S©MR ISSN 1813-3304

СИБИРСКИЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ
МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИЗВЕСТИЯ

Siberian Electronic Mathematical Reports

http://semr.math.nsc.ru

Том 15, стр. 48–53 (2018) УДК 541.124+517.9
DOI 10.17377/semi.2018.15.006 MSC 92E20, 34A55

ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ КАК КОМПОЗИЦИЯ БИНАРНЫХ СООТВЕТСТВИЙ

А.Е. ГУТМАН, Л.И. КОНОНЕНКО

Abstract. Binary correspondences are employed for formalization of the notion of problem, definition of the basic components of problems, their properties, and constructions (the condition of a problem, its data and unknowns, solvability and unique solvability of a problem, inverse problem, and composition of problems). As an illustration, we consider a system of differential equations which describe a process in chemical kinetics. Within the study of the inverse problem, a criterion is established for linear independence of functions in terms of finite sets of their values.

Keywords: differential equation, chemical kinetics, inverse problem, linear independence, binary correspondence, solvability, composition.

1. Понятие задачи как бинарного соответствия

Мы используем бинарные соответствия для простой формализации понятия задачи, основных компонентов задач, их свойств и конструкций — таких, как условие задачи, ее данные и искомые, разрешимость и однозначная разрешимость задачи, обратная задача и композиция задач. Более детально такой подход изложен в [1].

1.1. *Задача* — это соответствие между элементами двух множеств, т. е. тройка $P = (A, B, C)$, где A и B — произвольные множества и $C \subseteq A \times B$. Множества A, B и C обозначаются соответственно $\operatorname{Dom} P$, $\operatorname{Im} P$ и $\operatorname{Gr} P$ и называются *областью данных*, *областью искомых* и *условием* задачи P.

Gutman, A.E., Kononenko, L.I., Inverse problem of chemical kinetics as a composition of binary correspondences.

Работа второго автора поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект № 18-01-00057).

Поступила 4 декабря 2017 г., опубликована 26 января 2018 г.

Включение $(a,b) \in \operatorname{Gr} P$ записывается в виде $P(a,b)$ и трактуется как условие, выражающее соответствие искомого b данному a. Таким образом, для задачи P подразумевается следующее неформальное прочтение:

Для данных $a \in \operatorname{Dom} P$ найти $b \in \operatorname{Im} P$,
удовлетворяющие условию $P(a,b)$.

1.2. *Решением* задачи P для данного $a \in \operatorname{Dom} P$ называется любое искомое $b \in \operatorname{Im} P$, удовлетворяющее условию $P(a,b)$. Множество всех решений задачи P для данного a обозначается символом $P[a]$. Таким образом,

$$P[a] \;=\; \{b \in \operatorname{Im} P : P(a,b)\}, \quad a \in \operatorname{Dom} P.$$

Задача P называется *разрешимой для* данного a, если $P[a] \neq \varnothing$. Множество

$$\operatorname{dom} P \;:=\; \{a \in \operatorname{Dom} P : P[a] \neq \varnothing\}$$

называется *областью разрешимости* задачи P. В случае $\operatorname{dom} P = \operatorname{Dom} P$ задачу P называют *разрешимой* или, точнее, *всюду разрешимой*.

1.3. Задача P *однозначно разрешима для* $a \in \operatorname{Dom} P$, если для данного a задача P имеет единственное решение, т. е. $P[a] = \{b\}$, где $b \in \operatorname{Im} P$. Соответствующее решение b обозначается через $P^{\mathrm{s}}(a)$. Множество

$$\operatorname{dom} P^{\mathrm{s}} \;:=\; \{a \in \operatorname{Dom} P : P \text{ однозначно разрешима для } a\}$$

называется *областью однозначной разрешимости* задачи P, а функция

$$P^{\mathrm{s}}\colon\ \operatorname{dom} P^{\mathrm{s}} \to \operatorname{Im} P, \quad P^{\mathrm{s}}\colon a \mapsto P^{\mathrm{s}}(a)$$

называется *функцией решения* задачи P.

Говорят, что задача P *однозначно разрешима на множестве* $D \subseteq \operatorname{Dom} P$, если $D \subseteq \operatorname{dom} P^{\mathrm{s}}$. Задачу P называют *однозначно разрешимой* или, точнее, *всюду однозначно разрешимой*, если она однозначно разрешима на $\operatorname{Dom} P$, т. е. $\operatorname{dom} P^{\mathrm{s}} = \operatorname{Dom} P$.

