МОДИФИКАЦИЯ МЕТОДА ПРОДОЛЖЕНИЯ ПО ПАРАМЕТРУ ДЛЯ ОДНОГО УРАВНЕНИЯ*

В. И. Быков, С. Б. Цыбенова
Красноярский государственный технический университет, Россия
e-mail: bykov@icm.krasn.ru

The modified method of continuation on parameter for one nonlinear equation is described. The method is illustrated by Aris-Amundson's model from the chemical reactor theory. Parametric dependences of stationary states are constructed for n-order reaction.

Рассматривается система нелинейных уравнений с параметром

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, \alpha) = 0, \tag{1}$$

где $\mathbf{x}$ — вектор неизвестных; α — параметр; $\mathbf{f}$ — вектор-функция. Система (1) неявным образом задает зависимость

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}(\alpha), \tag{2}$$

построение которой является основной целью параметрического анализа решений этой системы. Общая схема метода продолжения по параметру [1–5] состоит в следующем. При подстановке уравнения (2) в (1) и дифференцировании полученного тождества имеем

$$J\frac{d\mathbf{x}}{d\alpha} + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \alpha} \equiv 0, \tag{3}$$

где $J = \dfrac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}, \alpha)$ — матрица Якоби системы (1).

Из тождества (3), рассматриваемого как система линейных уравнений относительно $d\mathbf{x}/d\alpha$, можно выписать уравнения движения по параметру

$$\frac{d\mathbf{x}}{d\alpha} = -J^{-1}\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \alpha}. \tag{4}$$

Искомая параметрическая зависимость $\mathbf{x}(\alpha)$ является решением системы обыкновенных дифференциальных уравнений (4) при заданных начальных данных

$$\mathbf{x}(\alpha_0) = \mathbf{x}^0.$$

Специфика системы (4) заключается в том, что в точках бифуркации решений (1) матрица Якоби J становится особенной. Поэтому для численного интегрирования (4) переходят к параметризации по длине дуги кривой $\mathbf{x}(\alpha)$ в соответствующем пространстве размерности

*Работа частично поддержана грантом Министерства образования РФ по фундаментальным исследованиям.

$\dim \mathbf{x} + 1$. Заметим, что для интегрирования системы уравнений (4) должны применяться специальные методы, в том числе основанные на вычислении матрицы Якоби [6]. В этом случае необходимо знать частные производные $\dfrac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\left(J^{-1}\dfrac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}}\right)$, что приводит к дополнительным техническим трудностям. Система (4) часто записывается, исходя из решения (3), например по методу Гаусса относительно $d\mathbf{x}/d\alpha$. При решении (4) возникает проблема задания достаточно точных начальных данных. Все это говорит о том, что численная реализация метода продолжения по параметру является достаточно трудоемкой вычислительной задачей. Степень ее сложности существенно зависит от размерности системы (1). Вычислительные затраты значительно снижаются при сокращении, если это возможно, числа уравнений в (1) за счет исключения некоторых переменных.

В настоящей работе рассматривается специальный случай, когда исходную систему (1) удается свести к одному уравнению

$$g(x, \alpha) = 0, \tag{5}$$

где g — скалярная функция одного аргумента x и параметра α. Аналогично (3) из дифференцирования тождества $g(x(\alpha), \alpha) \equiv 0$ имеем

$$\frac{dx}{d\alpha} = -\frac{\partial g}{\partial \alpha}\bigg/\frac{\partial g}{\partial x} \tag{6}$$

или

$$\frac{d\alpha}{dx} = -\frac{\partial g}{\partial x}\bigg/\frac{\partial g}{\partial \alpha}. \tag{7}$$

Искомая параметрическая зависимость $x(\alpha)$ или обратная ей зависимость $\alpha(x)$ (рис. 1) находятся путем численного интегрирования одного из уравнений (6) или (7). При движении по кривой $x(\alpha)$ интегрируется (6) или (7) в зависимости от величины правой части уравнения. В точках поворота производные $\partial g/\partial x$ или $\partial g/\partial \alpha$ зануляются, поэтому условием выбора движения по α или x можно принять неравенство

$$\left|\frac{\partial g}{\partial \alpha}\bigg/\frac{\partial g}{\partial x}\right| < 1. \tag{8}$$

