

ЖУРНАЛ СРЕДНЕВОЛЖСКОГО МАТЕМАТИЧЕСКОГО ОБЩЕСТВА

Том 12, № 3



2010

СРЕДНЕВОЛЖСКОЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОБЩЕСТВО

МОРДОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ Н. П. ОГАРЕВА

Журнал Средневолжского математического общества

Том 12, № 3

Издается с декабря 1998 года
Выходит четыре раза в год

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ: В. Ф. Тишкин (главный редактор),
М. Т. Терехин (зам. главного редактора),
Л. А. Сухарев (ответственный секретарь),
П. А. Шаманаев (зам. отв. секретаря),
И. В. Бойков, П. А. Вельмисов, В. К. Горбунов,
В. З. Гринес, Ю. Н. Дерюгин, А. Ф. Зубова,
Е. Б. Кузнецов, Б. В. Логинов, С. И. Спивак,
В. А. Треногин

САРАНСК

2010

«Журнал Средневолжского математического общества», публикует обзорные статьи по наиболее актуальным проблемам математики, краткие сообщения Средневолжского математического общества и информацию о математической жизни в России и за рубежом. Предназначается для научных работников, преподавателей, аспирантов и студентов старших курсов.

Журнал зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор). Свидетельство о регистрации средства массовой информации ПИ № ФС77-37887 от 23 октября 2009 года.

Учредитель — Межрегиональная общественная организация «Средневолжское математическое общество», Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Мордовский государственный университет имени Н. П. Огарева».

Журнал Средневолжского математического общества. Том 12, № 3

Компьютерная верстка: Атряхин В. А.

Корректоры: Егорова Д. К., Ляпина Ю. В.

Издается в НИИ математики Мордовского государственного университета им. Н.П. Огарева

Адрес редакции: 430000, г. Саранск, ул. Большевикская, 68, НИИ математики (комн. 210).

Тел.: (834-2) 23-32-05

E-mail для статей: journal@svmo.ru

E-mail для организационных вопросов: svmo@svmo.ru, conf@svmo.ru

Web: <http://www.svmo.ru>

ISSN 2079 – 6900

С 2010 г. полнотекстовая версия журнала размещается на сайте Общероссийского математического портала Math-Net.Ru

Содержание

РЕДАКЦИОННАЯ СТРАНИЦА	6
-----------------------------	---

В.А. Треногин, Б.В. Логинов, Л.Р. Ким-Тян

Устойчивость решений задачи Коши по линейному приближению, уравнение разветвления в корневом подпространстве, симметрия	8
---	---

1. Введение	8
2. Линейное приближение и устойчивость по Ляпунову	10
3. Нелинейное уравнение и устойчивость по Ляпунову	12
4. Негрупповая симметрия - сплетение	14

А. В. Анкилов, П. А. Вельмисов, Ю. А. Решетников

Математическое моделирование одной динамической системы типа «тандем»	18
---	----

1. Постановка задачи	18
2. Решение аэрогидродинамической части задачи	19
3. Заключение	25

О. А. Перегудова

Об управлении движением механических систем с неизвестными параметрами на основе функции насыщения	28
--	----

1. Введение	28
2. Постановка задачи	29
3. Решение задачи слежения	30

А.М. Ахтямов, А.Р. Аюпова

О решении задачи диагностирования дефектов в виде малой полости в стержне	37
---	----

1. Введение	37
2. Прямая задача о колебаниях балки	37
3. Определение объемов двух полостей по двум собственным частотам	39

В СРЕДНЕВОЛЖСКОМ МАТЕМАТИЧЕСКОМ ОБЩЕСТВЕ

Э. Р. Ахматсафина

Метод поиска интервалов неопределенности кинетических констант химической реакции	43
---	----

1. Введение	43
2. Постановка задачи и схема поиска областей неопределенности	44
3. Объект исследования	45
4. Программная реализация	46
5. Результаты расчетов	47
6. Заключение	47

И. В. Ахметов, И. М. Губайдуллин, А. В. Балаев

Разработка кинетической модели реакции получения метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты	50
1. Введение	50
2. Кинетическая модель	51
3. Результаты и выводы	51

А. В. Балаев, Н. М. Сафуанова

Дискриминация вида кинетического уравнения для реакции алкилирования бензола этиленом	55
1. Введение	55
2. Дискриминация вида кинетических уравнений	56

Е. С. Дюба

Краевая задача управляемой системы дифференциальных уравнений с интегральным критерием качества	59
1. Введение	59
2. Постановка задачи	59
3. Условия существования векторов α_0 , β_0 и u_0	60

И.В. Zubov, А.Ф. Zubova, С.А. Стрекопытов

Вопросы о робастной устойчивости и неустойчивости	65
---	----

Ю. В. Мартыненко

Исследование устойчивости метода вариационных сплайнов	71
1. Введение	71
2. Построение функции устойчивости	72
3. А-устойчивость метода ВС	74

Д. Ф. Масков, И. М. Губайдуллин

Автоматизированная система исследования и анализа механизмов химических реакций	77
1. Введение	77
2. Анализ требований	77
3. Этапы проектирования	78
4. Вычислительная архитектура	79
4.1. Метод распараллеливания кинетической задачи	80
4.2. Расчет кинетических параметров	81
5. Базы данных	82
6. Выводы	84

Р. Ф. Миникаев, З. Я. Якупов

Нейронные сети и карты Кохонена	86
1. Введение	86
2. Инициализация	86

3.	Процесс самоорганизации	88
4.	Модификация определения понятия «победитель»	93

Э. Н. Мифтахов, Л. И. Насырова

	Математическое моделирование технологической схемы процесса сополимеризации.	96
--	--	----

1.	Кинетическая схема сополимеризации бутадиена со стиролом	96
2.	Математическая модель	97

Д. Ю. Моторина

	Построение алгоритма синтеза управления с насыщением в задаче слежения для колесного мобильного робота	102
--	--	-----

1.	Введение	102
2.	Задача слежения для мобильного робота с роликонесущими колесами	103
3.	Алгоритм построения управления	106
4.	Реализация алгоритма и численное моделирование	107
5.	Заключение	108

В. Н. Попов, И. В. Тестова, А. А. Юшканов

	Аналитическое решение задачи о течении Пуазейля	111
--	---	-----

1.	Введение	111
2.	Постановка задачи. Построение функции распределения молекул газа	112
3.	Вычисление макропараметров газа в канале	118
4.	Заключение	120

Е. В. Степашина, А. И. Байтимерова, С. А. Мустафина

	О свойствах решений задач моделирования каталитических процессов с переменным реакционным объемом	122
--	---	-----

1.	Двудольные графы реакций	122
2.	Свойства решений уравнений на графах	123
3.	Математическая модель процесса в РИС на двудольном графе	126

А. О. Сыромясов

	Частные решения уравнения Пуассона с правой частью специального вида	129
--	--	-----

1.	Введение	129
2.	Представление решения в виде обобщенного полинома	130
3.	Случай целых отрицательных степеней $ \vec{x} $	132

Б. Х. Турметов, Б. Т. Торекбек

	О разрешимости аналога третьей краевой задачи с граничным оператором дробного порядка	135
--	---	-----

1.	Введение	135
2.	Свойства оператора B^m	135
3.	Постановка и решение основной краевой задачи.	139

А. А. Юнусов, И. М. Губайдуллин, М. Р. Файзуллин

Анализ алгоритмов решения задач химической кинетики с использованием GPGPU	146
1. Введение	146
2. Математическое описание	147
3. Методы решения	148
3.1. Метод случайного поиска	148
3.2. Генетический алгоритм со случайными отклонениями согласно распределению Коши:	149
3.3. Генетический алгоритм с мутацией в виде покоординатного спуска:	149
3.4. Краткое теоретическое сравнение методов	150
4. Условия вычислительного эксперимента	150
5. Результаты и заключение	150

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ**В. В. Дикусар, Н. В. Зубов, С. В. Зубов**

Теоремы существования автоколебания	153
---	-----

А. В. Зубов, П. А. Зубов, М. В. Стрекопытова

Несколько теорем о поведении семейств сильно сверхустойчивых матриц	156
---	-----

Правила оформления рукописей для публикации в журнале «Журнал СВМО»	159
Алфавитный указатель	161

ОТ РЕДАКЦИИ

С этого года выходит один том журнала в четырех номерах в год. В этом номере публикуются работы, в основном, начинающих и молодых ученых, чьи выступления вызвали интерес участников IX конференции «Дифференциальные уравнения и их приложения в математическом моделировании» с участием зарубежных ученых. Конференция проводилась в Саранске на базе ГОУВПО «МГУ им. Н. П. Огарёва» 1 – 3 июля 2010 года при поддержке РФФИ, грант №10-01-06048-г.

Редакция журнала желает авторам творческих успехов!

УДК 517.9

Устойчивость решений задачи Коши по линейному приближению, уравнение разветвления в корневом подпространстве, симметрия

© В.А. Треногин¹, Б.В. Логинов², Л.Р. Ким-Тян³

Аннотация. Результаты В.А. Треногина [7, 8] об устойчивости решений задачи Коши для дифференциальных уравнений в банаховом пространстве по линейному приближению в случае вырожденной линеаризации изложены с точки зрения уравнения разветвления в корневом подпространстве. Сделаны выводы для условий групповой и негрупповой симметрии уравнения.

Ключевые слова: ДУ в банаховом пространстве, устойчивость, уравнение разветвления в корневом подпространстве, симметрия.

1. Введение

В работе [1] исследована устойчивость решений задачи Коши для дифференциального уравнения (ДУ) в банаховом пространстве E

$$\dot{x} = Bx - R(x, t), \quad x(0) = 0 \quad (1.1)$$

в следующих предположениях I B - замкнутый плотно определенный оператор, $R(B) \subset E$, - производящий оператор сильно непрерывной полугруппы $U(t)$ класса C_0 с экспоненциальным убыванием $\|U(t)\| \leq M \exp(-\alpha t)$, $\alpha > 0$ II. Нелинейный оператор $R(x, t)$ определен и непрерывен $\forall t \in \mathbb{R}^+$ и $x \in S_\rho(0)$ и удовлетворяет локальному условию Липшица $\|R(x_1, t) - R(x_2, t)\| \leq C \max^\beta(\|x_1\|, \|x_2\|) \|x_1 - x_2\|$, $x_1, x_2 \in S_\rho(0)$. Доказано существование определенного при $\|x_0\| \leq \rho_*$, единственного в предположении $\|x(t, x_0)\| \leq r_* \exp(-\alpha t)$ обобщенного решения (1.1), непрерывного по x_0 в пространстве C_α абстрактных функций на полуоси с нормой $\|x\|_\alpha = \sup_{t \in \mathbb{R}} \|x(t)\| \exp(\alpha t)$ и, тем самым асимптотическая устойчивость обобщенного тривиального решения задачи (1.1). При гёльдеровости по t с показателем $\delta \in (0, 1]$ III : существует постоянная $C_1 > 0$, такая, что $\forall t, h \in \mathbb{R}$ и $\forall x \in S$, $\|R(x, t+h) - R(x, t)\| \leq C_1 \|x\|^{1+\beta} h^\delta$, доказано, что обобщенное решение $x(t, x_0)$ является классическим.

Здесь уравнение (1.1) рассматривается в условиях групповой симметрии, т.е. существования представления L_g группы G , сплетающего операторы B и R

$$BL_g x = L_g Bx, \quad x \in D(B), \quad R(L_g x, t) = L_g R(x, t)$$

Использованы терминология и обозначения [2,3]. Всюду далее предполагается, что если $G = G_r = G_r(a)$, $a = (a_1, \dots, a_r)$ непрерывная группа, то она является r -мерным дифференцируемым многообразием, удовлетворяющим условию

¹Профессор кафедры «Математика», Национальный исследовательский технологический Университет «МИСиС», Москва; vtrenogin@mail.ru

²Профессор кафедры «Высшая математика», Ульяновский Технический Университет, Ульяновск; loginov@ulstu.ru

³Доцент кафедры «Математика», Национальный исследовательский технологический Университет «МИСиС», Москва; kim-tyan@mail.ru

A_1 : отображение $a \mapsto L_{g(a)}x_0$, действующее из окрестности единичного элемента в пространство E принадлежит классу C^1 . Поэтому в силу доказанной в [1] единственности решений $U(t)x_0$ и $U(t)L_gx_0$ однородного уравнения (1.1) в классе C_α , т.к. обе функции $L_gU(t)x_0$ и $U(t)L_gx_0$ удовлетворяют однородному уравнению (1.1) с начальным значением L_gx_0 , представление L_g сплетает полугруппу: $L_gU(t)x_0 = U(t)L_gx_0$. В конкретной ситуации начальные значения x_0 принадлежат одному из неприводимых инвариантных подпространств пространства E при действии L_g , тогда решение линеаризованной задачи Коши принадлежит этому же инвариантному подпространству.

Для неоднородного уравнения обобщенное решение задачи Коши, т.е. решение интегрального уравнения

$$x(t) = U(t)x_0 - \int_0^t U(t-s)R(x(s), s) \quad (1.2)$$

в предположении III является классическим. В силу сплетаемости оператора $R(x, t)$ и полугруппы $U(t)$ представлением L_g для нелинейной задачи Коши (1.1) возникает восходящая к Л.В. Овсянникову в его "Программе Подмодели"[4] задача об асимптотической устойчивости решений (1.1), инвариантных относительно подгрупп, когда начальное значение x_0 сохраняется при действии операторов представления подгруппы $H \subset G$ и решение $x(t)$ ищется в подпространстве $E(H) = \{x \in E \mid Hx = x\}$. Для компактных групп G эта задача решается также с помощью техники неприводимых инвариантных подпространств [3]. В общем случае непрерывных групп и их непрерывных подгрупп задача об асимптотически устойчивых по первому приближению решений (1.1), инвариантных относительно подгрупп $H \subset G$ сводится согласно [5,6] к перечислению классов подобных подгрупп.

В автономном случае уравнения (1.1) эти результаты сохраняются в предположениях I и II.