1.4. *Обратной задачей* по отношению к задаче $P = \bigl(\operatorname{Dom} P, \operatorname{Im} P, \operatorname{Gr} P\bigr)$ называется обратное соответствие

$$P^{-1} \;:=\; \bigl(\operatorname{Im} P, \operatorname{Dom} P, (\operatorname{Gr} P)^{-1}\bigr),$$

где $(\operatorname{Gr} P)^{-1} = \{(b,a) : (a,b) \in \operatorname{Gr} P\}$.

Замечание. Если задача P моделирует какой-либо реальный физический процесс, то рассмотрение обратной задачи P^{-1} мотивировано поиском относительно простого формального закона, описывающего этот процесс с приемлемой точностью. Данными обратной задачи служат экспериментально измеряемые характеристики процесса, а искомыми являются, например, коэффициенты дифференциального уравнения, описывающего наблюдаемый процесс.

В случае, когда в основе задачи P лежит функциональное уравнение, с формальной точки зрения данными обратной задачи P^{-1} оказываются функции соответствующего класса, в то время как на практике в роли данных обратной задачи выступают не сами функции, а те или иные их характеристики, поддающиеся измерению, т. е. конечные наборы чисел.

Соответствующая корректировка обратной задачи реализуется посредством композиции (см. 1.5) задачи P^{-1} и простой вспомогательной задачи, формализующей связь между функциями и их измеряемыми характеристиками. (Пример такой корректирующей композиции приведен ниже в разделе 2.3.)

1.5. *Композицией задач* P и Q называется их композиция как соответствий, представляющая собой задачу

$$Q \circ P \,:=\, (\operatorname{Dom} P,\, \operatorname{Im} Q,\, \operatorname{Gr} Q \circ \operatorname{Gr} P)$$

с условием

$$\operatorname{Gr} Q \circ \operatorname{Gr} P \,=\, \bigl\{(a,c) \in \operatorname{Dom} P \times \operatorname{Im} Q : \\ (\exists\, b \in \operatorname{Im} P \cap \operatorname{Dom} Q)\ P(a,b)\ \&\ Q(b,c)\bigr\}.$$

Композиция $Q \circ P$ обычно рассматривается в случае $\operatorname{Im} P = \operatorname{Dom} Q$.

2. Обратная задача химической кинетики

В качестве иллюстрации мы рассмотрим сингулярно возмущенную систему обыкновенных дифференциальных уравнений, моделирующую процессы химической кинетики и горения (см., например, [2, 3]).

В ходе исследования соответствующей обратной задачи будет также установлен критерий линейной независимости функций в терминах конечных наборов их значений (см. 2.5).

2.1. Пусть $m, n \in \mathbb{N}$, $X := \mathbb{R}^m$, Y — область в $\mathbb{R}^n$, $T := \mathbb{R}$, $0 < \varepsilon_0 \in \mathbb{R}$. Положим $E := \{\varepsilon \in \mathbb{R} : 0 \leqslant \varepsilon \leqslant \varepsilon_0\}$, $F := C(X \times Y \times T \times E,\, \mathbb{R}^m)$, $G := C(X \times Y \times T \times E,\, \mathbb{R}^n)$.

Рассмотрим задачу P с областью данных $\operatorname{Dom} P = F \times G \times E$, областью искомых $\operatorname{Im} P = C^1(T, X) \times C^1(T, Y)$ и условием

$$P\bigl((f, g, \varepsilon), (x, y)\bigr) \ \Leftrightarrow\ \begin{cases} \ \ \dot{x}(t) = f\bigl(x(t), y(t), t, \varepsilon\bigr), \\ \varepsilon\, \dot{y}(t) = g\bigl(x(t), y(t), t, \varepsilon\bigr) \end{cases} \text{для всех } t \in T,$$

где $f \in F$, $g \in G$, $\varepsilon \in E$, $x \in C^1(T, X)$, $y \in C^1(T, Y)$.

Такая задача P исследуется методом интегральных многообразий [4–6], который служит удобным аппаратом изучения многомерных сингулярно возмущенных систем дифференциальных уравнений, позволяющим понижать размерность рассматриваемых систем.

В задаче P числу ε отводится роль «малого параметра», что приводит к разделению системы на «медленную» и «быструю» подсистемы:

$$\dot{x}(t) = f\bigl(x(t), y(t), t, \varepsilon\bigr) \ \text{ и } \ \varepsilon\, \dot{y}(t) = g\bigl(x(t), y(t), t, \varepsilon\bigr).$$

Решение задачи P в определенном смысле сводится к решению *вырожденной системы*, которая получается из исходной, если параметр ε формально положить равным нулю. Это следует из работ А. Н. Тихонова (см., например, [7]), в которых установлены факты о предельном переходе к решению вырожденной задачи при стремлении малого параметра к нулю.

