influence of boundary conditions on existence of monotone dependence.



Малинецкий Георгий Геннадьевич родился в 1956 году в Уфе, окончил физический факультет МГУ (1979), защитил кандидатскую диссертацию на тему «Нестационарные диссипативные структуры в нелинейных средах» (1982) и докторскую диссертацию на тему «Диффузионный хаос и новые типы упорядоченности в нелинейных средах» (1990) в Институте прикладной математики. В настоящее время работает там же заведующим сектором нелинейной динамики. Автор большого количества статей в области исследования хаоса и нелинейных явлений, а также учебника «Структуры, хаос, вычислительный эксперимент. Введение в нелинейную динамику».



Потанов Алексей Борисович - родился в 1960 году. Окончил физический факультет МГУ (1983). В настоящее время старший научный сотрудник Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН. Область интересов - нелинейная динамика, обработка временных рядов, количественные характеристики хаоса, моделирование сложных систем.



Фельдштейн Илья Валерьевич - родился в 1969 году. Окончил Московский физико-технический институт (1993). Работает в Институте проблем механики РАН, аспирант Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН. Область интересов - анализ временных рядов, построение моделей систем, оценка их параметров.