В работе [7]([8]) рассмотрен принципиально другой случай, когда фредгольмов оператор B не является непрерывно обратимым и $E = N(B) \dot{+} R(B)$, т.е. жордановы цепочки (ЖЦ) нулей операторов B и B^* имеют единичные длины (существует полный жорданов набор (ЖН) к нулям B и B^*) и в предположении экспоненциального убывания полугруппы на $R(B)$ и $PR(x) = 0$, P - проектор на $N(B)$ (экспоненциального убывания на $E^{\infty-k_B}$, $PR(x) = 0$, P - проектор на корневое подпространство) доказано, что $\exists \rho > 0$, $r > 0$, такие что при всех x_0 , $\|x_0\| \leq \rho$ задача Коши

$$\dot{x} = Bx - R(x), \quad x(0) = x_0 \quad (1.3)$$

имеет в шаре $\|x\| < r$ единственное ограниченное на $\mathbb{R}^+$ обобщенное решение $x = x(t)$, являющееся классическим при $x_0 \in D(B)$, т.е. имеет место только устойчивость по Ляпунову; если, кроме того $Px_0 = 0$, то (1.1) имеет в шаре $\|x\|_\alpha < r$ единственное обобщенное решение $x = x(t) \in C_\alpha(E)$, являющееся классическим при $(I - P)x_0 \in D(B)$, т.е. имеет место условная асимптотическая устойчивость (при $x_0 \in E^{\infty-k_B}$, $\|x_0\| < \rho$ задача Коши(1.3) имеет в шаре $\|x\|_\alpha < r$ единственное обобщенное решение $x = x(t) \in C_\alpha(E)$ являющееся классическим при $x_0 \in E^{\infty-k_B} \cap D(B)$ и тем самым условно асимптотически устойчивым). Основной целью данной работы является изложение результатов [8] с помощью техники уравнений разветвления в корневых подпространствах и исследование устойчивости решений задачи Коши (1.3) на основе статей [7,8] в условиях групповой (или негрупповой) симметрии (сплетения) в случае, когда фредгольмов оператор B не является непрерывно обратимым. В дальнейшем авторы намереваются в

развитие этих результатов применить их к исследованию устойчивости разветвляющихся решений уравнений (1.1) и (1.2) в том числе в условиях симметрии.

Полученные результаты поддержаны проектом No. 2.1.1/6194 программы Развитие научного потенциала высшей школы Минобразования РФ и частично грантами РФФИ-АН Румынии №07-01-91680-а и РЦП Научные и научно-педагогические кадры инновационной России ГК № П1112.

2. Линейное приближение и устойчивость по Ляпунову

Изложим результаты [7,8] в удобной нам интерпретации, рассматривая автономное уравнение (1.3) в следующих предположениях

I. B – замкнутый линейный фредгольмов оператор с плотной в E областью определения $D(B)$ и областью значений $R(B) \subset E$ – производящий оператор сильно непрерывной полугруппы $U(t)$ класса C_0 ;

II. $R(x)$ – достаточно гладкий нелинейный оператор, $R(0) = 0$, определенный в $\Omega(0)$, удовлетворяющий в $\Omega(0)$ локальному условию Липшица

$$\|R(x_1) - R(x_2)\| \leq C \max^{\beta}(\|x_1\|, \|x_2\|) \|x_1 - x_2\| \quad (2.1)$$

III. Базисным элементам $\{\varphi_i\}_1^n$ в $N(B)$ и дефектным функционалам $\{\psi_i\}_1^n$ в $N^*(B)$ оператора B отвечают полные жордановы наборы (ЖН) $\{\varphi_i^{(j)}\}_{i=1, j=1}^{n, p_i}$ и $\{\psi_i^{(j)}\}_{i=1, j=1}^{n, p_i}$.

Отметим здесь, что, согласно [2] и [9-11] указанные ЖН всегда можно выбрать удовлетворяющими условиям биортогональности

$$\begin{aligned} B\varphi_i^{(s)} &= \varphi_i^{(s-1)}, \langle \varphi_i^{(s)}, \psi_j^{(1)} \rangle = 0, s = \overline{2, p_i} \\ B^*\psi_k^{(s)} &= \psi_k^{(s-1)}, \langle \varphi_i^{(1)}, \psi_k^{(s)} \rangle = 0, s = \overline{2, p_i}, \\ \langle \varphi_i^{(p_i+1-s)}, \psi_j^{(l)} \rangle &= \delta_{ij} \delta_{sl}, z_i^{(s)} = \varphi_i^{(p_i+1-s)}; \langle \varphi_i^{(s)}, \psi_j^{(p_j+1-l)} \rangle = \delta_{ij} \delta_{sl}, \gamma_j^{(k)} = \psi_j^{(p_j+1-k)} \end{aligned} \quad (2.2)$$

позволяющими определить проекторы

$$\begin{aligned} P &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{p_i} \langle \cdot, \gamma_i^{(j)} \rangle \varphi_i^{(j)} : E \rightarrow K(B, I) = E^{k_B} = \text{span}\{\varphi_1^{(1)}, \dots, \varphi_1^{(p_1)}, \dots, \varphi_n^{(p_1)}, \dots, \varphi_n^{(p_n)}\} \\ Q &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{p_i} \langle \cdot, \psi_i^{(j)} \rangle z_i^{(j)} : E \rightarrow E_{k_B} = \text{span}\{\varphi_1^{(p_1)}, \dots, \varphi_1^{(1)}, \dots, \varphi_n^{(p_n)}, \dots, \varphi_n^{(1)}\}, \end{aligned}$$

порождающие разложения $E = E^{k_B} \dot{+} E^{\infty-k_B} = E_{k_B} \dot{+} E^{\infty-k_B}$ (подпространства $E^{k_B} = E_{k_B}$ отличаются лишь нумерацией базисных элементов). При этом выполнены соотношения сплетения $QB = BP$ и $BQ = PB$ и равенства $B\varphi = \mathcal{A}_B z$, $\varphi = \mathcal{A}_I z$, $\psi = \mathcal{A}_I \gamma$, где $\varphi = (\varphi_1^{(1)}, \dots, \varphi_1^{(p_1)}, \dots, \varphi_n^{(1)}, \dots, \varphi_n^{(p_n)})$, векторные элементы z , ψ и γ вводятся аналогично, $\mathcal{A}_B = \text{diag}(B^1, \dots, B^n)$, $\mathcal{A}_I = \text{diag}(A^1, \dots, A^n)$,

$$\begin{aligned} B^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 1 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ A^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ 0 & 0 & \dots & 1 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix} - p_i \times p_i - \text{матрицы} \end{aligned}$$

IV. Предполагается экспоненциальное убывание полугруппы на $E^{\infty-k_B}$, т.е. $\|U(t)x\| \leq M \exp(-\alpha t) \|x\|$, $\forall x \in E^{\infty-k_B}$, $t \in [0, +\infty)$; $M, \alpha > 0$. В следующих двух утверждениях о гладкости полугруппы рассматривается линейная задача Коши

$$\dot{x} = Bx, \quad x(0) = x_0 \quad (2.3)$$

Л е м м а 2.1. 1° Если $D(B)$ плотна в E и оператор B имеет регулярные точки, то область определения $D(B^p)$ плотна в E при любых $p = 2, 3, \dots$

2° Если $x_0 \in D(B^p)$, то решение $U(t)x_0$ уравнения (2.3) при $t \geq 0$ имеет $p-1$ непрерывную производную и производную порядка p , непрерывную при $t > 0$

1° Ограниченный оператор $R_\lambda(B) = (B - \lambda I)$, $\lambda \in \rho(B)$ отображает E на $D(B)$, а $D(B)$ на $D(B^2)$, и т.д.

2° На $D(B)$ оператор B коммутирует с полугруппой, откуда следует непрерывность $U'(t)x_0$ при $t > 0$ и если $x_0 \in D(B^2)$, то $U'(t)x_0 = BU(t)x_0 = U(t)Bx_0$ есть решение задачи Коши (2.3) с начальным условием $Bx_0 \in D(B)$, т.е. $U(t)x_0$ непрерывна при $t \geq 0$, а $U'(t)$ непрерывна при $t > 0$. Далее по индукции.

Т е о р е м а 2.1. Пусть B - абстрактный эллиптический оператор с экспоненциально убывающей полугруппой и в условиях Леммы 2.1 $p = \max_{1 \leq i \leq n} p_i$. Тогда при $t > 0$ полугруппа $U(t)$ p раз непрерывно дифференцируема и для любого $x_0 \in D(B^p)$

$$U^{(p)}(t)x_0 = B^p U(t)x_0 = -\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \lambda^p e^{\lambda t} R_\lambda(B)x_0 d\lambda \quad (2.4)$$

$R_\lambda = (B - \lambda I)^{-1}$ - резольвента B , и при $t > 0$ справедлива оценка $\|U^{(p)}(t)\| \leq M e^{-\alpha t} t^{-p}$, причем $x^{(p)}(0) = B^p x(0)$. Здесь Γ - контур, образованный двумя лучами в верхней и нижней полуплоскости, исходящими из точки $(\omega, 0)$, $\omega \geq a$, параллельными границе области $\Omega(a, \varphi)$, ограниченной двумя лучами, исходящими из точки $(a, 0)$, под углами φ и $-\varphi$ с отрицательными направлениями оси Ox . В [12] дано доказательство теоремы при $p = 1$, далее по индукции.

Л е м м а 2.2. [7, 8] Пусть выполнены условия I, III, а число α соответствует предположению IV. Тогда оператор $\tilde{B} = B - \alpha P$ непрерывно обратим и является производящим оператором сильно непрерывной полугруппы класса C_0 с экспоненциальным убыванием. Т.к. проекторы P и Q сплетают полугруппу $U(t)$, то $U(t)$ действует в инвариантных парах подпространств E_B^k , $E^{\infty-k_B}$ и $U(t)\varphi_i^{(k)} = \varphi_i^{(k)} + \frac{\varphi_i^{(k-1)}}{1!} + \dots + \frac{\varphi_i^{(1)}}{(k-1)!}$, $k = \overline{1, p_i}$.

Первое утверждение леммы является вариантом леммы Шмидта [2,13], доказанным в частности в [13]. Введем полугруппу $\tilde{U}(t) = U(t) \exp(-\alpha P t)$, тогда $\exp(-\alpha P t) P = \exp(-\alpha t) P \Rightarrow \forall x \in E, x = u + v, u = (I - P)x \in E^{\infty-k_B}, v = Px \in E^{k_B}$, $\tilde{U}(t)x = U(t) \exp(-\alpha P t)(u + v) = U(t)u + \exp(-\alpha t) U(t) P v = U(t)u + \exp(-\alpha t) Q U(t)v \Rightarrow \|\tilde{U}(t)x\| \leq M \exp(-\alpha t) \|x\|$, откуда следует неравенство IV с новым $\tilde{M}$ для любого $x \in E$. Второе утверждение следует из конечномерности E^{k_B} и сплетения полугруппы.

Действуя по схеме [7,8] запишем линейную задачу (2.3) в виде

$$\dot{x} = \tilde{B}x + \alpha v, \quad x(0) = x_0, \quad \tilde{B} = B - \alpha P, \quad Px(t) = v(t) \quad (2.5)$$

и применим к (2.3) оператор Q : $Q\dot{x} = B P x$. Возникает задача Коши для $v(t) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{p_i} \xi_{ij}(t) \varphi_i^{(j)} = \xi_i \cdot \varphi_i$,

$\dot{\xi}_{ip_i} = 0, \dot{\xi}_{ip_i-1} = \xi_{ip_i}, \dots, \dot{\xi}_{i2} = \xi_{i3}, \dot{\xi}_{i1} = \xi_{i2}, \xi_{ij}(0) = \langle x_0, \gamma_i^{(j)} \rangle = \langle x_0, \psi_i^{(p_i+1-j)} \rangle, i = \overline{1, n}$, единственное решение которой имеет вид

$$v(t) = \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^{p_i} \sum_{l=0}^{p_i-k} \langle x_0, \psi_i^{(p_i+1-k-l)} \rangle \frac{t^l}{l!} \varphi_i^{(k)}.$$

Применяя лемму 2.2, $\tilde{U}(t-s)\varphi_i^{(k)} = e^{-\alpha(t-s)}U(t-s)\varphi_i^{(k)}$, найдем обобщенное решение задачи Коши (2.5)

$$\begin{aligned} x &= \tilde{U}(t)x_0 + \alpha \int_0^t \tilde{U}(t-s)v(s)ds = \tilde{U}(t)x_0 + \alpha \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^{p_i} \sum_{l=1}^{p_i-k} \frac{\langle x_0, \psi_i^{(p_i+1-k-l)} \rangle}{l!} \int_0^t s^l \tilde{U}(t-s)\varphi_i^{(k)}ds = \\ &= \tilde{U}(t)x_0 + \alpha \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^{p_i} \sum_{l=0}^{p_i-k} \frac{\langle x_0, \psi_i^{(p_i+1-k-l)} \rangle}{l!} \int_0^t s^l e^{-\alpha(t-s)}U(t-s)\varphi_i^{(k)}ds = \\ &= U(t)u_0 + U(t)v_0 + \alpha \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^{p_i} \sum_{l=0}^{p_i-k} \frac{\langle x_0, \psi_i^{(p_i+1-k-l)} \rangle}{l!} \int_0^t (t-\sigma)^l e^{-\alpha\sigma} \sum_{r=0}^{k-1} \frac{\sigma^r}{r!} \varphi_i^{(k-r)}d\sigma = \\ &= U(t)u_0 + U(t)v_0 + \alpha \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^{p_i} \varphi_i^{(k)} \sum_{r+l=0}^{p_i-k} \frac{\langle x_0, \psi_i^{(p_i+1-k-(r+l))} \rangle}{l!r!} \int_0^t (t-\sigma)^l \sigma^r e^{-\alpha\sigma}d\sigma = \\ &= U(t)u_0 + U(t)v_0 + \alpha \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^{p_i} \varphi_i^{(k)} \sum_{j=r+l=0}^{p_i-k} \frac{\langle x_0, \psi_i^{(p_i+1-j)} \rangle}{j!} \int_0^t [(t-\sigma) + \sigma]^j e^{-\alpha\sigma}d\sigma = \\ &= U(t)u_0 + U(t)v_0 + \alpha \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^{p_i} \varphi_i^{(k)} (1 - e^{-\alpha t}) \sum_{j=0}^{p_i-k} \frac{\langle x_0, \psi_i^{(p_i+1-k-j)} \rangle}{j!} t^j \end{aligned} \quad (2.6)$$

Т е о р е м а 2.2. В предположениях I и III справедливы утверждения:

1°. Обобщенные решения задачи Коши (2.3) при $t \rightarrow \infty$ растут с порядком $t^{\max p_i - 1}$. Множество полиномов не выше указанной степени с векторными коэффициентами, выражающимися через жордановы элементы, является аттрактором динамической системы $\dot{x} = Bx$.