2.2. Задача, обратная к P, состоит в нахождении неизвестных правых частей системы дифференциальных уравнений по некоторым данным о решении прямой задачи P. Тесная связь с вырожденной системой мотивирует рассмотрение случая $\varepsilon = 0$. Дополнительно предположим, что «медленная поверхность», определяемая уравнением

$$g\bigl(x, y, t, 0\bigr) = 0,$$

состоит из одного листа (относительно зависимости y от x), а правые части являются многочленами (что естественно для задач химической кинетики).

Итак, рассмотрим частный случай задачи P, в котором $m = n = 1$, $E = \{0\}$, функции $f \in F$ являются многочленами первой степени, а $g \in G$ удовлетворяет условиям теоремы о неявной функции, и поэтому уравнение

$$g\bigl(x(t), y(t), t, 0\bigr) = 0$$

можно заменить уравнением вида

$$y(t) = h\bigl(x(t), t\bigr).$$

В результате возникнет следующая задача.

Пусть $h \in C^1(\mathbb{R}^2)$. Рассмотрим задачу Q с областью данных $\operatorname{Dom} Q = \mathbb{R}^3$, областью искомых $\operatorname{Im} Q = C^1(\mathbb{R})^2$ и условием

$$Q\bigl(f, (x, y)\bigr) \quad \Leftrightarrow \quad \begin{cases} \dot{x}(t) = f_1 + f_2 x(t) + f_3 y(t), \\ y(t) = h\bigl(x(t), t\bigr) \end{cases} \quad \text{для всех } t \in \mathbb{R},$$

где $f = (f_1, f_2, f_3) \in \mathbb{R}^3$, $x, y \in C^1(\mathbb{R})$.

2.3. Обратная к Q задача Q^{-1}, формально соответствующая определению и имеющая пары функций $(x, y) \in C^1(\mathbb{R})^2$ в качестве данных, очень проста и не соответствует практике. В роли данных более адекватны конечные наборы значений функций или их производных, а не всюду определенные функции. Соответствующая корректировка обратной задачи реализуется посредством композиции задачи Q^{-1} и вспомогательной задачи R с областью данных $\operatorname{Dom} R = (\mathbb{R}^3)^3$, областью искомых $\operatorname{Im} R = C^1(\mathbb{R})^2$ и условием

$$R\bigl((t, \alpha, \beta), (x, y)\bigr) \quad \Leftrightarrow \quad \begin{cases} x(t_1) = \alpha_1, \quad x(t_2) = \alpha_2, \quad x(t_3) = \alpha_3, \\ \dot{x}(t_1) = \beta_1, \quad \dot{x}(t_2) = \beta_2, \quad \dot{x}(t_3) = \beta_3, \end{cases}$$

где $t, \alpha, \beta \in \mathbb{R}^3$, $x, y \in C^1(\mathbb{R})$.

По сравнению с формальной обратной задачей Q^{-1} композиция $Q^{-1} \circ R$ более практична и представляет собой следующую задачу: по данным $t, \alpha, \beta \in \mathbb{R}^3$ найти коэффициенты $f \in \mathbb{R}^3$, для которых существуют функции $x, y \in C^1(\mathbb{R})$, удовлетворяющие условию

$$\begin{cases} x(t_1) = \alpha_1, \; x(t_2) = \alpha_2, \; x(t_3) = \alpha_3, \\ \dot{x}(t_1) = \beta_1, \; \dot{x}(t_2) = \beta_2, \; \dot{x}(t_3) = \beta_3, \\ \dot{x}(t) = f_1 + f_2 x(t) + f_3 y(t) \quad \text{для всех } t \in \mathbb{R}, \\ y(t) = h\bigl(x(t), t\bigr) \quad \text{для всех } t \in \mathbb{R}. \end{cases}$$

2.4. Сформулированный ниже результат получен в [8].

Теорема 1. *Если $t, \alpha \in \mathbb{R}^3$ удовлетворяют условию*

$$\Delta := \begin{vmatrix} 1 & \alpha_1 & h(\alpha_1, t_1) \\ 1 & \alpha_2 & h(\alpha_2, t_2) \\ 1 & \alpha_3 & h(\alpha_3, t_3) \end{vmatrix} \neq 0$$

то при любых $\beta \in \mathbb{R}^3$ задача $Q^{-1} \circ R$ однозначно разрешима для данных (t, α, β) и ее решение $(f_1, f_2, f_3) = (Q^{-1} \circ R)^{\mathrm{s}}(t, \alpha, \beta)$ вычисляется по классическим формулам Крамера

$$f_i = \Delta_i / \Delta,$$

где Δ_i — определитель матрицы, полученной из приведенной выше матрицы заменой i-го столбца столбцом $\beta = (\beta_1, \beta_2, \beta_3)$.