При численном интегрировании уравнений (6) или (7) должен быть предусмотрен "переворот" системы — переход от уравнения (6) к уравнению (7) или наоборот в зависимости от выполнения условия (8). Интегратор должен содержать проверку величины правой части (6) или (7) и осуществлять этот переворот по заданному условию. Преимуществом модифицированного метода продолжения по параметру для скалярного уравнения (5) является отсутствие вычисления матрицы, обратной матрице Якоби, и трудностей, связанных с бифуркациями при обращении в нуль производных $\partial g/\partial x$ или $\partial g/\partial \alpha$. Последние сложности преодолеваются в нашем подходе за счет смены зависимой и независимой переменных (x на α или α на x).

Проиллюстрируем модифицированную процедуру метода продолжения по параметру для решения задачи параметрического анализа известной в теории химических реакторов математической модели Ариса—Амундсона [7, 8]:

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= Da\exp(\gamma(1 - 1/y))k(x) - x,\\ \frac{dy}{dt} &= \beta Da\exp(\gamma(1 - 1/y))k(x) - s(y - 1),\end{aligned} \tag{9}$$

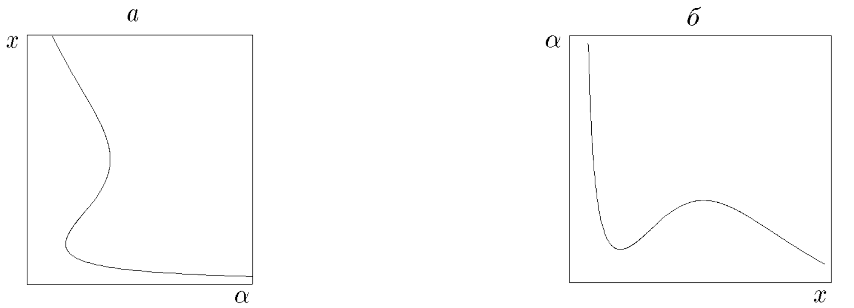

Рис. 1. Параметрическая зависимость $x(\alpha)$ (a) и обратная ей зависимость $\alpha(x)$ ($б$).

где x, y — безразмерные концентрация и температура; Da, β, s, γ — безразмерные параметры; $k(x)$ — кинетическая функция. Например, для реакции n-го порядка $k(x) = (1-x)^n$.

Система уравнений для определения стационарных состояний (СС) модели (9) имеет вид

$$Da \exp(\gamma(1-1/y))k(x) - x = 0,$$
$$\beta Da \exp(\gamma(1-1/y))k(x) - s(y-1) = 0.$$

После исключения из этой системы $x = (s/\beta)(y-1)$ ее можно свести к одному нелинейному уравнению

$$F(y, Da, s, \beta, \gamma) = \beta Da \exp(\gamma(1-1/y)) \left(1 - \frac{s}{\beta}(y-1)\right)^n - s(y-1) = 0. \tag{10}$$

Из уравнения стационарности (10) можно получить в явном виде искомые параметрические зависимости (вернее, обратные им зависимости) для параметров Da, γ:

$$Da(y) = \frac{s(y-1)}{\beta \exp(\gamma(1-1/y))(1-(s/\beta)(y-1))^n},$$
$$\gamma(y) = \frac{y}{y-1} \ln \frac{s(y-1)}{\beta Da(1-(s/\beta)(y-1))^n}.$$

При $n = 1$ в явном виде можно получить все параметрические зависимости, в том числе $s(y)$ и $\beta(y)$. При других n искомые зависимости можно получить с помощью предлагаемой процедуры модифицированного метода продолжения по параметру. В нашем случае имеем

$$\frac{\partial F}{\partial y} = Da \exp(\gamma(1-1/y)) \left[\frac{\beta\gamma}{y^2}\left(1 - \frac{s}{\beta}(y-1)\right)^n - ns\left(1 - \frac{s}{\beta}(y-1)\right)^{n-1}\right] - s. \tag{11}$$

