S©MR ISSN 1813-3304

СИБИРСКИЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ
МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИЗВЕСТИЯ

Siberian Electronic Mathematical Reports
http://semr.math.nsc.ru

Том 13, стр. 175–180 (2016) УДК 541.124:541.126:517.9
DOI 10.17377/semi.2016.13.015 MSC 34E13

ЗАДАЧА ИДЕНТИФИКАЦИИ ДЛЯ СИНГУЛЯРНЫХ СИСТЕМ С МАЛЫМ ПАРАМЕТРОМ В ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКЕ

Л.И. КОНОНЕНКО

Abstract. Direct and inverse problems for singular systems with a small parameter are stated, which describe catalytic reactions in chemical kinetics. The solution of the direct problem is based on the method of integral manifolds. The inverse problem reduces to finding the coefficients of the polynomial in the right-hand part of the slow equation according to the solution given on the slow surface of the system. The above arguments make it possible to obtain existence and uniqueness condition for the coefficients in the right-hand part of the slow system.

Keywords: mathematical modeling, singularly perturbed system, integral manifold, slow surface, inverse problem.

1. Введение

При моделировании широкого круга задач химической кинетики используются сингулярно возмущенные системы обыкновенных дифференциальных уравнений с быстрыми и медленными переменными (с малым параметром).

Рассматривается сингулярно возмущенная система обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} \dot{x} &= f(x,y,t,\varepsilon), \\ \varepsilon\dot{y} &= g(x,y,t,\varepsilon), \end{aligned} \tag{1}$$

где $x \in \mathbb{R}^m$ — медленные, $y \in \mathbb{R}^n$ — быстрые переменные; f, g — достаточно гладкие функции, $t \in \mathbb{R}$ — переменная, имеющая смысл времени, $\dot{x}, \dot{y}$ — производные по времени, ε — положительный малый параметр.

Kononenko, L.I., An identification problem for singular systems with a small parameter in chemical kinetics.

Работа поддержана РФФИ (грант 15-01-00745).

Поступила 29 февраля 2016 г., опубликована 16 марта 2016 г.

Система рассматривается в ограниченной выпуклой инвариантной притягивающей области $W \subseteq \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n$.

Задача отыскания решений системы по некоторым исходным данным при известных функциях в правых частях представляет собой так называемую *прямую* задачу для дифференциальных уравнений.

Обратная задача (в химической кинетике она называется задачей идентификации [1]) сводится к нахождению неизвестных правых частей по некоторым данным о решении прямой задачи. Сформулирована и обоснована гипотеза о том, что по заданию решения на медленной поверхности можно восстановить неизвестные правые части, в частности, получены условия существования и единственности коэффициентов в правой части медленной подсистемы вырожденной системы, заданной полиномом.

В основе решения *прямой задачи* лежит метод интегральных многообразий, который является удобным аппаратом исследования многомерных сингуляно возмущенных систем дифференциальных уравнений, позволяющим понижать размерность систем [2, 3, 4, 5]. Приведем необходимые сведения о методе интегральных многообразий для системы (1).

Гладкая поверхность S в $\mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$ называется *интегральным многообразием* системы (1), если любая траектория этой системы, имеющая хотя бы одну общую точку с S, целиком принадлежит поверхности S. Формально, если при $t = t_0$ точка $(x(t_0), y(t_0), t_0) \in S$, то траектория $(x(t), y(t), t)$ целиком принадлежит S.

Уравнение $\dot{x} = f(x, y, t, \varepsilon)$ в системе (1) называется *медленной подсистемой*, а уравнение $\varepsilon\dot{y} = g(x, y, t, \varepsilon)$ — *быстрой подсистемой* системы (1). Если положить в (1) $\varepsilon = 0$, получим *порождающую* или *вырожденную* систему

$$\dot{x} = f(x, y, t, 0), \tag{2}$$

$$0 = g(x, y, t, 0). \tag{3}$$

Уравнение $g(x, y, t, 0) = 0$ задает *медленную поверхность*. Это уравнение медленной поверхности может иметь одно или несколько решений, каждое из которых задает *лист медленной поверхности*.