2°. Положение равновесия $x = 0$ является асимптотически устойчивым в классе начальных значений $x_0 \in E^{\infty-k_B} \cap D(B)$

С л е д с т в и е 2.1. В предположениях I - IV существуют $\rho > 0$, $r > 0$, такие что задача Коши (2.3) при всех $x_0 \in E^{\infty-k_B}$, $\|x_0\| < \rho$ имеет в шаре $\|x\| < r$ единственное ограниченное на $\mathbb{R}^+$ обобщенное решение, являющееся классическим при $x_0 \in D(B)$ и условно асимптотически устойчивым, т.е. асимптотически устойчивым при $x_0 \in E^{\infty-k_B} \cap D(B)$

С л е д с т в и е 2.2. В условиях групповой инвариантности уравнения (2.3) при выполнении требования (*) - подпространство $(I - P)E = E^{\infty-n}$ инвариантно относительно операторов L_g , проекторы P и Q коммутируют с L_g [3, 13], и начальным значениям x_0 , $L_g x_0$ принадлежащим неприводимым инвариантным подпространствам действия L_g в $E^{\infty-k_B} \cap D(B)$ отвечают условно асимптотические по Ляпунову решения $x(t, x_0)$ и $L_g x(t, x_0) = x(t, L_g x_0)$

3. Нелинейное уравнение и устойчивость по Ляпунову

Нелинейная задача Коши (1.3) в предположениях I - IV записывается в виде

$$\dot{x} = \tilde{B}x - R(x) + \alpha v, \quad x(0) = 0; \quad v(t) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{p_i} \langle x(t), \psi_i^{(p_i+1-j)} \rangle \varphi_i^{(j)} = Px(t) \quad (3.1)$$

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{p_i} \langle \dot{x}, \psi_i^{(j)} \rangle \varphi_i^{(p_i+1-j)} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=2}^{p_i} \langle x, \psi_i^{(p_i+1-j)} \rangle \varphi_i^{(j-1)} - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{p_i} \langle R(u(s) + v(s)), \psi_i^{(j)} \rangle \varphi_i^{(p_i+1-j)}$$
$$\begin{aligned} \dot{\xi}_{i1}(s)\varphi_i^{(1)} &= \langle \dot{x}, \psi_i^{(p_i)} \rangle \varphi_i^{(1)} = \langle x, \psi_i^{(p_i-1)} \rangle \varphi_i^{(1)} - \langle R(u(\xi(s)) + \sum \xi_{jk}(s)\varphi_j^{(k)}), \psi_i^{(p_i)} \rangle \varphi_i^{(1)} = \\ &= \xi_{i2}(s)\varphi_i^{(1)} - \langle R(u(\xi(s)) + \sum \xi_{jk}(s)\varphi_j^{(k)}), \psi_i^{(p_i)} \rangle \varphi_i^{(1)}, \\ \dot{\xi}_{i2}(s)\varphi_i^{(2)} &= \langle \dot{x}, \psi_i^{(p_i-1)} \rangle \varphi_i^{(2)} = \langle x, \psi_i^{(p_i-2)} \rangle \varphi_i^{(2)} - \langle R(u(\xi(s)) + \sum \xi_{jk}(s)\varphi_j^{(k)}), \psi_i^{(p_i-1)} \rangle \varphi_i^{(2)} = \\ &= \xi_{i3}(s)\varphi_i^{(2)} - \langle R(u(\xi(s)) + \sum \xi_{jk}(s)\varphi_j^{(k)}), \psi_i^{(p_i)} \rangle \varphi_i^{(2)}, \\ &\dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \\ &\dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \\ \dot{\xi}_{i,p_i-1}(s)\varphi_i^{(p_i-1)} &= \langle \dot{x}, \psi_i^{(2)} \rangle \varphi_i^{(p_i-1)} = \langle x, \psi_i^{(1)} \rangle \varphi_i^{(p_i-1)} - \langle R(u(\xi(s)) + \sum \xi_{jk}(s)\varphi_j^{(k)}), \psi_i^{(2)} \rangle \varphi_i^{(p_i-1)} = \\ &= \xi_{i,p_i}(s)\varphi_i^{(p_i-1)} - \langle R(u(\xi(s)) + \sum \xi_{jk}(s)\varphi_j^{(k)}), \psi_i^{(2)} \rangle \varphi_i^{(p_i-1)}, \\ \dot{\xi}_{i,p_i}(s)\varphi_i^{(p_i)} &= \langle \dot{x}, \psi_i^{(1)} \rangle \varphi_i^{(p_i)} = -\langle R(u(\xi(s)) + \sum \xi_{jk}(s)\varphi_j^{(k)}), \psi_i^{(1)} \rangle \varphi_i^{(p_i)} \end{aligned}$$
$$\xi_i(s) = e^{\mathfrak{A}_i s} \xi_{i0} - \int_0^s e^{\mathfrak{A}_i(s-\sigma)} [\langle R(u(\xi(\sigma)) + \sum \xi_{jk}(\sigma) \varphi_j^{(k)}), \psi_i^{(p_i+1-j)} \rangle]_{j=\overline{1, p_i}} d\sigma \quad (3.2)$$

$$e^{\mathfrak{A}_i s} = \begin{bmatrix} 1 & \frac{s}{1!} & \frac{s^2}{2!} & \cdots & \frac{s^{p_i-2}}{(p_i-2)!} & \frac{s^{p_i-1}}{(p_i-1)!} \\ 0 & 1 & \frac{s}{1!} & \cdots & \frac{s^{p_i-3}}{(p_i-3)!} & \frac{s^{p_i-2}}{(p_i-2)!} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \frac{s}{1!} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \begin{aligned} \xi_i(s) &= [\xi_{i1}(s) \quad \cdots \quad \xi_{ip_i}(s)], \\ \xi_{i0}(s) &= [\xi_{i1}(0) \quad \cdots \quad \xi_{ip_i}(0)], \\ i &= \overline{1, n} \end{aligned} \quad (3.3)$$

$$\begin{aligned}
& x(t) = \tilde{U}(t)x_0 + \\
& + \int_0^t \tilde{U}(t-s) \{-R(x(s)) + \alpha \sum_{i=1}^n [e^{\mathfrak{A}_i s} \xi_{i0} - \int_0^s e^{\mathfrak{A}_i(s-\sigma)} [\langle R(u(\xi(\sigma)) + \sum \xi_{jk}(\sigma) \varphi_j^{(k)}), \psi_i \rangle] d\sigma] \varphi_i\} ds
\end{aligned} \tag{3.4}$$

Доказательство основывается на статье [1] при рассмотрении уравнения (3.4) в пространстве $C_\alpha(E)$ и следующих положениях : 1° $\tilde{U}(t)x_0 = \tilde{U}(t)u_0 + e^{-\alpha t}U(t)Pv_0$ согласно IV, $Pv_0 = 0$, 2° Оператор $\int_0^t \tilde{U}(t-s)R(x(s))ds$ ограничен на полуоси, если

что действия операторов L и K^* на инвариантных подпространствах $E_1^n = N(B)$ и $E_{2,n}^* = N(B^*)$ определяются одной и той же матрицей $\mathcal{A} = [a_{ij}]_{i,j=1,n}$, т.е. $L\varphi_i = \sum_{j=1}^n a_{ji}\varphi_j$, $K^*\psi_i = \sum_{j=1}^n a_{ij}\psi_j$ и уравнение разветвления наследует свойство сплетения, а УРК свойство сплетения матрицами $\mathbb{A}$ и $\mathbb{B}$, определяющими действие операторов L и K^* на корневых подпространствах $E_1^{k_B}$ и E_{2,k_B}^* , которые являются блочно-диагональными и равны. При этом в нашем случае I -жордановых цепочек оператора B , матрица $\mathbb{A}$ сплетает проектор P , соответственно оператор L сплетает полугруппу $U(t)$ и в случае параметрического сплетения семейством операторов $L(a)$ возникают поставленные выше задачи, решаемые методами [15] (в [16] параметрическое сплетение не рассматривалось).

Однако описанные здесь задачи будут нетривиальны и интересны в случае исследования устойчивости семейств разветвляющихся решений (см. по этому поводу работы [10] и [18]).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Треногин В.А. Теорема Ляпунова об устойчивости по линейному приближению как следствие теоремы о неявных операторах. Доклады РАН. Математика 407, №6, 742-746(2006).
2. Вайнберг М.М., Треногин В.А. Теория ветвления решений нелинейных уравнений. М. Наука – 1969. – 524 с.
3. Логинов Б.В. Теория ветвления решений нелинейных уравнений в условиях групповой инвариантности. Ташкент. Изд-во Фан АНУзССР – 1985. – 186 с.
4. Овсянников Л.В. Программа подмодели. Газовая динамика. ПММ. – 1994. – 58(3) . – 30-55.
5. Овсянников Л.В. Групповые свойства дифференциальных уравнений, Новосибирск, Изд-во СО РАН СССР 1962 – 238 с.
6. Овсянников Л.В. Групповой анализ дифференциальных уравнений. М. Наука, 1979 – 400 с.
7. Треногин В.А. Линейное приближение для дифференциальных уравнений в банаховых пространствах и устойчивость по Ляпунову. Доклады РАН. Математика, т.428, №4, 458-461 (2009)
8. Треногин В.А. Об устойчивости тривиального положения равновесия для ДУ с вырожденной линейной частью. Тезисы докладов межд. конференции «Математическое моделирование и дифференциальные уравнения», Минск, БелгосУниверситет, 24 - 29.08.2009, часть II, с.170-171.
9. Loginov B.V., Rousak Yu.B. Generalized Jordan structure in the problem of the stability of bifurcating solutions. Nonlinear Analysis, TMA, v.17, № 3, 219-232 (1991)

10. Loginov B.V., Kim-Tyan L.R., Rousak Yu.B. Modification of the Lyapounov-Schmidt method and the stability of solutions of differential equations with a singular operator of finite index multiplying the derivative. Russ.Acad.Sci.Dok.Math. 47, No.3, 599-603 (1993)
11. Логинов Б.В., Русак Ю.Б. Обобщенная жорданова структура в теории ветвления. В кн. «Прямые и обратные задачи для дифференциальных уравнений с частными производными». Изд-во Фан АНУзССР, Ташкент (ред. М.М. Салахитдинов), 133-148 (1978)
12. Треногин В.А. Функциональный анализ, М., Наука – 1980. – 495 с.
13. Karasözen B., Konopleva I., Loginov B.V. Hereditary symmetry of resolving systems for nonlinear equations with Fredholm operators Nonlinear Analysis and Applications. To V. Lakshmikantham on his 80th Birthday (R.P. Agarwal, D.O'Regan - eds). v.2, 617-644 (2003). Dordrecht: Kluwer Acad. Publ.
14. Демидович Б.П. Лекции по математической теории устойчивости. М.: Наука. – 1967. – 472 с.
15. Сидоров Н.А., Абдуллин В.Р. Сплетаемые уравнения разветвления в теории нелинейных уравнений. Математический сборник, т.192, №7, –107–124 (2001)
16. Loginov B.V., Konopleva I. Symmetry of resolving systems in degenerated functional equations. Proc. Int. Conf. «Symmetry and Differential Equations (Andreev V.K., Vasiliev V.V. - eds)», Krasnoyarsk, Inst. Comput. Simulation, Siberian Branch Russ.Acad.Sci., –42–46 (2000)
17. Loginov B.V., Konopleva I. Symmetry of resolving systems for differential equations with Fredholm operator at the derivative. Proc. Int. Conf. MOGRAN 2000 (Baikov V.A., Gazizov R.K., Ibragimov N.H., Mahomed F.M. - eds), USATU, Ufa, –116–119 (2000)
18. Kim-Tyan L.R., Loginov B.V., Rousak Yu.B. Stability of bifurcating periodical solutions at Poincaré-Andronov-Hopf bifurcation for singular differential equations in Banach spaces. ROMAI Journal, v.5 (2009)

Solutions stability on linear approximation to Cauchy problem , branching equation in the root subspace, symmetry.

© V.A. Trenogin⁴, B.V. Loginov⁵, L.R. Kim-Tyan ⁶

Abstract. V.A.Trenogin results [7, 8] about solutions stability to Cauchy problem for differential equations in Banach space on linear approximation in the case of degenerate linearization are presented from the point of view of bifurcation equation in the root subspace. Conclusions are made for the presence of group and non-group symmetries.

Key Words: Differential equation in Banach space, stability, branching equation in the root subspace, symmetry.

⁴Professor of Higher Mathematics Chair, National Research Technological University «MISIS», Moscow; vtrenogin@mail.ru

⁵Professor of Higher Mathematics Chair, Ulyanovsk State Technical University, Ulyanovsk; loginov@ulstu.ru

⁶Associate professor of Higher Mathematics Chair, National Research Technological University «MISIS», Moscow; kim-tyan@mail.ru

УДК 533.6.013.42

Математическое моделирование одной динамической системы типа «тандем»

© А. В. Анкилов¹, П. А. Вельмисов², Ю. А. Решетников³

Аннотация. Предложена математическая модель динамической системы двух упругих пластин типа «тандем», обтекаемых дозвуковым потоком газа (жидкости). Дано решение аэрогидродинамической части задачи, основанное на методах теории функций комплексного переменного. Получена связанная система уравнений, позволяющая исследовать динамику пластин.

Ключевые слова: аэрогидроупругость; динамика; упругая пластина; система типа «тандем»; деформация; обтекание; дозвуковой поток.