Продифференцируем уравнение (10), например, по параметру s:

$$\frac{\partial F}{\partial s} = (1-y)\left[1 + nDa \exp(\gamma(1-1/y))\left(1 - \frac{s}{\beta}(y-1)\right)^{n-1}\right].$$

Согласно (6), (7), чтобы решить уравнение (10), т. е. найти $y(s)$ или $s(y)$, необходимо решить одно из дифференциальных уравнений

$$\frac{dy}{ds} = -\frac{\partial F}{\partial s} \Big/ \frac{\partial F}{\partial y} \quad \text{или} \quad \frac{ds}{dy} = -\frac{\partial F}{\partial y} \Big/ \frac{\partial F}{\partial s}. \tag{12}$$

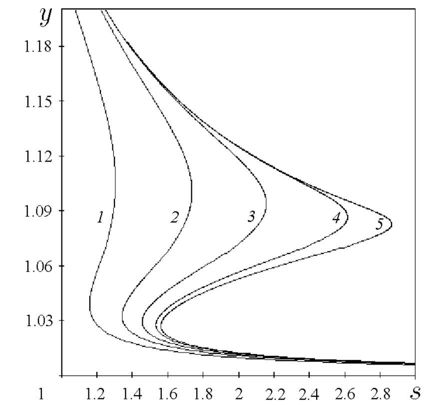

Рис. 2. Параметрические зависимости стационарных состояний системы (9) при $Da = 0.06$, $\beta = 0.25$, $\gamma = 40$: кривые *1 – 5* соответствуют значениям n, равным 2, 1, 0.5, 0.2, 0.1.

При решении (12) необходимо задать достаточно точные начальные условия:

$$y = y(s_0) \quad \text{или} \quad s = s(y_0).$$

Эти условия можно получить, один раз используя процедуру уточнения корней нелинейных уравнений, например, метод Ньютона. Результат интегрирования (12) при варьировании порядка реакции n показан на рис. 2. Например, при $n = 1$ (кривая *2*) движение по параметру s начинается с интегрирования уравнения для dy/ds. При подходе к точке поворота происходит смена независимого аргумента, интегрирование далее ведется для уравнения относительно ds/dy.

В случае необходимости построения зависимости стационарного состояния от другого параметра достаточно вычислить производную функции F по этому параметру и проинтегрировать уравнения, аналогичные (12). Например, при построении зависимости $y(\beta)$ кроме (11) нужно вычислить производную $\partial F/\partial\beta$:

$$\frac{\partial F}{\partial \beta} = Da\exp(\gamma(1-1/y))\left[\left(1-\frac{s}{\beta}(y-1)\right)^n + n(y-1)\frac{s}{\beta}\left(1-\frac{s}{\beta}(y-1)\right)^{n-1}\right].$$

Важным этапом параметрического анализа математических моделей типа (9), а также общих динамических систем $f(x,\alpha) = \dot{x}$ является построение бифуркационных кривых — кривых смены числа стационарных состояний и типа их устойчивости. Так, для системы (9) кривая кратности СС L_Δ и кривая нейтральности L_σ определяются из условий равенства нулю якобиана и следа матрицы Якоби:

$$\sigma = \mathrm{Sp}J = 0,$$

$$\Delta = |J| = 0,$$

где $\Delta = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$; $\sigma = a_{11} + a_{22}$;

$$a_{11} = -nDa\exp(\gamma(1-1/y))(1-x)^{n-1} - 1,$$

$$a_{12} = \frac{\gamma}{y^2}Da\exp(\gamma(1-1/y))(1-x)^n,$$

$$a_{21} = -n\beta Da \exp(\gamma(1-1/y))(1-x)^{n-1},$$
$$a_{22} = \frac{\gamma}{y^2}\beta Da \exp(\gamma(1-1/y))(1-x)^n - s.$$