Листы интегрального многообразия медленных движений (или медленного интегрального многообразия) являются уточнением при учете малого параметра ε листов медленной поверхности и получаются из них с помощью асимптотического разложения по степеням ε:

$$h(x, t, \varepsilon) = h_0(x, t) + \varepsilon h_1(x, t) + \cdots + \varepsilon^k h_k(x, t) + \ldots,$$

где коэффициенты разложения $h_k(x, t)$ подсчитываются по рекуррентной формуле, приведенной, например, в [5],

$$h_k = -B^{-1}[g^{(k)} - \tfrac{\partial h_{k-1}}{\partial t} - \sum_{p=0}^{k-1} \tfrac{\partial h_p}{\partial x} f^{(k-1-p)}],$$

$$B = \det(\tfrac{\partial g}{\partial y}(x, h_0(x, t), t, 0)) \neq 0.$$

Среди интегральных многообразий системы (1) нас интересуют m-мерные интегральные многообразия (размерность медленных переменных), которые представимы в виде графика вектор-функции $y = h(x, t, \varepsilon)$.

Выполняется соотношение

$$\lim_{\varepsilon \to 0} h(x, t, \varepsilon) = h_0(x, t),$$

где $h_0(x,t)$ — функция, график которой является листом медленной поверхности.

При стремлении малого параметра ε к нулю траектории исходной системы стремятся к траекториям вырожденной системы.

Нахождение решения системы (1) сводится к отысканию решения вырожденной системы (2)–(3), получаемой из исходной, если параметр ε формально положить равным нулю. Этот факт следует из работ А. Н. Тихонова (например, [6]), в которых доказаны теоремы о предельном переходе к решению вырожденной задачи при стремлении малого параметра к нулю. Правые части системы (1) являются достаточно гладкими функциями, поэтому удовлетворяют требуемым условиям, в частности, обеспечивают единственность решения.

Существование интегрального многообразия было доказано в [4]. Приведем соответствующую теорему и формулировку прямой задачи. Заметим, что термин "прямая" задача обычно употребляется в контексте с "обратной" задачей, а в остальных случаях просто "задача например, [7, 8, 9, 10].

2. Постановка прямой задачи

Пусть для системы (1) выполнены следующие условия:

I. Уравнение $g(x,y,t,0)=0$ имеет изолированное решение $y=h_0(x,t)$ при $t\in\mathbb{R}$, $x\in\mathbb{R}^m$.

II. В области $\Omega_0=\{(x,y,t,\varepsilon)\mid x\in\mathbb{R}^m, \|y-h_0(x,t)\|<\rho, t\in\mathbb{R}, 0\le\varepsilon\le\varepsilon_0\}$ функции f, g и h_0 равномерно непрерывны и ограничены вместе с частными производными по переменным до $(k+2)$-го порядка включительно $(k\ge 0)$.

III. Собственные значения $\lambda_i(x,t)$ $(i=1,\dots,n)$ матрицы $\frac{\partial g}{\partial y}(x,h_0(x,t),t,0)$ подчиняются неравенству $\mathrm{Re}\lambda_i(x,t)\le -2\gamma<0$.

Требуется по заданным функциям $f(x,y,t,\varepsilon)$, $g(x,y,t,\varepsilon)$ в правой части системы (1) найти $x(t)$, $y(t)$ в области Ω_0.

Теорема 1. [4] *Пусть выполняются условия I-III. Тогда существует такое ε_1, $(0<\varepsilon_1\le\varepsilon_0)$, что для каждого $\varepsilon\in(0,\varepsilon_1]$ система (1) имеет интегральное многообразие медленных движений $y=h(x,t,\varepsilon)$, движение по которому описывается уравнением*

$$\dot{x}=f(x,h(x,t,\varepsilon),t,\varepsilon).$$

Если $x(t)$ — решение этого уравнения, то пара $x(t)$, $y(t)$, где $y(t)=h(x,t,\varepsilon)$ является решением исходной системы (1), т. е. пара $x(t)$, $y(t)$ есть решение прямой задачи.

В качестве примеров прямой задачи были рассмотрены две модели из химической кинетики [7]:

1) математическая модель реактора идеального смешения;

2) математическая модель каталитической реакции окисления CO на иридии.