1. Постановка задачи

Рассматривается плоская задача аэрогидроупругости о малых колебаниях системы двух упругих пластин типа «тандем» (расположенных последовательно друг за другом вдоль одной линии) при дозвуковом обтекании их потоком идеальной несжимаемой среды (жидкости или газа). В состоянии покоя пластинам в физической плоскости xOy соответствуют на оси Ox отрезки $[a_1, b_1]$ и $[a_2, b_2]$, $a_2 > b_1$. В бесконечно удаленной точке скорость газа равна V и имеет направление, совпадающее с направлением оси Ox . Предполагается, что прогибы пластин и возмущение однородного потока малы, то есть $\bar{w}_k(x, t) = \varepsilon w_k(x, t)$, $\bar{\varphi}(x, y, t) = Vx + \varepsilon \varphi(x, y, t)$, $\varepsilon \ll 1$, $k = 1, 2$. Здесь $\bar{w}_1$, $\bar{w}_2$ и $\bar{\varphi}$ – соответственно прогибы и потенциал скорости возмущенного потока газа; x , y – декартовы координаты, t – время.

Потенциал φ удовлетворяет уравнению Лапласа

$$\varphi_{xx} + \varphi_{yy} = 0, \quad (x, y) \in G = R^2 \setminus ([a_1, b_1] \cup [a_2, b_2]), \quad (1.1)$$

условию отсутствия возмущений в бесконечно удаленной точке

$$(\varphi_x^2 + \varphi_y^2 + \varphi_t^2)_\infty = 0 \quad (1.2)$$

и линеаризованным граничным условиям

$$\varphi_y^\pm = \dot{w}_1 + Vw'_1, \quad x \in (a_1, b_1), \quad (1.3)$$

$$\varphi_y^\pm = \dot{w}_2 + Vw'_2, \quad x \in (a_2, b_2), \quad (1.4)$$

где $\varphi_y^\pm = \lim_{y \rightarrow 0 \pm 0} \varphi_y(x, y, t)$. В формулах (1.3), (1.4) и далее точка обозначает производную по t , а штрих – производную по x .

¹Доцент кафедры «Высшая математика», Ульяновский государственный технический университет, г. Ульяновск; ankil@ulstu.ru.

²Профессор, зав. кафедрой «Высшая математика», Ульяновский государственный технический университет, г. Ульяновск; velmisov@ulstu.ru.

³Доцент кафедры «Высшая математика», Ульяновский государственный технический университет, г. Ульяновск; velmisov@ulstu.ru.

Линеаризуя интеграл Лагранжа-Коши, получим следующее выражение для реакции газа на пластины (ρ - плотность газа)

$$Q = \rho (\varphi_t^+ - \varphi_t^-) + \rho V (\varphi_x^+ - \varphi_x^-).$$

Тогда уравнения малых колебаний пластин можно записать в виде

$$L_1(w_1) = \rho (\varphi_t^+ - \varphi_t^-) + \rho V (\varphi_x^+ - \varphi_x^-), \quad x \in (a_1, b_1), \quad y = 0; \quad (1.5)$$

$$L_2(w_2) = \rho (\varphi_t^+ - \varphi_t^-) + \rho V (\varphi_x^+ - \varphi_x^-), \quad x \in (a_2, b_2), \quad y = 0; \quad (1.6)$$

$$L_k(w_k) \equiv M_k \ddot{w}_k + D_k w_k'''' + N_k w_k'' + \delta_k \dot{w}_k''' + \beta_k \dot{w}_k + \gamma_k w_k,$$

где $M_k, D_k, N_k, \delta_k, \beta_k, \gamma_k$ - некоторые постоянные ($k = 1, 2$).

2. Решение аэрогидродинамической части задачи

Выражая потенциал $\varphi(x, y, t)$ через функции прогиба $w_k(x, t)$, запишем уравнения колебаний пластин (1.5), (1.6) относительно этих функций. С этой целью в области G введем комплексный потенциал $W = f(z, t) = \varphi + i\psi$, где $\psi = \psi(x, y, t)$ - функция тока, $z = x + iy$. Для функции скоростей $f_z(z, t) = \varphi_x - i\varphi_y$ согласно условиям (1.1), (1.3), (1.4) имеем следующее интегральное представление [1, с. 52-54]

$$f_z(z, t) = \frac{1}{\pi \sqrt{h(z)}} \left(\int_{a_2}^{b_2} \frac{v_2(\tau, t)}{\tau - z} \sqrt{h(\tau)} d\tau - \int_{a_1}^{b_1} \frac{v_1(\tau, t)}{\tau - z} \sqrt{h(\tau)} d\tau + \Gamma(t) \right), \quad (2.1)$$

где $h(z) = (z - a_1)(z - b_1)(z - a_2)(b_2 - z)$, $v_k(\tau, t) = \dot{w}_k(\tau, t) + V w_k'(\tau, t)$, $k = 1, 2$; $\Gamma(t)$ - функция, определяющая циркуляцию скорости газа вокруг каждой пластины. Ветвь корня в формуле (2.1) фиксирована условием

$$\sqrt{h(z)} = i \sqrt{(x - a_1)(x - b_1)(x - a_2)(x - b_2)}, \quad z = x > b_2. \quad (2.2)$$

Разложение функции $f_z(z, t)$ в окрестности $z = \infty$ начинается с члена порядка $1/z^2$, поэтому общая циркуляция равна нулю. Циркуляция вокруг каждой пластины может отличаться от нуля. Заметим также, что $(\varphi_x^2 + \varphi_y^2)_\infty = 0$.

Перейдем в (2.1) к пределу при $z \rightarrow x \pm i0$, $x \in (a_1, b_1)$. Согласно условию (2.2) имеем

$$\sqrt{h(z)} = \begin{cases} \pm \sqrt{h(x)}, & z = x \pm i0, \quad x \in (a_1, b_1), \\ \mp \sqrt{h(x)}, & z = x \pm i0, \quad x \in (a_2, b_2). \end{cases} \quad (2.3)$$

Применяя формулы Сохоцкого [2] и учитывая (2.3), получим

$$\begin{aligned} \varphi_x^\pm - i\varphi_y^\pm = \pm \frac{1}{\pi \sqrt{h(x)}} & \left(\int_{a_2}^{b_2} \frac{v_2(\tau, t)}{\tau - x} \sqrt{h(\tau)} d\tau \mp \pi i v_1(x, t) \sqrt{h(x)} - \right. \\ & \left. - \int_{a_1}^{b_1} \frac{v_1(\tau, t)}{\tau - x} \sqrt{h(\tau)} d\tau + \Gamma(t) \right), \end{aligned}$$

следовательно,

$$\varphi_x^+ - \varphi_x^- = \frac{2}{\pi \sqrt{h(x)}} \left(\int_{a_2}^{b_2} \frac{v_2(\tau, t)}{\tau - x} \sqrt{h(\tau)} d\tau - \int_{a_1}^{b_1} \frac{v_1(\tau, t)}{\tau - x} \sqrt{h(\tau)} d\tau + \Gamma(t) \right), \quad x \in (a_1, b_1). \quad (2.4)$$

Аналогично, при $z \rightarrow x \pm i0$, $x \in (a_2, b_2)$, находим

$$\varphi_x^+ - \varphi_x^- = -\frac{2}{\pi \sqrt{h(x)}} \left(\int_{a_2}^{b_2} \frac{v_2(\tau, t)}{\tau - x} \sqrt{h(\tau)} d\tau - \int_{a_1}^{b_1} \frac{v_1(\tau, t)}{\tau - x} \sqrt{h(\tau)} d\tau + \Gamma(t) \right), \quad x \in (a_2, b_2). \quad (2.5)$$

Для комплексного потенциала имеем следующее выражение

$$W = f(z, t) = \int_{a_1}^z f_z(z, t) dz + C(t), \quad (2.6)$$

где $C(t)$ – произвольная функция времени, $z \in G$. Так как G – двусвязная область, то интеграл, вообще говоря, зависит от линии интегрирования. Следовательно, потенциал φ , а значит и правые части уравнений (1.5), (1.6) однозначно не определяются. Подберем функцию $\Gamma(t)$ так, чтобы циркуляция вокруг каждой пластины равнялась нулю.

При обходе разреза $[a_k, b_k]$ против часовой стрелки циркуляция $\Gamma_k(t) = \int_{a_k}^{b_k} \varphi_x^- dx + \int_{b_k}^{a_k} \varphi_x^+ dx = \int_{a_k}^{b_k} (\varphi_x^- - \varphi_x^+) dx$, $k = 1, 2$. Воспользовавшись формулами (2.4), (2.5), получим

$$\begin{aligned} \Gamma_1(t) = & \frac{2}{\pi} \int_{a_1}^{b_1} \frac{dx}{\sqrt{h(x)}} \int_{a_2}^{b_2} \frac{v_2(\tau, t)}{x - \tau} \sqrt{h(\tau)} d\tau - \\ & - \frac{2}{\pi} \int_{a_1}^{b_1} \frac{dx}{\sqrt{h(x)}} \int_{a_1}^{b_1} \frac{v_1(\tau, t)}{x - \tau} \sqrt{h(\tau)} d\tau - \frac{2\Gamma(t)}{\pi} \int_{a_1}^{b_1} \frac{dx}{\sqrt{h(x)}}, \end{aligned} \quad (2.7)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_2(t) = & -\frac{2}{\pi} \int_{a_2}^{b_2} \frac{dx}{\sqrt{h(x)}} \int_{a_2}^{b_2} \frac{v_2(\tau, t)}{x - \tau} \sqrt{h(\tau)} d\tau + \\ & + \frac{2}{\pi} \int_{a_2}^{b_2} \frac{dx}{\sqrt{h(x)}} \int_{a_1}^{b_1} \frac{v_1(\tau, t)}{x - \tau} \sqrt{h(\tau)} d\tau + \frac{2\Gamma(t)}{\pi} \int_{a_2}^{b_2} \frac{dx}{\sqrt{h(x)}}. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Покажем, что сумма циркуляций равна нулю. Согласно (2.7), (2.8)

$$\begin{aligned} \Gamma_1(t) + \Gamma_2(t) = & \frac{2}{\pi} \int_{a_2}^{b_2} v_2(\tau, t) \sqrt{h(\tau)} d\tau \left(\int_{a_1}^{b_1} \frac{dx}{\sqrt{h(x)}(x-\tau)} - \int_{a_2}^{b_2} \frac{dx}{\sqrt{h(x)}(x-\tau)} \right) - \\ & - \frac{2}{\pi} \int_{a_1}^{b_1} v_1(\tau, t) \sqrt{h(\tau)} d\tau \left(\int_{a_1}^{b_1} \frac{dx}{\sqrt{h(x)}(x-\tau)} - \int_{a_2}^{b_2} \frac{dx}{\sqrt{h(x)}(x-\tau)} \right) - \\ & - \frac{2\Gamma(t)}{\pi} \left(\int_{a_1}^{b_1} \frac{dx}{\sqrt{h(x)}} - \int_{a_2}^{b_2} \frac{dx}{\sqrt{h(x)}} \right). \end{aligned} \quad (2.9)$$

В полуплоскости $Imz > 0$ рассмотрим аналитическую функцию $g(z) = 1/\sqrt{h(z)}$. В силу выбора ветви корня (2.2) на границе полуплоскости ($Imz = y = 0$) имеем

$$Re\{g(z)\} = \begin{cases} 0, x \in (-\infty, a_1) \cup (b_1, a_2) \cup (b_2, +\infty), \\ 1/\sqrt{h(x)}, x \in (a_1, b_1), \\ -1/\sqrt{h(x)}, x \in (a_2, b_2). \end{cases}$$

Представим $g(z)$ с помощью интеграла Шварца [2]

$$g(z) = \frac{1}{\sqrt{h(z)}} = \frac{1}{\pi i} \left(\int_{a_1}^{b_1} \frac{d\tau}{\sqrt{h(\tau)}(\tau-z)} - \int_{a_2}^{b_2} \frac{d\tau}{\sqrt{h(\tau)}(\tau-z)} \right). \quad (2.10)$$

При $z \rightarrow x \in (a_1, b_1)$, получим

$$\frac{1}{\sqrt{h(x)}} = \frac{1}{\pi i} \left(\frac{\pi i}{\sqrt{h(x)}} + \int_{a_1}^{b_1} \frac{d\tau}{\sqrt{h(\tau)}(\tau-x)} - \int_{a_2}^{b_2} \frac{d\tau}{\sqrt{h(\tau)}(\tau-x)} \right).$$

Отсюда

$$\int_{a_1}^{b_1} \frac{d\tau}{\sqrt{h(\tau)}(\tau-x)} = \int_{a_2}^{b_2} \frac{d\tau}{\sqrt{h(\tau)}(\tau-x)}, \quad x \in (a_1, b_1),$$

или

$$\int_{a_1}^{b_1} \frac{dx}{\sqrt{h(x)}(x-\tau)} = \int_{a_2}^{b_2} \frac{dx}{\sqrt{h(x)}(x-\tau)}, \quad \tau \in (a_1, b_1), \quad (2.11)$$

Если $z \rightarrow x \in (a_2, b_2)$, то

$$-\frac{1}{\sqrt{h(x)}} = \frac{1}{\pi i} \left(\int_{a_1}^{b_1} \frac{d\tau}{\sqrt{h(\tau)}(\tau-x)} - \frac{\pi i}{\sqrt{h(x)}} - \int_{a_2}^{b_2} \frac{d\tau}{\sqrt{h(\tau)}(\tau-x)} \right),$$

следовательно,

$$\int_{a_1}^{b_1} \frac{d\tau}{\sqrt{h(\tau)}(\tau-x)} = \int_{a_2}^{b_2} \frac{d\tau}{\sqrt{h(\tau)}(\tau-x)}, \quad x \in (a_2, b_2),$$

или

$$\int_{a_1}^{b_1} \frac{dx}{\sqrt{h(x)}(x-\tau)} = \int_{a_2}^{b_2} \frac{dx}{\sqrt{h(x)}(x-\tau)}, \quad \tau \in (a_2, b_2). \quad (2.12)$$

Полагая в (2.10) $z = x > b_2$, будем иметь

$$\frac{\pi}{\sqrt{-h(x)}} = \int_{a_1}^{b_1} \frac{d\tau}{\sqrt{h(\tau)}(\tau-x)} - \int_{a_2}^{b_2} \frac{d\tau}{\sqrt{h(\tau)}(\tau-x)}.$$

Умножим на x обе части этого равенства и перейдем к пределу при $x \rightarrow +\infty$. В результате получим

$$\int_{a_1}^{b_1} \frac{d\tau}{\sqrt{h(\tau)}} = \int_{a_2}^{b_2} \frac{d\tau}{\sqrt{h(\tau)}}. \quad (2.13)$$

Из равенств (2.9), (2.11) - (2.13) следует, что $\Gamma_1(t) + \Gamma_2(t) = 0$.