Для реакции n-го порядка можно записать

$$\sigma = Da \exp(\gamma(1-1/y))\left(\frac{\gamma}{y^2}\beta(1-x)^n - n(1-x)^{n-1}\right) - s - 1, \tag{13}$$
$$\Delta = Da \exp(\gamma(1-1/y))\left(ns(1-x)^{n-1} - \frac{\gamma}{y^2}\beta(1-x)^n\right) + s. \tag{14}$$

Из (13), (14) можно получить явные выражения кривых локальных бифуркаций СС. Например, для плоскости параметров Da, γ имеем $L_\Delta(Da, \gamma)$:

$$\gamma(y) = \frac{y^n}{y-1} + \frac{nsy^2}{\beta - s(y-1)},$$

$$Da(y, \gamma) = \frac{s(y-1)}{\beta e(y)(1-(\frac{s}{\beta})(y-1))^n}.$$

Кривая нейтральности СС $L_\sigma(Da, \gamma)$ имеет вид

$$\gamma(y) = \frac{y^n(s+1)}{s(y-1)} + \frac{ny^n}{\beta - s(y-1)},$$

$$Da(y, \gamma) = \frac{s(y-1)}{\beta e(y)(1-(\frac{s}{\beta})(y-1))^n}.$$

В других случаях, если явные выражения для L_Δ, L_σ получить не удается, можно использовать предлагаемый модифицированный метод продолжения по параметру. Так, для построения, например, L_Δ (α_1, α_2) необходимо совместно решить систему уравнений

$$f(x, \alpha_1, \alpha_2) = 0,$$
$$\Delta(x, \alpha_1, \alpha_2) = 0.$$

Исключая из первого уравнения $\alpha_1 = \alpha_1(x, \alpha_2)$, имеем

$$\Delta(x, \alpha_1(x, \alpha_2), \alpha_2) = 0,$$

откуда, используя предлагаемую процедуру, получаем

$$\alpha_2 = \alpha_2(x).$$

Поэтому искомая кривая в плоскости (α_1, α_2) будет задаваться в виде

$$\alpha_2 = \alpha_2(x),$$

$$\alpha_1 = \alpha_1(x, \alpha_2(x)).$$

Примеры построения кривых L_Δ, L_σ для системы (9) даны на рис. 3, 4. Так называемый параметрический портрет системы (9) образует совместное построение L_Δ, L_σ на одной

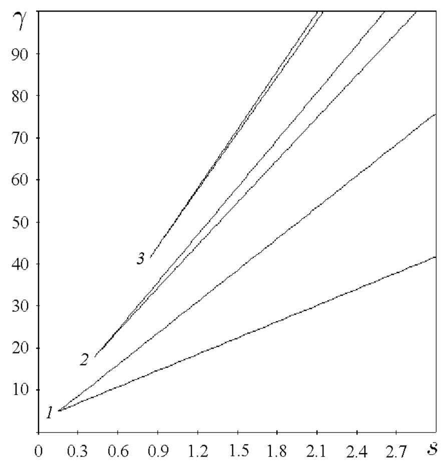

Рис. 3. Кривые кратности стационарных состояний L_Δ при $Da = 0.06$, $\beta = 0.25$: кривые *1–3* соответствуют значениям n, равным 0.1, 3, 5.

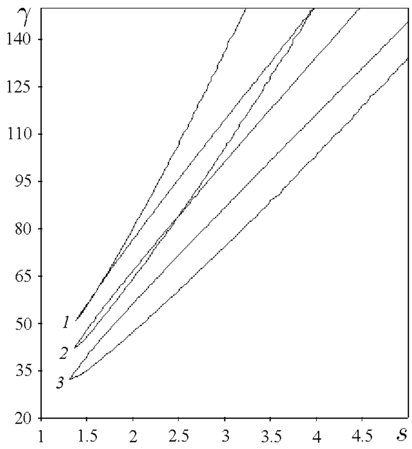

Рис. 4. Кривые нейтральности стационарных состояний L_σ при $Da = 0.06$, $\beta = 0.25$: кривые *1–3* соответствуют значениям n, равным 3, 2, 1.