3. Постановка обратной задачи

Для упрощения исследования обратной задачи для системы (1) введены следующие ограничения:

1) рассматривается обратная задача для системы (1) при $\varepsilon=0$, т. е. для вырожденной системы (2)–(3);

2) функция f в правой части медленной подсистемы системы (1) задается в виде многочлена p-й степени $f = \sum_{i+j \le p} b_{ij} x^i y^j$, так как в задачах химической кинетики правые части системы часто являются полиномами, более того, будем рассматривать многочлен первой степени;

3) рассматриваются системы с одной медленной и одной быстрой переменными, т. е. $m = n = 1$;

4) функцию $g(x, y, t, \varepsilon)$ считаем заданной и удовлетворяющей всем условиям теоремы о неявной функции в каждой точке области, в частности, $\frac{\partial g(x,y,t,0)}{\partial y} \ne 0$, следовательно, при $\varepsilon = 0$ медленная поверхность, уравнение которой $g(x, y, t, 0) = 0$, задана;

5) медленная поверхность состоит из одного листа.

Первое ограничение серьезное, так как касается главного вопроса: будут ли коэффициенты полинома в правой части системы, зависящие от ε, стремиться к коэффициентам медленной системы, рассматриваемой уже не на медленной поверхности, а на листах интегрального многообразия при $\varepsilon \to 0$. Ясно, что ответом на этот вопрос является ответ на вопрос: корректна ли данная задача.

Напомним, что задача называется поставленной корректно (по Адамару), если выполняются следующие условия:

1) решение задачи существует; 2) решение задачи единственно; 3) решение задачи непрерывно зависит от данных задачи [11].

Заметим, что понятие корректности обычно рассматривается в применении к задачам математической физики или к краевой задаче с частными производными.

Будем пока считать, что задача корректна и, следовательно, исследование для вырожденной системы ($\varepsilon = 0$) имеет смысл и будет использовано при $\varepsilon \ne 0$.

Второе ограничение на степень полинома несущественно, поскольку в задачах химической кинетики в правой части уравнений обычно стоят полиномы небольших размерностей и нет принципиальных отличий от рассматриваемого случая. Остальные ограничения требуют тщательных исследований.

Рассматривается система дифференциальных уравнений со следующими данными

$$\begin{aligned}
&\dot{x} = p_0 + p_1 x + p_2 y, \\
&0 = g(x, y, t, 0), x \in \mathbb{R}, y \in \mathbb{R}, t \in \mathbb{R}, p_i \in \mathbb{R}, i = 0, 1, 2, (x, y) \in W, \\
&x(t_i) = \alpha_i, \dot{x}(t_i) = \beta_i, i = 1, 2, 3,
\end{aligned} \tag{4}$$

где функция g удовлетворяет условиям 4), 5). Для данных t_i, α_i, β_i требуется найти коэффициенты p_0, p_1, p_2, удовлетворяющие системе (4).

Из второго уравнения системы (4) при условии $\frac{\partial g(x,y,t,0)}{\partial y} \ne 0$ выразим быструю переменную y через медленную переменную x. Это возможно, так как функция g удовлетворяет всем условиям теоремы о неявной функции. Имеем $y = \varphi(x, t)$. Подставив это выражение в первое уравнение системы (4), имеем

$$\dot{x}(t) = p_0 + p_1 x(t) + p_2 \varphi(x(t), t).$$

Используя данные $x(t_i) = \alpha_i, \dot{x}(t_i) = \beta_i$ и вводя обозначения $\gamma_i = y_i = \varphi(\alpha_i, t_i), i = 1, 2, 3$, имеем систему трех уравнений с тремя неизвестными p_0, p_1, p_2:

$$
\begin{aligned}
p_0 + p_1\alpha_1 + p_2\gamma_1 &= \beta_1, \\
p_0 + p_1\alpha_2 + p_2\gamma_2 &= \beta_2, \\
p_0 + p_1\alpha_3 + p_2\gamma_3 &= \beta_3.
\end{aligned} \tag{5}
$$

Значит, на медленной поверхности ($\varepsilon = 0$) искомые коэффициенты p_i, $i = 0, 1, 2$, вычисляются по следующим стандартным формулам: $p_i = \frac{\Delta^0_{p_i}}{\Delta^0}$. Здесь Δ^0 — определитель системы (5)

$$
\Delta^0 = \begin{vmatrix} 1 & \alpha_1 & \gamma_1 \\ 1 & \alpha_2 & \gamma_2 \\ 1 & \alpha_3 & \gamma_3 \end{vmatrix},
$$

а $\Delta^0_{p_0}, \Delta^0_{p_1}, \Delta^0_{p_2}$ — определители, получаемые из Δ^0 заменой j-го столбца, $j = 1, 2, 3$, соответствующим столбцом коэффициентов при p_0, p_1, p_2.