Положим

$$\begin{aligned} \Gamma(t) = \frac{1}{M} & \left(\int_{a_2}^{b_2} \frac{dx}{\sqrt{h(x)}} \int_{a_2}^{b_2} \frac{v_2(\tau, t)}{x-\tau} \sqrt{h(\tau)} d\tau - \right. \\ & \left. - \int_{a_1}^{b_1} \frac{dx}{\sqrt{h(x)}} \int_{a_1}^{b_1} \frac{v_1(\tau, t)}{x-\tau} \sqrt{h(\tau)} d\tau \right), \end{aligned} \quad (2.14)$$

где $M = \int_{a_1}^{b_1} \frac{dx}{\sqrt{h(x)}}$. Тогда $\Gamma_1(t) = -\Gamma_2(t) = 0$. В этом случае интеграл от функции $f_z(z, t)$ по любому замкнутому контуру, принадлежащему области G , равен нулю. Отсюда следует, что значение потенциала W , определяемое формулой (2.6), не зависит от линии интегрирования, соединяющей точки a_1 и z . Поскольку

$$W = \varphi + i\psi = a_0(t) + \frac{a_1(t)}{z} + \dots$$

в окрестности $z = \infty$, то функцию $C(t)$ в (2.6) можно подобрать так, чтобы выполнялось условие $(\varphi_t)_\infty = 0$.

Чтобы найти предельные значения $\varphi(x, y, t)$ на границе области G , преобразуем каждый из интегралов в правой части формулы (2.1). Интегрируя по частям, получим

$$f_z(z, t) = \frac{1}{\pi \sqrt{h(z)}} \left[\int_{a_1}^{b_1} \bar{v}_1(\tau, t) \left(\frac{\sqrt{h(\tau)}}{\tau-z} \right)'_\tau d\tau - \int_{a_2}^{b_2} \bar{v}_2(\tau, t) \left(\frac{\sqrt{h(\tau)}}{\tau-z} \right)'_\tau d\tau + \Gamma(t) \right],$$

где $\bar{v}_k(\tau, t) = \int_{a_k}^{\tau} v_k(x, t) dx$, $k = 1, 2$.

Так как

$$\left(\frac{\sqrt{h(\tau)}}{\tau-z} \right)'_\tau = \frac{(\tau-z)h'(\tau) - 2h(\tau)}{2(\tau-z)^2 \sqrt{h(\tau)}}, \quad \left(\frac{\sqrt{h(z)}}{\tau-z} \right)'_z = \frac{(\tau-z)h'(z) + 2h(z)}{2(\tau-z)^2 \sqrt{h(z)}},$$

то

$$\frac{\sqrt{h(z)}}{\sqrt{h(\tau)}} \left(\frac{\sqrt{h(z)}}{\tau - z} \right)'_z + \left(\frac{\sqrt{h(\tau)}}{\tau - z} \right)'_\tau = \frac{(\tau - z)(h'(\tau) + h'(z)) - 2(h(z) - h(\tau))}{2(\tau - z)^2 \sqrt{h(\tau)}}.$$

Учитывая, что

$$h(z) = (z - a_1)(z - b_1)(z - a_2)(b_2 - z) = -z^4 + az^3 + bz^2 + cz + d,$$

находим

$$\begin{aligned} h(z) - h(\tau) &= -(z^4 - \tau^4) + a(z^3 - \tau^3) + b(z^2 - \tau^2) + c(z - \tau) = \\ &= (z - \tau) [-(z^2 + \tau^2)(z + \tau) + a(z^2 + z\tau + \tau^2) + b(z + \tau) + c], \\ (h'(\tau) + h'(z)) &= -4(z^3 + \tau^3) + 3a(z^2 + \tau^2) + 2b(z + \tau) + 2c, \end{aligned}$$

следовательно,

$$\begin{aligned} (\tau - z)(h'(\tau) + h'(z)) + 2(h(z) - h(\tau)) &= (\tau - z) [-4(z^3 + \tau^3) + 3a(z^2 + \tau^2) + \\ &+ 2b(z + \tau) + 2c] - 2(z - \tau) [-(z^2 + \tau^2)(z + \tau) + a(z^2 + z\tau + \tau^2) + b(z + \tau) + c] = \\ &= (\tau - z) [-4(z^3 + \tau^3) + 3a(z^2 + \tau^2) + 2(z^2 + \tau^2)(z + \tau) - 2a(z^2 + z\tau + \tau^2)] = \\ &= (\tau - z) [(z + \tau)(-4z^2 + 4z\tau - 4\tau^2 + 2z^2 + 2\tau^2) + a(3z^2 + 3\tau^2 - 2z^2 - \\ &- 2z\tau - 2\tau^2)] = (\tau - z) [(z + \tau)(-2z^2 + 4z\tau - 2\tau^2) + a(z^2 - 2z\tau + \tau^2)] = \\ &= (\tau - z)^3 [a - 2(z + \tau)]. \end{aligned}$$

Таким образом,

$$\frac{\sqrt{h(z)}}{\sqrt{h(\tau)}} \left(\frac{\sqrt{h(z)}}{\tau - z} \right)'_z + \left(\frac{\sqrt{h(\tau)}}{\tau - z} \right)'_\tau = \frac{(\tau - z)^3 [a - 2(z + \tau)]}{2(\tau - z)^2 \sqrt{h(\tau)}} = \frac{(\tau - z)(a_0 - z - \tau)}{\sqrt{h(\tau)}},$$

где $a_0 = -\frac{1}{2}(a_1 + b_1 + a_2 + b_2)$.

Следовательно,

$$\left(\frac{\sqrt{h(\tau)}}{\tau - z} \right)'_\tau = -\frac{\sqrt{h(z)}}{\sqrt{h(\tau)}} \left(\frac{\sqrt{h(z)}}{\tau - z} \right)'_z - \frac{(\tau - z)(\tau + z - a_0)}{\sqrt{h(\tau)}}. \quad (2.15)$$

С учетом (2.15) имеем

$$\begin{aligned} f_z(z, t) &= -\frac{1}{\pi} \left[\int_{a_1}^{b_1} \frac{\bar{v}_1(\tau, t)}{\sqrt{h(\tau)}} \left(\frac{\sqrt{h(z)}}{\tau - z} \right)'_z d\tau - \int_{a_2}^{b_2} \frac{\bar{v}_2(\tau, t)}{\sqrt{h(\tau)}} \left(\frac{\sqrt{h(z)}}{\tau - z} \right)'_z d\tau \right] + \\ &+ \frac{1}{\pi \sqrt{h(z)}} \left[\Gamma(t) - \int_{a_1}^{b_1} \bar{v}_1(\tau, t) \frac{(\tau - z)(\tau + z - a_0)}{\sqrt{h(\tau)}} d\tau + \right. \end{aligned} \quad (2.16)$$

$$+ \int_{a_2}^{b_2} \bar{v}_2(\tau, t) \frac{(\tau - z)(\tau + z - a_0)}{\sqrt{h(\tau)}} d\tau \Bigg].$$

Подставляя (2.16) в (2.6), получим

$$\begin{aligned} W = \varphi + i\psi = & -\frac{\sqrt{h(z)}}{\pi} \left(\int_{a_1}^{b_1} \frac{\bar{v}_1(\tau, t)}{\sqrt{h(\tau)}} \frac{d\tau}{\tau - z} - \int_{a_2}^{b_2} \frac{\bar{v}_2(\tau, t)}{\sqrt{h(\tau)}} \frac{d\tau}{\tau - z} \right) + \\ & + \frac{\Gamma(t)}{\pi} \int_{a_1}^z \frac{dz}{\sqrt{h(z)}} - \frac{1}{\pi} \int_{a_1}^{b_1} \frac{\bar{v}_1(\tau, t)}{\sqrt{h(\tau)}} d\tau \int_{a_1}^z \frac{(\tau - z)(\tau + z - a_0)}{\sqrt{h(z)}} dz + \\ & + \frac{1}{\pi} \int_{a_2}^{b_2} \frac{\bar{v}_2(\tau, t)}{\sqrt{h(\tau)}} d\tau \int_{a_1}^z \frac{(\tau - z)(\tau + z - a_0)}{\sqrt{h(z)}} dz + C(t). \end{aligned} \quad (2.17)$$

Отсюда при $z \rightarrow x \pm i0$, $x \in (a_1, b_1)$, находим

$$\begin{aligned} \varphi^\pm + i\psi^\pm = & \frac{\mp \sqrt{h(x)}}{\pi} \left(\pm \pi i \frac{\bar{v}_1(x, t)}{\sqrt{h(x)}} + \int_{a_1}^{b_1} \frac{\bar{v}_1(\tau, t)}{\sqrt{h(\tau)}} \frac{d\tau}{\tau - x} - \int_{a_2}^{b_2} \frac{\bar{v}_2(\tau, t)}{\sqrt{h(\tau)}} \frac{d\tau}{\tau - x} \right) + \\ & + \frac{\Gamma(t)}{\pi} \int_{a_1}^x \frac{dx}{\pm \sqrt{h(x)}} - \frac{1}{\pi} \int_{a_1}^{b_1} \frac{\bar{v}_1(\tau, t)}{\sqrt{h(\tau)}} d\tau \int_{a_1}^x \frac{(\tau - x)(\tau + x - a_0)}{\pm \sqrt{h(x)}} dx + \\ & + \frac{1}{\pi} \int_{a_2}^{b_2} \frac{\bar{v}_2(\tau, t)}{\sqrt{h(\tau)}} d\tau \int_{a_1}^x \frac{(\tau - x)(\tau + x - a_0)}{\pm \sqrt{h(x)}} dx + C(t), \end{aligned}$$

следовательно,

$$\begin{aligned} \varphi^+ - \varphi^- = & -\frac{2\sqrt{h(x)}}{\pi} \left(\int_{a_1}^{b_1} \frac{\bar{v}_1(\tau, t)}{\sqrt{h(\tau)}} \frac{d\tau}{\tau - x} - \int_{a_2}^{b_2} \frac{\bar{v}_2(\tau, t)}{\sqrt{h(\tau)}} \frac{d\tau}{\tau - x} \right) + \\ & + \frac{2\Gamma(t)}{\pi} \int_{a_1}^x \frac{dx}{\sqrt{h(x)}} - \frac{2}{\pi} \int_{a_1}^{b_1} \frac{\bar{v}_1(\tau, t)}{\sqrt{h(\tau)}} d\tau \int_{a_1}^x \frac{(\tau - x)(\tau + x - a_0)}{\sqrt{h(x)}} dx + \\ & + \frac{2}{\pi} \int_{a_2}^{b_2} \frac{\bar{v}_2(\tau, t)}{\sqrt{h(\tau)}} d\tau \int_{a_1}^x \frac{(\tau - x)(\tau + x - a_0)}{\sqrt{h(x)}} dx, \quad x \in (a_1, b_1). \end{aligned} \quad (2.18)$$

Аналогичным образом, сначала интегрируя (2.16) от a_2 до z , затем переходя к пределу при $z \rightarrow x \pm i0$, $x \in (a_2, b_2)$, будем иметь

$$\varphi^+ - \varphi^- = \frac{2\sqrt{h(x)}}{\pi} \left(\int_{a_1}^{b_1} \frac{\bar{v}_1(\tau, t)}{\sqrt{h(\tau)}} \frac{d\tau}{\tau - x} - \int_{a_2}^{b_2} \frac{\bar{v}_2(\tau, t)}{\sqrt{h(\tau)}} \frac{d\tau}{\tau - x} \right) -$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{2\Gamma(t)}{\pi} \int_{a_2}^x \frac{dx}{\sqrt{h(x)}} + \frac{2}{\pi} \int_{a_1}^{b_1} \frac{\bar{v}_1(\tau, t)}{\sqrt{h(\tau)}} d\tau \int_{a_2}^x \frac{(\tau-x)(\tau+x-a_0)}{\sqrt{h(x)}} dx - \\
& -\frac{2}{\pi} \int_{a_2}^{b_2} \frac{\bar{v}_2(\tau, t)}{\sqrt{h(\tau)}} d\tau \int_{a_2}^x \frac{(\tau-x)(\tau+x-a_0)}{\sqrt{h(x)}} dx, \quad x \in (a_2, b_2).
\end{aligned} \tag{2.19}$$

Согласно формулам (2.4), (2.5), (2.18), (2.19) уравнения колебаний пластин (1.5), (1.6) принимают вид

$$\begin{aligned}
(-1)^k L_k(w_k) &= \frac{2\rho\sqrt{h(x)}}{\pi} \left(\int_{a_1}^{b_1} \frac{\tilde{v}_1(\tau, t)}{\sqrt{h(\tau)}} \frac{d\tau}{\tau-x} - \int_{a_2}^{b_2} \frac{\tilde{v}_2(\tau, t)}{\sqrt{h(\tau)}} \frac{d\tau}{\tau-x} \right) - \\
& -\frac{2\rho\Gamma'(t)}{\pi} \int_{a_k}^x \frac{dx}{\sqrt{h(x)}} + \frac{2\rho}{\pi} \int_{a_1}^{b_1} \frac{\tilde{v}_1(\tau, t)}{\sqrt{h(\tau)}} d\tau \int_{a_k}^x \frac{(\tau-x)(\tau+x-a_0)}{\sqrt{h(x)}} dx - \\
& -\frac{2\rho}{\pi} \int_{a_2}^{b_2} \frac{\tilde{v}_2(\tau, t)}{\sqrt{h(\tau)}} d\tau \int_{a_k}^x \frac{(\tau-x)(\tau+x-a_0)}{\sqrt{h(x)}} dx + \\
& + \frac{2\rho V}{\pi\sqrt{h(x)}} \left(\int_{a_1}^{b_1} \frac{v_1(\tau, t)}{\tau-x} \sqrt{h(\tau)} d\tau - \int_{a_2}^{b_2} \frac{v_2(\tau, t)}{\tau-x} \sqrt{h(\tau)} d\tau - \Gamma(t) \right), \quad x \in (a_k, b_k) \quad k=1, 2.
\end{aligned} \tag{2.20}$$

В (2.20) $\tilde{v}_k(\tau, t) = \frac{\partial \bar{v}_k}{\partial t} = \int_{a_k}^{\tau} (\ddot{w}_k(x, t) + V \dot{w}'_k(x, t)) dx$, $\Gamma(t)$ определяется формулой (2.14).