2.5. Следующий критерий позволяет выяснить, в каких случаях существует набор чисел t_i, удовлетворяющий условию теоремы 1.

Теорема 2. *Пусть $n \in \mathbb{N}$, T — произвольное множество. Семейство функций $\varphi_1, \dots, \varphi_n \colon T \to \mathbb{R}$ линейно независимо (в векторном пространстве $\mathbb{R}^T$) тогда и только тогда, когда существуют точки $t_1, \dots, t_n \in T$, удовлетворяющие условию*

$$\begin{vmatrix} \varphi_1(t_1) & \varphi_2(t_1) & \dots & \varphi_n(t_1) \\ \varphi_1(t_2) & \varphi_2(t_2) & \dots & \varphi_n(t_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_1(t_n) & \varphi_2(t_n) & \dots & \varphi_n(t_n) \end{vmatrix} \neq 0\,. \tag{1}$$

Доказательство. Достаточность очевидна. Докажем необходимость индукцией по n. Для удобства введем обозначение для матрицы, фигурирующей в (1):

$$M_n(\varphi_1, \dots, \varphi_n;\, t_1, \dots, t_n) \;:=\; \begin{pmatrix} \varphi_1(t_1) & \varphi_2(t_1) & \dots & \varphi_n(t_1) \\ \varphi_1(t_2) & \varphi_2(t_2) & \dots & \varphi_n(t_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_1(t_n) & \varphi_2(t_n) & \dots & \varphi_n(t_n) \end{pmatrix}.$$

Случай $n = 1$ тривиален: если семейство $\{\varphi_1\}$ линейно независимо, то $\varphi_1 \neq 0$, а значит, для некоторой точки $t_1 \in T$ мы имеем $\varphi_1(t_1) \neq 0$, т. е. $|M_1(\varphi_1;\, t_1)| \neq 0$.

Пусть $n \in \mathbb{N}$ и пусть для любого линейно независимого семейства функций $\varphi_1, \dots, \varphi_n \colon T \to \mathbb{R}$ существуют точки $t_1, \dots, t_n \in T$, удовлетворяющие (1). Рассмотрим линейно независимое семейство $\varphi_1, \dots, \varphi_n, \varphi_{n+1} \colon T \to \mathbb{R}$. По предположению индукции имеются такие точки $t_1, \dots, t_n \in T$, что матрица

$$M \;:=\; M_n(\varphi_1, \dots, \varphi_n;\, t_1, \dots, t_n)$$

обратима. Нам предстоит найти точку $t \in T$, обеспечивающую обратимость матрицы

$$\overline{M}(t) \;:=\; M_{n+1}(\varphi_1, \dots, \varphi_n, \varphi_{n+1};\, t_1, \dots, t_n, t).$$

Допустим вопреки доказываемому, что $|\overline{M}(t)| = 0$ для всех $t \in T$. Тогда для каждой точки $t \in T$ существует кортеж $0 \neq \bigl(\alpha_1(t), \dots, \alpha_{n+1}(t)\bigr) \in \mathbb{R}^{n+1}$, удовлетворяющий условию

$$\overline{M}(t)\bigl(\alpha_1(t), \dots, \alpha_{n+1}(t)\bigr) = 0$$

или, что то же самое,

$$\begin{cases} \varphi_1(t_1)\,\alpha_1(t) + \dots + \varphi_n(t_1)\,\alpha_n(t) + \varphi_{n+1}(t_1)\,\alpha_{n+1}(t) = 0, \\ \varphi_1(t_2)\,\alpha_1(t) + \dots + \varphi_n(t_2)\,\alpha_n(t) + \varphi_{n+1}(t_2)\,\alpha_{n+1}(t) = 0, \\ \dots, \\ \varphi_1(t_n)\,\alpha_1(t) + \dots + \varphi_n(t_n)\,\alpha_n(t) + \varphi_{n+1}(t_n)\,\alpha_{n+1}(t) = 0, \end{cases} \tag{2}$$

$$\varphi_1(t)\,\alpha_1(t) \;+ \dots +\; \varphi_n(t)\,\alpha_n(t) \;+\; \varphi_{n+1}(t)\,\alpha_{n+1}(t) \;= 0. \tag{3}$$