из плоскостей параметров. Бифуркационные кривые на этом портрете выделяют области параметров с различными числами и типом устойчивости СС. В частности, область единственного и неустойчивого стационарного состояния характеризуется наличием предельных циклов.

Приведенный пример показывает, что для конкретной нелинейной модели (1) с учетом ее специфики искомые параметрические зависимости $x(\alpha)$ иногда проще получить в виде обратных им функций $\alpha(x)$ одной переменной. Если такие зависимости построены (аналитически или численно), то соответствующие бифуркационные кривые в выделенных плоскостях каких-либо двух параметров (α_1, α_2) строятся значительно проще, чем с использованием общей схемы метода продолжения по параметру.

Таким образом, если систему уравнений стационарности удается свести к одному уравнению, то вместо общей процедуры метода продолжения по параметру целесообразно использовать предлагаемый подход, основанный на интегрировании уравнений типа (12). Для систем общего вида (1) предложенная процедура продолжения по параметру не может быть применена. Однако, если за счет исключения неизвестных систему удается свести к одному уравнению, то параметрический анализ решений исходной модели предпочтительнее проводить по предлагаемой схеме. Для тех переменных, которые входят в (1) алгебраическим образом, исключение может быть проведено в буквенном виде методами компьютерной алгебры [9–11]. Получающиеся при этом выражения для результата системы нелинейных алгебраических уравнений достаточно громоздки, но по высказанным выше соображениям можно надеяться, что параметрический анализ решений (1) для одного уравнения будет более эффективен.

Список литературы

[1] Давиденко Д. Ф. О новом методе численного решения систем нелинейных уравнений // Докл. АН СССР. 1953. Т. 88, №4. С. 601–602.

[2] Kubicek M. Dependence of solution of nonlinear systems on a parameter // ACM Trans. Math. Software. 1976. Vol. 2, No. 1. P. 98–107.

[3] Балабаев Н. К., Луневская Л. В. Движение по кривой в n-мерном пространстве // Алгоритмы и программы на Фортране: Мат. по математическому обеспечению ЭВМ. Вып. 1. Пущино: ОНТИ НИВЦ АН СССР. 1978. 52 с.

[4] Методы анализа нелинейных динамических моделей / М. Холодниок, А. Клич, М. Кубичек, М. Марек. М.: Мир, 1991. 365 с.

[5] Фадеев С. И. и др. Пакет программ "STEP" для численного исследования систем нелинейных уравнений и автономных систем общего вида. Описание работы пакета "STEP" на примерах из учебного курса "Инженерная химия каталитических процессов": Учеб. пособие. Новосибирск: НГУ, 1998. 189 с.

[6] Новиков Е. А. Явные методы для жестких систем. Новосибирск: Наука, 1997. 195 с.

[7] Цыбенова С. Б. Математическая модель Ариса — Амундсона и ее параметрический анализ // Вестник КГТУ. Вып. 16. Математические методы и моделирование / Под ред. В. И. Быкова. Красноярск: КГТУ, 2000. С. 137–140.

[8] Быков В. И., Цыбенова С. Б. Диаграмма Семенова как критерий устойчивости стационарных состояний // Докл. РАН. 2000. Т. 374, №5. С. 640–643.

[9] Быков В. И., Кытманов А. М., Лазман М. З. Методы исключения в компьютерной алгебре многочленов. Новосибирск: Наука, 1991. 234 с. (англ. перевод: Bykov V. I., Kytmanov A. M., Lazman M. Z. Elimination Methods in Polynomial Computer Algebra. Dordrechtetc: Kluwer Acad. Publ. 1998. 252 p).

[10] Быков В. И., Кытманов А. М., Осетрова Т. А. Компьютерная алгебра многочленов. Модифицированный метод исключения переменных // Докл. РАН. 1996. Т. 350, №4. С. 443–445.

[11] Быков В. И., Кытманов А. М., Осетрова Т. А., Потапова З. Е. Применение систем компьютерной алгебры в модифицированном методе исключения неизвестных // Докл. РАН. 2000. Т. 370, №4. С. 439–442.

Поступила в редакцию 6 марта 2001 г.