Таким образом, получили связанную систему уравнений (2.20) относительно функций прогиба $w_1(x, t)$ и $w_2(x, t)$, описывающую динамику двух упругих пластин в дозвуковом потоке газа.

3. Заключение

Предложена математическая модель динамической системы типа "тандем", состоящей из двух упругих пластин, последовательно расположенных друг за другом вдоль одной линии и обтекаемых дозвуковым потоком газа (жидкости). Дано решение аэрогидродинамической части задачи, основанное на методах теории функций комплексного переменного. Получена связанная система уравнений, позволяющая исследовать динамику пластин.

Работа выполнена в рамках реализации ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» (2009-2013г.г.), ГК №П1122, а также поддержана грантом РФФИ № 09-01-97005.

Работа выполнена в рамках реализации ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» (2009-2013г.г.), ГК N1122

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Седов Л. И. Плоские задачи гидродинамики и аэродинамики. – М.: Наука, 1980. – 448 с.
2. Лаврентьев М. А., Шабат Б. В. Методы теории функций комплексного переменного. – М.: Наука, 1973. – 736 с.

Oscillations equations of system of two elastic plates

© A. V. Ankilov⁴, P. A. Velmisov⁵, Yu. A. Reshetnikov⁶

Abstract. A mathematical model of the dynamical system of the two elastic plates of "tandem" species flowing along of the subsonic flow of gas (fluid) is proposed. The solution of aerohydrodynamical part of problem based on the methods of complex variable functions theory is given. The bound system of the equations allowing to investigate the plates dynamic is obtained.

Key Words: aerohydroelasticity; dynamic; elastic plate; system of "tandem" species; deformation; flow along the plate; subsonic flow.

⁴Associate professor of Higher Mathematics Chair, Ulyanovsk State Technical University, Ulyanovsk; ankil@ulstu.ru.

⁵Professor, Head of Higher Mathematics Chair, Ulyanovsk State Technical University, Ulyanovsk; velmisov@ulstu.ru.

⁶Associate professor of Higher Mathematics Chair, Ulyanovsk State Technical University, Ulyanovsk; velmisov@ulstu.ru.

УДК 517.9

Об управлении движением механических систем с неизвестными параметрами на основе функции насыщения

© О. А. Перегудова¹

Аннотация. В работе решена задача об отслеживании траекторий механических систем с неизвестными массо-инерционными характеристиками и с учетом запаздывания в структуре обратной связи. Исследование основано на построении непрерывного закона управления с функцией насыщения и применении функции Ляпунова.

Ключевые слова: механические системы с неизвестными параметрами, управление с функцией насыщения, запаздывание, функция Ляпунова.

1. Введение

Рассматривается задача слежения для механических систем, описываемых нестационарными нелинейными уравнениями, при построении непрерывного управления с насыщением с учетом неизвестного и изменяющегося запаздывания в цепи обратной связи и неизвестных массо-инерционных характеристик системы. В работе [1] предложен метод решения задачи слежения для одного класса механических систем, основанный на построении релейных управлений и применении теории "замороженных" коэффициентов в предположении, что параметры системы и сама отслеживаемая траектория изменяются достаточно медленно, чтобы этим изменением можно было пренебречь. В работе [2] предложен подход, основанный на построении релейных управлений и использовании вектор-функции Ляпунова и позволяющий решать задачи слежения не только для "медленных" движений механических систем [1], а также при существенном изменении параметров системы и отслеживаемой траектории. Известно [3], что релейные законы управления позволяют выводить систему на заданное многообразие движений за конечное время и обеспечивают дальнейшее движение системы вдоль заданного многообразия в скользящем режиме. При этом недостатком релейных управлений является возникновение чаттера (биений) при движении системы в скользящем режиме, обусловленное несовершенством устройств управления и наличием запаздывания, что приводит к возникновению высокочастотных колебаний в системе, ухудшающих точность управления. В настоящей работе построен закон управления, являющийся непрерывной аппроксимацией релейного и позволяющий уменьшить чаттер, возникающий при наличии запаздывания. Получены оценки максимального допустимого запаздывания и нормы неизвестной части матрицы инерции системы. Теоретические результаты применены в решении задачи слежения для мобильного робота с роликонесущими колесами.

¹ Доцент кафедры информационной безопасности и теории управления, Ульяновский государственный университет, г. Ульяновск; peregudovaoa@sv.ulsu.ru.

2. Постановка задачи

Рассмотрим задачу управления движением механической системы, описываемой уравнением

$$H(t, q)\ddot{q} + f(t, q, \dot{q}) = u(t - h(t)), \quad t \geq 0, \quad (2.1)$$

где $q \in \mathbb{R}^n$ — вектор обобщённых координат; $H(t, q) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ — невырожденная матрица с непрерывными ограниченными элементами, положительно-определённая, имеющая следующее представление

$$H(t, q) = \hat{H}(t, q) + \Delta H(t, q), \quad (2.2)$$

где $\hat{H}(t, q)$ — положительно-определённая и известная матрица, а матрица $\Delta H(t, q)$ неизвестна; $f(t, q, \dot{q}) \in \mathbb{R}^n$ — вектор с непрерывными элементами, $u \in \mathbb{R}^n$ — вектор управляющих воздействий, $h(t)$ — ограниченная непрерывная функция запаздывания в управлении, $0 \leq h(t) \leq h_0 = \text{const} > 0$.

Рассмотрим необходимые в дальнейшем определения матричных норм.

О п р е д е л е н и е 2.1. *Операторной нормой $\|A\|$ матрицы $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, подчинённой векторной норме $|\cdot|$, называется величина*

$$\|A\| = \max_{x \in \mathbb{R}^n, |x|=1} |Ax| = \max_{x \neq 0} \frac{|Ax|}{|x|}.$$

В 1958 году в работах С.М. Лозинского [4] и Дж. Далквиста [5] впервые было дано определение логарифмической нормы матрицы.

О п р е д е л е н и е 2.2. *Логарифмической нормой $\lg n \|A\|$ матрицы $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ называется величина*

$$\lg n \|A\| = \lim_{r \rightarrow +0} \frac{1}{r} [\|I + rA\| - 1].$$

Согласно определению логарифмическая норма матрицы может принимать и отрицательные значения и поэтому не является матричной нормой в классическом смысле этого слова.

Введём в пространстве $\mathbb{R}^n$ прямоугольную векторную норму

$$|x| = \max\{\alpha_1|x_1|, \alpha_2|x_2|, \dots, \alpha_n|x_n|\} \quad \forall x \in \mathbb{R}^n, \quad (2.3)$$

где α_i ($i = 1, 2, \dots, n$) — некоторые положительные постоянные. Тогда соответствующие выражения для операторной и логарифмической матричных норм примут вид

$$\|A\| = \max_{1 \leq i \leq n} (|a_{ii}| + \sum_{j \neq i} \frac{\alpha_j}{\alpha_i} |a_{ij}|); \quad \lg n \|A\| = \max_{1 \leq i \leq n} (a_{ii} + \sum_{j \neq i} \frac{\alpha_j}{\alpha_i} |a_{ij}|). \quad (2.4)$$

Перейдём к постановке задачи слежения для системы (2.1). Пусть $q^*(t) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$ — отслеживаемая траектория объекта (2.1). Следящая система может быть записана в виде, аналогичном (2.1) с некоторой начальной функцией $\varphi : [-h_0, 0] \rightarrow \mathbb{R}^n$, $q(s) = \varphi(s)$, $-h_0 \leq s \leq 0$.

Задача слежения состоит в отыскании управления по принципу обратной связи $u(t - h(t))$, удовлетворяющего ограничению $|u| \leq u_0 = \text{const} > 0$, и ограничений на параметры системы (2.1), при которых для некоторого числа $\varepsilon > 0$ (ошибки слежения) найдется число $\delta_0 = \delta_0(\varepsilon) > 0$, что для любой начальной функции $\varphi(s)$, $-h_0 \leq s \leq 0$, удовлетворяющей условию

$$\max\left\{\max_{-h_0 \leq s \leq 0} |\varphi(s) - q^*(s)|, \max_{-h_0 \leq s \leq 0} |\dot{\varphi}(s) - \dot{q}^*(s)|\right\} < \delta_0, \quad (2.5)$$

для решения $q(t)$ системы (2.1) с начальным условием $q(s) = \varphi(s)$, $-h_0 \leq s \leq 0$, будет справедливо неравенство $|q(t) - q^*(t)| < \varepsilon \quad \forall t \geq 0$.

3. Решение задачи слежения

Запишем систему уравнений (2.1) в виде

$$\hat{H}(t, q)\ddot{q} + \hat{f}(t, q, \dot{q}) = u(t - h(t)) + g(t, q, \dot{q}) - \Delta H(t, q)H^{-1}(t, q)u(t - h(t)), \quad (3.1)$$

где вектор $g(t, q, \dot{q})$ имеет выражение

$$g(t, q, \dot{q}) = \Delta H(t, q)H^{-1}(t, q)f(t, q, \dot{q}) - \Delta f(t, q, \dot{q}). \quad (3.2)$$

Здесь $f(t, q, \dot{q}) = \hat{f}(t, q, \dot{q}) + \Delta f(t, q, \dot{q})$, где вектор $\hat{f}(t, q, \dot{q})$ не содержит элементов матрицы $\Delta H(t, q)$ и её производных.

Преобразуем уравнение (3.1). Умножая обе части этого уравнения слева на $\hat{H}^{-1}(t, q)$, получим

$$\ddot{q} + \hat{H}^{-1}(t, q)\hat{f}(t, q, \dot{q}) = \hat{H}^{-1}(t, q)u(t - h(t)) + \hat{H}^{-1}(t, q)g(t, q, \dot{q}) - \dots - \hat{H}^{-1}(t, q)\Delta H(t, q)H^{-1}(t, q)u(t - h(t)). \quad (3.3)$$

Введём отклонения

$$x = q - q^*(t), \quad \dot{x} = \dot{q} - \dot{q}^*(t)$$

Тогда в отклонениях уравнение (3.3) примет вид

$$\ddot{x} + A^*(t)\dot{x} + B^*(t)x = A_1(t, x)u(t - h(t)) + \dots + F^*(t) + G^*(t, x, \dot{x}) + D^*(t, x, \dot{x}) + E^*(t, x)u(t - h(t)), \quad (3.4)$$

где матрицы $A_1(t, x)$, $A^*(t)$, $B^*(t)$, $E^*(t, x)$ и векторы $F^*(t)$, $G^*(t, x, \dot{x})$ и $D^*(t, x, \dot{x})$ имеют соответственно выражения

$$\begin{aligned} A_1(t, x) &= \hat{H}^{-1}(t, x + q^*(t)), \quad F^*(t) = L(t, q^*(t), \dot{q}^*(t)) - \ddot{q}^*(t), \\ A^*(t) &= \left. \frac{\partial L(t, q, \dot{q})}{\partial \dot{q}} \right|_{q=q^*(t), \dot{q}=\dot{q}^*(t)}, \quad B^*(t) = \left. \frac{\partial L(t, q, \dot{q})}{\partial q} \right|_{q=q^*(t), \dot{q}=\dot{q}^*(t)}, \\ E^*(t, x) &= -\hat{H}^{-1}(t, x + q^*(t))\Delta H(t, x + q^*(t))H^{-1}(t, x + q^*(t)), \\ G^*(t, x, \dot{x}) &= O(|x|^2 + |\dot{x}|^2), \\ D^*(t, x, \dot{x}) &= \hat{H}^{-1}(t, x + q^*(t))g(t, x + q^*(t), \dot{x} + \dot{q}^*(t)), \end{aligned}$$

а вектор-функция $L(t, q, \dot{q})$ определяется по формуле

$$L(t, q, \dot{q}) = \hat{H}^{-1}(t, q)\hat{f}(t, q, \dot{q}).$$

Далее в статье будем считать, что символом C обозначена невырожденная постоянная матрица $C \in \mathbb{R}^{n \times n}$, такая, что для соответствующей логарифмической нормы матрицы $(-C)$ выполняется неравенство

$$\lg n \| -C \| < 0. \quad (3.5)$$

Введём также следующие обозначения

$$c = -\frac{\|C\|}{\lg n \| -C \|}, \quad c_1 = \|C^{-1}\|.$$

Управление u в системе (2.1) будем искать в виде

$$u(t, q, \dot{q}) = \hat{H}(t, q_0(t))K \cdot \dots \cdot \text{sat} [q(t - h(t)) - q^*(t - h(t)) + C^{-1}(\dot{q}(t - h(t)) - \dot{q}^*(t - h(t)))] , \quad (3.6)$$

где $K \in R^{n \times n}$ — некоторая постоянная матрица, подлежащая определению, такая, что $\|\hat{H}(t, q_0(t))K\|1 \leq u_0 \quad \forall t \geq t_0 \quad (1 = (1, 1, \dots, 1) \in \mathbb{R}^n)$; $\text{sat}(z) = (\text{sat}(z_1), \dots, \text{sat}(z_n))^T$ — функция насыщения вида

$$\text{sat}(z_i) = \begin{cases} \text{sign}(z_i), & \text{если } |z_i| \geq \gamma, \\ z_i/\gamma, & \text{если } |z_i| < \gamma, \end{cases} \quad \gamma = \text{const} > 0, \quad i = \overline{1, n},$$