Нуль в верхнем индексе определителей означает, что коэффициенты p_i, $i = 0, 1, 2$ подсчитываются на медленной поверхности (при $\varepsilon = 0$).

Из теории линейных алгебраических систем вытекает следующее условие существования и единственности коэффициентов p_i: $\Delta_0 \neq 0$.

Имеет место следующее

достаточное условие существования и единственности коэффициентов системы (5), которая была получена из вырожденной системы (4).

Предложение 1. *Пусть данные* t_i, α_i, β_i, $i = 1, 2, 3$, *такие что выполнены условия 1)–5) и определитель системы (5) при этих значениях* t_i, $i = 1, 2, 3$, *не равен нулю. Тогда обратная задача имеет единственное решение, которое определяется стандартными формулами линейной алгебры.*

В дальнейших исследованиях мы предполагаем включить в рассмотрение случай $\varepsilon \neq 0$, т. е. провести анализ медленной подсистемы на листах интегрального многообразия с учетом числа обусловленности, а также снять ограничения на число переменных и количество листов медленной поверхности.

Автор выражает благодарность В.Г.Романову за давнюю совместную статью [8], которая инициировала данную работу, и коллегам за помощь в работе.

References

[1] A. Ermakova, *Macrokinetics methods used in mathematical modeling of chemical processes and reactors*, Institut kataliza SO RAN im. G.K. Boreskova, Novosibirsk, 2001. [in Russian]

[2] Yu.A. Mitropol'skii, O.B. Lykova, *Integral manifolds in nonlinear mechanics*, Nauka, Moscow, 1973. [in Russian]

[3] A.V. Vasil'eva, V. F. Butuzov, *Singularly perturbed equations in critical cases*, Moskov. Gos. Univ., Moscow, 1978. [in Russian]

[4] V.M. Gol'dshtein, V.A. Sobolev, *Qualitative analysis of singularly perturbed systems*, Inst. Math., Novosibirsk, 1988. [in Russian]

[5] N.V. Voropaeva, V.A. Sobolev, *Geometric decomposition of singularly perturbed systems*, Moscow: Fizmatlit, 2009. [in Russian]

[6] A.N. Tikhonov, *On the Dependence of solutions to differential equations on a small parameter*, Mat. Sb. (N.S.) **22**:2 (1948), 193–204. [in Russian] Zbl 0037.34401

[7] L.I. Kononenko, *On the smoothness of slow surfaces of singularly perturbed systems*, Sib. Zh. Ind. Mat., **5**:2 (2002), 109–125. [in Russian] Zbl 1024.34046

[8] V.G. Romanov, L.I. Slinyucheva, *Inverse problem for the first order linear hyperbolic system*, Matematicheskie problemy geofiziki. **3**, Novosibirsk, VC SO AN USSR, (1972) 187–215. [in Russian]

[9] S.I. Kabanikhin, *Inverse and ill-posed problems. Theory and applications*, Inverse and Ill-Posed Problems Series 55. Berlin: de Gruyter, 2012. Zbl 1247.65077

[10] L.I. Kononenko, *Direct and inverse problems for a singular system with slow and fast variables in chemical kinetics*, Vladikavkaz. Mat. Zh., **17**:1 (2015), 39–46. [in Russian]

[11] M.M. Lavrent'ev, V.G. Romanov, S.P. Shishatskij, *Ill-posed problems of mathematical physics and analysis* Transl. from the Russian by J. R. Schulenberger, ed. by Lev J. Leifman. Translations of Mathematical Monographs, 64. Providence, R.I.: American Mathematical Society (AMS). VI, 1986. Zbl 0593.35003

Larisa Ivanovna Kononenko
Sobolev Institute of Mathematics,
pr. Koptyuga, 4,
630090, Novosibirsk, Russia
E-mail address: `volok@math.nsc.ru`