Подсистема (2) равносильна равенству

$$M\bigl(\alpha_1(t), \dots, \alpha_n(t)\bigr) + \alpha_{n+1}(t)\bigl(\varphi_{n+1}(t_1), \dots, \varphi_{n+1}(t_n)\bigr) = 0,$$

благодаря которому

$$\bigl(\alpha_1(t), \dots, \alpha_n(t)\bigr) = -\alpha_{n+1}(t)\, M^{-1}\bigl(\varphi_{n+1}(t_1), \dots, \varphi_{n+1}(t_n)\bigr). \tag{4}$$

С учетом (4) в случае $\alpha_{n+1}(t) = 0$ мы бы имели $\alpha_1(t) = \cdots = \alpha_{n+1}(t) = 0$, что противоречит условию $\big(\alpha_1(t), \ldots, \alpha_{n+1}(t)\big) \neq 0$. Следовательно, $\alpha_{n+1}(t) \neq 0$ и

$$\left(\tfrac{\alpha_1(t)}{\alpha_{n+1}(t)}, \ldots, \tfrac{\alpha_n(t)}{\alpha_{n+1}(t)}\right) = -M^{-1}\big(\varphi_{n+1}(t_1), \ldots, \varphi_{n+1}(t_n)\big). \tag{5}$$

Согласно (5) числа $\beta_1 := \frac{\alpha_1(t)}{\alpha_{n+1}(t)}$, ..., $\beta_n := \frac{\alpha_n(t)}{\alpha_{n+1}(t)}$ не зависят от t. Осталось заметить, что из (3) следует

$$\beta_1\varphi_1(t) + \cdots + \beta_n\varphi_n(t) + \varphi_{n+1}(t) = 0 \quad \text{для всех } t \in T$$

вопреки линейной независимости семейства функций $\varphi_1, \ldots, \varphi_n, \varphi_{n+1}$. □

2.6. Из теорем 1 и 2 непосредственно вытекает следующее условие однозначной разрешимости «обратной задачи» $Q^{-1} \circ R$.

Теорема 3. *В рамках задачи Q рассмотрим функции $e, x, y\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, где $y(t) = h\big(x(t), t\big)$ и $e(t) = 1$ для всех $t \in \mathbb{R}$. Если функции e, x, y линейно независимы, то существуют такие числа t_1, t_2, t_3, что при любых $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ задача $Q^{-1} \circ R$ однозначно разрешима для данных t_1, t_2, t_3, $x(t_1), x(t_2), x(t_3)$, $\beta_1, \beta_2, \beta_3$.*

References

[1] A.E. Gutman, L.I. Kononenko, *Formalization of inverse problems and its applications*, Sib. zhurn. chist. i prikl. matem., **16**:1 (2017), 49–56.

[2] L.I. Kononenko, *Qualitative analysis of singularly perturbed systems with one or two slow and fast variables*, Sib. Zh. Ind. Mat., **5**:4 (2002), 55–62. MR1960785

[3] L.I. Kononenko, *Relaxations in singularly perturbed planar systems*, Vestn. Novosib. Gos. Univ., Ser. Mat. Mekh. Inform., **9**:4 (2009), 45–50. Zbl 1249.34159

[4] Yu.A. Mitropolsky, O.B. Lykova, *Integral manifolds in nonlinear mechanics*, M.: Nauka, 1963.

[5] A.V. Vasil'eva, V.F. Butuzov, *Singularly perturbed equations in critical cases*, M.: Nauka, 1978. MR0525580

[6] V.M. Goldstein, V.A. Sobolev, *Qualitative analysis of singularly perturbed systems*, Novosibirsk: Sobolev Institute of Mathematics, 1988. Zbl 0752.34033

[7] A.N. Tikhonov, *On independence of solutions to differential equations on a small parameter*, Matem. Sbornik, **22 (64)**:2 (1948), 193–204. MR0025047

[8] L.I. Kononenko, *Identification problem for singular systems with small parameter in chemical kinetics*, Siberian Electronic Mathematical Reports, **13** (2016), 175–180. MR3506883

Alexander Efimovich Gutman

Sobolev Institute of Mathematics,
Academician Koptyug av., 4,
630090, Novosibirsk, Russia

Novosibirsk State University,
Pirogova, 2, 630090, Novosibirsk, Russia

E-mail address: `gutman@math.nsc.ru`

Larisa Ivanovna Kononenko

Sobolev Institute of Mathematics,
Academician Koptyug av., 4,
630090, Novosibirsk, Russia

Novosibirsk State University,
Pirogova, 2, 630090, Novosibirsk, Russia

E-mail address: `larak@math.nsc.ru`