Т е о р е м а 3.1. Пусть найдутся положительные постоянные $\varepsilon, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_0, f_0, \Delta f_0, \delta_0, a_1, a_2, b$ и N , такие, что выполняются следующие условия:

1) для всех $t \geq 0$ и для любых векторов $x, y \in \mathbb{R}^n$, таких, что $|x| < \delta_0, |y| < \delta_0$, имеют место неравенства

$$|C^{-1}G^*(t, x, y)| \leq N(|x|^2 + |y|^2);$$

$$\lg n \| -H(t, x + q^*(t)) \| \leq -\varepsilon_1, \quad \|\Delta H(t, x + q^*(t))\| \leq \varepsilon_2, \quad \|\hat{H}^{-1}(t, x + q^*(t))\| \leq \varepsilon_3,$$

$$\|C^{-1}\hat{H}^{-1}(t, x + q^*(t))\Delta H(t, x + q^*(t))H^{-1}(t, x + q^*(t))\hat{H}(t, q^*(t))K\|1 \leq \varepsilon_0,$$

$$|f(t, x + q^*(t), y + \dot{q}^*(t))| \leq f_0, \quad |\Delta f(t, x + q^*(t), y + \dot{q}^*(t))| \leq \Delta f_0;$$

2) для всех $t \geq 0$ и для любых векторов $x \in \mathbb{R}^n$, таких, что $|x| < \gamma$, выполняется неравенство

$$\|C^{-1}A_1(t, x)A_1^{-1}(t, 0)K\|(c\| - C + C^{-1}A^*(t)C - C^{-1}B^*(t)\| + \lg n \|C - C^{-1}A^*(t)C\| + \\ + \frac{c}{\gamma}|C^{-1}F^*(t)| + cN\gamma + \frac{c}{\gamma}c_1\varepsilon_3(\varepsilon_2f_0/\varepsilon_1 + \Delta f_0) + \frac{c}{\gamma}\varepsilon_0 + \frac{c}{\gamma}\|C^{-1}A_1(t, x)A_1^{-1}(t, 0)K\|1) \leq b;$$

3) для любого $\forall \delta: \gamma \leq \delta \leq \delta_0$, и для всех $t \geq 0, |x| < \delta$, выполняется неравенство

$$(c\| - C + C^{-1}A^*(t)C - C^{-1}B^*(t)\| + \lg n \|C - C^{-1}A^*(t)C\|)\delta + c|C^{-1}F^*(t)| + \\ + 2N\delta^2 + cc_1\varepsilon_3(\varepsilon_2f_0/\varepsilon_1 + \Delta f_0) + c\varepsilon_0 + \lg n \|C^{-1}A_1(t, x)A_1^{-1}(t, 0)K\|1 \leq -a_1;$$

4) для всех $t \geq 0, \varepsilon < |x| < \gamma$, выполняется неравенство

$$(c\| - C + C^{-1}A^*(t)C - C^{-1}B^*(t)\| + \lg n \|C - C^{-1}A^*(t)C\| + \\ + \frac{c}{\gamma} \lg n \|C^{-1}A_1(t, x)A_1^{-1}(t, 0)K\|)\varepsilon + c|C^{-1}F^*(t)| + 2N\gamma^2 + cc_1\varepsilon_3(\varepsilon_2f_0/\varepsilon_1 + \Delta f_0) + c\varepsilon_0 \leq -a_2;$$

5) максимальная величина запаздывания h_0 удовлетворяет ограничению

$$h_0 < \frac{\min\{a_1, a_2\}}{b}.$$

Тогда решение системы (2.1) отслеживает траекторию $q^*(t)$ посредством управления (3.6) с погрешностью слежения, не превышающей ε .

Д о к а з а т е л ь с т в о. Сделаем в системе (3.4) замену переменных

$$y_1 = x, \quad y_2 = x + C^{-1}\dot{x}$$

и построим для полученной системы

$$\begin{cases} \dot{y}_1 = -Cy_1 + Cy_2, \\ \dot{y}_2 = (C + C^{-1}A^*(t)C - C^{-1}B^*(t))y_1 + (C - C^{-1}A^*(t)C)y_2 + C^{-1}F^*(t) + \\ + C^{-1}G_1^*(t, y_1, y_2) + C^{-1}D_1^*(t, y_1, y_2) + C^{-1}A_1(t, y_1)A_1^{-1}(t, 0)K \operatorname{sat}(y_2(t - h(t))) + \\ + C^{-1}E^*(t, y_1)A_1^{-1}(t, 0)K \operatorname{sat}(y_2(t - h(t))), \end{cases} \quad (3.7)$$

(где векторы $G_1^*(t, y_1, y_2)$ и $D_1^*(t, y_1, y_2)$ определяются по формулам $G_1^*(t, y_1, y_2) = G^*(t, y_1, -Cy_1 + Cy_2)$, $D_1^*(t, y_1, y_2) = D^*(t, y_1, -Cy_1 + Cy_2)$) непрерывную функцию Ляпунова $V(y_1, y_2) = \max(V_1(y_1), V_2(y_2))$ с компонентами вида

$$V_1(y_1) = |y_1|, \quad V_2(y_2) = c|y_2|.$$

Для оценки производной функции Ляпунова в силу системы дифференциальных уравнений с запаздыванием будем применять подход Б.С. Разумихина [6].

С использованием преобразований вида

$$\operatorname{sat}(y_2(t - h(t))) = \operatorname{sat}(y_2(t)) - h(t)\frac{d}{dt}\operatorname{sat}(y_2(\tau)), \quad \tau \in [t - h(t), t]$$

можно показать, что при выполнении условий теоремы для правой производной функции Ляпунова V в силу системы (3.7) на множестве функций $\varphi_1, \varphi_2 : [-2h_0, 0] \rightarrow \mathbb{R}$, удовлетворяющих условиям: $|\varphi_1(s)| < \delta_0$, $|\varphi_2(s)| < \delta_0/c$, $|\varphi_1(s)| \geq \varepsilon$, $|\varphi_2(s)| \geq \varepsilon/c$, и

$$V(\varphi_1(s), \varphi_2(s)) \leq V(\varphi_1(0), \varphi_2(0)), \quad -2h_0 \leq s \leq 0,$$

имеет место неравенство

$$\dot{V} \leq -\min\{a_1, a_2\} + h_0b < 0. \quad (3.8)$$

Действительно, преобразуем второе уравнение системы (3.7) к виду

$$\begin{aligned} \dot{y}_2 = & (C + C^{-1}A^*(t)C - C^{-1}B^*(t))y_1 + (C - C^{-1}A^*(t)C)y_2 + C^{-1}F^*(t) + \\ & + C^{-1}G_1^*(t, y_1, y_2) + C^{-1}D_1^*(t, y_1, y_2) + C^{-1}A_1(t, y_1)A_1^{-1}(t, 0)K[\operatorname{sat}(y_2(t)) + h(t)\frac{d}{dt}\operatorname{sat}(y_2(\tau))] \\ & + C^{-1}E^*(t, y_1)A_1^{-1}(t, 0)K \operatorname{sat}(y_2(t - h(t))), \end{aligned}$$

и замечая, что для правой производной функции насыщения имеет место равенство

$$\frac{d}{dt}\operatorname{sat}(y_{2i}(\tau)) = \begin{cases} 0, & \text{если } |y_{2i}(\tau)| \geq \gamma; \\ \dot{y}_{2i}(\tau)/\gamma, & \text{если } |y_{2i}(\tau)| < \gamma. \end{cases} \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

получим выполнение неравенства (3.8). А это обеспечивает выполнение неравенства $|q(t) - q^*(t)| < \varepsilon \quad \forall t \geq 0$ для движений $q(t)$, удовлетворяющих начальному условию (2.5) на интервале $[-2h_0, 0]$.

Д о к а з а т е л ь с т в о з а к о н ч е н о.

Доказанная теорема устанавливает максимально допустимое запаздывание h_0 в системе и величину начальных возмущений δ_0 . Эффективность ее состоит в следующем:

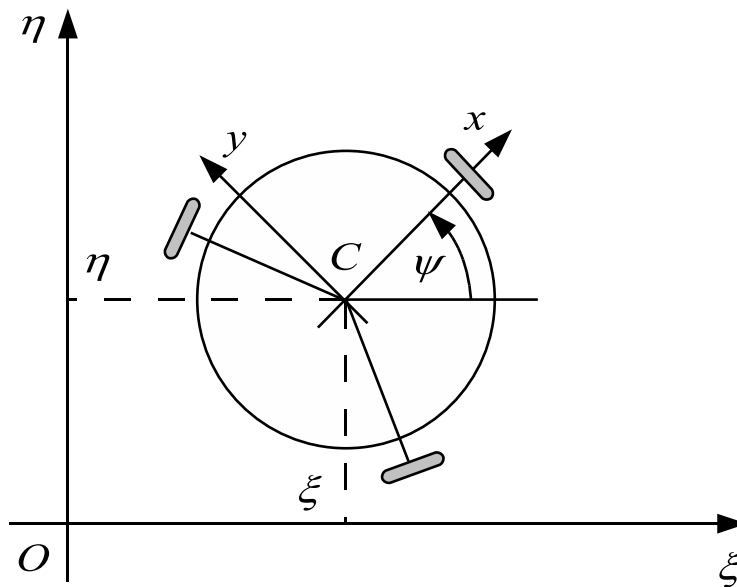
1) теорема 3.1 позволяет решать задачи слежения для механических систем, описываемых нестационарными уравнениями (матрица H и вектор f в уравнении

(2.1) предполагаются зависящими явно от времени). Таким образом, теорему 3.1 можно применять, например, для механических систем на подвижном основании, с переменными массами и т.д.;

2) проверка условий теоремы 3.1 сводится к довольно простым операциям вычисления операторных и логарифмических матричных норм, соответствующих прямоугольной векторной норме (2.3), и не требует вычисления и оценки собственных значений нестационарных матриц, что эффективно при проведении вычислительных расчётов;

3) выбор закона управления на основе непрерывной функции насыщения позволяет существенно уменьшить чаттер по сравнению с релейным управлением.

Пример 3.1. Рассмотрим задачу об отслеживании траектории мобильного колесного робота, состоящего из четырех тел: платформы и трех колес вида "omni-directional".



Р и с у н о к 3.1

Мобильный робот с тремя роликонесущими колесами

Платформа перемещается по горизонтальной поверхности. Центр масс робота расположен в точке C платформы. Углы между осями колес составляют 120° . На колесах робота закреплены ролики, оси вращения которых лежат в плоскости соответствующего колеса. При этом рассматривается простейшая модель такого колеса, в которой не учитывается динамика роликов и предполагается, что все ролики лежат в одной плоскости и слиты в единый опоясывающий колесо тор с сечением бесконечно малого радиуса. В работе [7] выведены уравнения движения робота и построено точное решение уравнений, в случае, когда на двигатели постоянного тока, установленные на колесах, подается постоянное напряжение. В работе [8] решается задача стабилизации программного движения робота при помощи пропорционально-интегральных регуляторов, при этом масса колес не учитывается.

В предположении, что движение робота происходит без проскальзывания под действием моментов, развиваемых тремя независимыми электродвигателями постоянного тока, получены [7] следующие уравнения движения мобильного робота

$$H\ddot{q} + f(\dot{q}) = P(q)u, \quad (3.9)$$

$$q = (\xi, \eta, \psi)^T, \quad H = \begin{pmatrix} m & 0 & 0 \\ 0 & m & 0 \\ 0 & 0 & I_s \end{pmatrix}, \quad f(\dot{q}) = \begin{pmatrix} h\dot{\xi} + m_d\psi\dot{\eta} \\ h\dot{\eta} - m_d\psi\dot{\xi} \\ 2a^2h\dot{\psi} \end{pmatrix},$$

$$P(q) = \begin{pmatrix} \sin \psi & \sin\left(\psi + \frac{2\pi}{3}\right) & \sin\left(\psi + \frac{4\pi}{3}\right) \\ -\cos \psi & -\cos\left(\psi + \frac{2\pi}{3}\right) & -\cos\left(\psi + \frac{4\pi}{3}\right) \\ -a & -a & -a \end{pmatrix}.$$

Здесь ξ и η — координаты центра C платформы робота в неподвижной декартовой системе координат $O\xi\eta\zeta$; ψ — угол поворота платформы вокруг вертикали, отсчитываемый от оси ξ ; $u = (u_1, u_2, u_3)^T$, u_1 , u_2 и u_3 — управляющие напряжения, подаваемые на электродвигатели постоянного тока; a — расстояние от центра C платформы до центра каждого колеса;

$$m = m_0 + 3m_1 \left(1 + \frac{r_1^2}{2r^2}\right), \quad m_s = m_0 + 3m_1, \quad m_d = m - m_s,$$

$$I_s = m_0\rho_0^2 + 3m_1 \left[\rho_1^2 + a^2 \left(1 + \frac{2r_1^2}{r^2}\right)\right], \quad h = \frac{3c_\nu}{2r^2},$$

m_0, m_1 — массы платформы и колеса робота соответственно; ρ_0, ρ_1 — соответственно радиусы инерции платформы и колеса относительно вертикальной оси, проходящей через их центры масс; r — радиус колеса, r_1 — радиус инерции колеса относительно оси вращения; c_ν — коэффициент момента противоэлектродвижущей силы.

Пусть матрица инерции имеет вид

$$H = \text{diag}(m + \Delta m, m + \Delta m, I_s + \Delta I_s), \quad H = \hat{H} + \Delta H,$$

где $\hat{H}$ — известная положительно-определённая матрица, а матрица ΔH неизвестна.

Численное моделирование проводилось при следующих значениях параметров робота и отслеживаемой траектории

$$m = 19 \text{ кг}, \quad m_d = 3 \text{ кг}, \quad I_s = 3.76 \text{ кг} \cdot \text{м}^2,$$

$$h = 1.66 \text{ Н} \cdot \text{с}/\text{м}, \quad a = 0.2 \text{ м},$$

$$\xi_0(t) = 0.2t \text{ м}, \quad \eta_0(t) = \sin(0.2t) \text{ м}, \quad \psi_0(t) = 2t + 1 \text{ рад}.$$

С использованием теоремы 3.1 получено, что при ограничениях

$$h(t) \leq h_0 = 0.1 \text{ с}, \quad |\Delta m| \leq 2 \text{ кг},$$

управление вида

$$u = -\alpha P^{-1}(q_0(t - h(t))) \hat{H} \text{ sat}(q(t - h(t)) - q_0(t - h(t)) + \beta(\dot{q}(t - h(t)) - \dot{q}_0(t - h(t))))$$

со значениями $\alpha = 7$, $\beta = 1$ решает задачу об отслеживании заданной траектории $q_0(t)$ робота с погрешностью слежения, не превышающей значения $\varepsilon = 0.05$.

Следует отметить, что использование релейного управления при заданном ограничении на величину запаздывания не обеспечивает решение поставленной задачи.

Работа выполнена при финансовой поддержке АВЦП "Развитие научного потенциала высшей школы" (2.1.1/6194) и ФЦП "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 гг" (НК-433П, П/2578).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ефремов М.С., Поляков А.Е., Стрыгин В.В. Новый алгоритм слежения для некоторых механических систем// ПММ. – 2005. – Т. 69. – Вып. 1. – С.30-41.
2. Перегудова О.А. К задаче слежения для механических систем с запаздыванием в управлении// Автоматика и телемеханика. – 2009. – №5. – С. 95-105.
3. Халил Х.К. Нелинейные системы. – М.; Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", Институт компьютерных исследований, 2009. – 832 с.
4. Лозинский С.М. Оценка погрешностей численного интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений// Известия вузов. Математика. – 1958. – №5. – С. 52-90.
5. Dahlquist G. Stability and Error Bounds in the Numerical Intergration of Ordinary Differential Equations// Almqvist & Wiksells, Uppsala. – 1958; Transactions on the Royal Institute of Technology, Stockholm. – 1959. – №130.
6. Разумихин Б.С. Устойчивость эредитарных систем. – М.: Наука, 1988. – 106 с.
7. Мартыненко Ю.Г., Формальский А.М. О движении мобильного робота с роликонесущими колесами// Известия РАН. Теория и системы управления. – 2007. – №6. – С. 142-149.
8. Liu Y., Zhu J.J., Williams II R.L., Wu J. Omni-directional mobile robot controller based on trajectory linearization// Robotics and Autonomous Systems. – 2008. – Vol. 56. – p. 461-479.

On control of mechanical systems motion with unknown mass-inertia parameters on the base of saturation function.

© O. A. Peregodova²

Abstract. In the work the problem on tracking for mechanical systems with unknown mass-inertia parameters is solved with taking into account feedback delay. The investigation is based on construction of continuous control with saturation function and use of Lyapunov function.

Key Words: mechanical systems with unknown parameters, control with saturation function, delay, Lyapunov function.

²Assistant Professor of Information Security and Control Theory Chair, Ulyanovsk State University, Ulyanovsk; peregodovaoa@sv.ulsu.ru.

УДК 534.113

О решении задачи диагностирования дефектов в виде малой полости в стержне

© А.М. Ахтямов¹, А. Р. Аюпова²

Аннотация. В статье предлагается метод, позволяющий вычислить местоположение и объем двух полостей в стержне по собственным частотам изгибных колебаний. Рассматривается случай шарнирного закрепления концов стержня. Полость моделируется отрицательной сосредоточенной массой.

Ключевые слова: вибродиагностика, стержень, полость, собственные частоты.

1. Введение

В последнее время при определении технического состояния объекта с целью поиска и обнаружения дефектов используется вибродиагностика. Данное направление технической диагностики позволяет судить о состоянии какой-либо недоступной для визуального осмотра части механической установки сложной структуры, проводить анализ её технического состояния, не используя дорогостоящую разборку и не нарушая приработку деталей. Это удобный и наиболее безопасный способ, не требующий больших затрат времени. В данной статье рассматривается дефект типа полость в элементах конструкции, которые можно представить как однородный стержень. Рассматривается задача об изгибных колебаниях такого стержня для случая шарнирного закрепления, хотя разработанный метод применим и для других видов закрепления.

Модель сначала была построена для определения объема и местоположения одной полости. Но часто при эксплуатации механических систем дефекты образуются на нескольких участках системы. Поэтому задача диагностирования нескольких полостей весьма актуальна.

Пусть балка длины L и массы m имеет дефекты в виде малой полости. Эти полости находятся от левого конца балки на расстоянии x_1 и x_2 соответственно. Объемы полостей считаем намного меньшими объема стержня. Величину объема полости смоделируем абсолютной величиной отрицательной сосредоточенной массы. Возможность моделирования полости таким способом обоснована следующими соображениями. Вычислив значения моментов инерций и площади сечения для стержней с полостью и без, можно показать, что значение момента инерции при образовании дефекта остается практически неизменным, тогда как площадь сечения уменьшается пропорционально размерам полости.

2. Прямая задача о колебаниях балки

Как известно, уравнение изгибных колебаний призматической балки с постоянной жесткостью на изгиб имеет вид:

$$EI \frac{\partial^4 u(x, t)}{\partial x^4} + \rho F \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = 0,$$

¹Профессор, ведущий научный сотрудник лаборатории механики твердого тела Института механики Уфимского научного центра РАН, г. Уфа; AkhtyamovAM@mail.ru

²Старший преподаватель кафедры математического моделирования, Нефтекамский филиал Башкирского государственного университета, г. Нефтекамск; aigul9@yandex.ru

где $u(x, t)$ — прогиб текущей точки оси стержня, EI — изгибная жесткость стержня, ρ — плотность стержня, F — площадь поперечного сечения стержня, ω — частотный параметр.

Задача об изгибных колебаниях стержня длины L с шарнирно-закрепленными концами заменой $u(x, t) = y(x) \cos \omega t$ сводится к следующей спектральной задаче:

$$y^{(4)} = \lambda^4 y, \quad (2.1)$$

$$y(0) = 0, \quad y''(0) = 0, \quad y(L) = 0, \quad y''(L) = 0, \quad (2.2)$$

где $\lambda^4 = \rho F \omega^2 / \alpha$, $\alpha = EI$.

Переходя в задаче (2.1)–(2.2) к безразмерным переменным

$$\xi = \frac{x}{L}, \quad \lambda^4 = \frac{L^4 \rho F \omega^2}{EI}, \quad (2.3)$$

получаем следующую задачу на собственные значения:

$$y^{(4)}(\xi) = \lambda^4 y(\xi), \quad (2.4)$$

$$y(0) = 0, \quad y''(0) = 0, \quad y(1) = 0, \quad y''(1) = 0, \quad (2.5)$$

Ввиду того, что полость смоделировали как отрицательную массу, используем в этой задаче условия сопряжения для сосредоточенной массы. Эти условия хорошо известны и записываются следующим образом:

$$\begin{aligned} y_-(\xi_s) &= y_+(\xi_s), \\ y'_-(\xi_s) &= y'_+(\xi_s), \\ (EI y''_-(\xi_s)) &= (EI y''_+(\xi_s)), \\ (EI y'''_-(\xi_s)) &= (EI y'''_+(\xi_s)) - m_s \omega^2 y(\xi_s), \end{aligned} \quad (2.6)$$

где $s=1,2$, и m_s представим как отрицательную сосредоточенную массу, абсолютное значение которой принимается за объем полости.

Из (2.3) следует, что собственные частоты ω_k балки с полостью находятся по формуле

$$\omega_k = \sqrt{\frac{EJ}{\rho F}} \left(\frac{\lambda_k}{L} \right)^2, \quad (2.7)$$

где λ_k — собственные значения граничной задачи для уравнения (2.4) с краевыми условиями (2.5) и условиями сопряжения ((2.6)).

Собственные значения — это такие значения λ , при которых краевая задача (2.4), (2.5), (2.6) имеет нетривиальные решения. Нетривиальные решения $y_1(\xi, \lambda)$, $y_2(\xi, \lambda)$ и $y_3(\xi, \lambda)$ уравнения (2.4) левее и правее каждой полости записываются следующим образом:

$$y_i(\xi, \lambda) = A_i z_1(\xi, \lambda) + B_i z_2(\xi, \lambda) + C_i z_3(\xi, \lambda) + D_i z_4(\xi, \lambda), \quad i = 1, 2, 3.$$

Здесь

$$\begin{aligned} z_1(\xi, \lambda) &= (\cos \lambda \xi + \operatorname{ch} \lambda \xi) / 2, \\ z_2(\xi, \lambda) &= (\sin \lambda \xi + \operatorname{sh} \lambda \xi) / (2\lambda), \\ z_3(\xi, \lambda) &= (-\cos \lambda \xi + \operatorname{ch} \lambda \xi) / (2\lambda^2), \\ z_4(\xi, \lambda) &= (-\sin \lambda \xi + \operatorname{sh} \lambda \xi) / (2\lambda^3) \end{aligned} \quad (2.8)$$

являются линейно независимыми решениями уравнения (2.4), которые образуют фундаментальную систему Коши и выражаются через функции Крылова [23].

Константы A_i , B_i , C_i , D_i ($i = 1, 2, 3$) являются решениями системы двенадцати алгебраических уравнений (2.5), (2.6). Нули определителя $\Delta(\lambda)$ этой системы и являются собственными значениями краевой задачи (2.4), (2.5), (2.6). Ввиду громоздкости определителя $\Delta(\lambda)$ опустим здесь уравнение для нахождения собственных значений.

3. Определение объемов двух полостей по двум собственным частотам

Итак, нами исследована прямая задача нахождения собственных частот колебаний балки с двумя полостями по известным граничным условиям и условиям сопряжения. Рассмотрим теперь обратную задачу.

Если ω_k , $k = 1, 2$, известны, то объемы полостей $|m_1|$ и $|m_2|$ или же их местоположения x_1 и x_2 при известных объемах находятся из системы

$$\Delta(\lambda_k) = 0, \quad (3.1)$$

($k = 1, 2$) нелинейных алгебраических уравнений относительно неизвестных $\xi_s \in [0, 1]$, $m_s \in (-0,0001; -0,1)$.

Пример 3.1. Для $L = 1$, $x_1 = 0.2$, $x_2 = 0.4$, $\lambda_1 = 6.2958969975$ и $\lambda_2 = 9.4435944492$, с абсолютной погрешностью 10^{-20} получаем следующее решение системы (3.1): $\{m_1 = -0.0001, m_2 = -0.0002\}, \{m_1 = -0.00006, m_2 = -0.0003\}$. Отметим, что первый комплект корней в точности совпадает с теми значениями, по которым и находились собственные значения λ_k , $k = 1, 2$ в прямой задаче. Выбор правильного решения из двух найденных требует использования дополнительных условий. Подобные условия были найдены для задачи диагностирования сосредоточенных масс на балке. В данный момент они разрабатываются и для определения полости.

Предложенный метод может быть использован для определения объемов полостей в стержне по его изгибным колебаниям, а в некоторых случаях даёт также возможность судить о местоположениях полости. Необходимо отметить, что численные исследования, проведенные для консольной балки с полостью, в точности совпадают с результатами работы Ватульяна [8], что подтверждает правильность метода и хорошее согласование с известными результатами.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Артоболевский И. И., Бобровницкий Ю. И., Генкин М. Д. Введение в акустическую динамику машин. М.: Наука, 1979.
2. Павлов Б.В. Акустическая диагностика механизмов. М.: Машиностроение, 1971.
3. Айнола Л. Я. Обратная задача о собственных колебаниях упругих оболочек // ПММ. 1971. № 2. С. 358–364.
4. Глаголевский Б.А., Москаленко И.Б. Низкочастотные акустические методы контроля в машиностроении Л.: Машиностроение. 1977.
5. Тукмаков А. Л., Аксенов И. Б. О распознавании объектов на основе анализа акустического отклика при помощи функции числа состояний динамической системы // Изв. вузов. Авиационная техника. 2003. № 1. С. 62–67.
6. Ваньков Ю.В., Казаков Р.Б., Яковлева Э.Р. Собственные частоты изделия как информативный признак наличия дефектов // Электронный журнал «Техническая акустика». 2003. 5. С.1–7
7. Романов В. Г. Обратные задачи математической физики. М. Наука. 1984.

8. Ватульян А. О., Солуянов Н. О. Об определении местоположения и размера полости в упругом стержне // Дефектоскопия. 2005. № 9. С. 44–56.
9. Баранов И. В., Ватульян А. О., Соловьев А. Н. Об одном генетическом алгоритме и его применении в обратных задачах идентификации упругих сред // Вычисл. технологии. 2006. № 3. С. 14–25.
10. Бочарова О. В., Ватульян А. О., Жарков Р. С. Реконструкция малых полостей в упругих стержнях // Изв. вузов Сев.-Кавк. региона. Естеств. науки. 2006. № 2. С. 28–32.
11. Ватульян А. О., Солуянов Н. О. Идентификация полости в упругом стержне при анализе поперечных колебаний // Прикладная механика и техническая физика. 2008. Т. 49. № 6. С. 152–158.
12. Ильгамов М. А. Диагностика повреждений вертикальной штанги // Труды Института механики Уфимского научного центра РАН. Вып. 5. / Под ред. М.А.Ильгамова, С.Ф. Урманчеева, С.В. Хабирова. Уфа: Гилем, 2007. С. 201–211.
13. Ильгамов М. А., Хакимов А. Г. Диагностика повреждений вертикальной штанги // Труды Института механики Уфимского научного центра РАН. Вып. 5. / Под ред. М.А.Ильгамова, С.Ф. Урманчеева, С.В. Хабирова. Уфа: Гилем, 2007. С. 212–220.
14. Ахтямов А. М. Об определении краевого условия по конечному набору собственных значений // Дифференциальные уравнения. 1999. Т. 35. № 8. С. 1127–1128.
15. Ахатов И. Ш., Ахтямов А. М. Определение вида закрепления стержня по собственным частотам его изгибных колебаний // Прикладная математика и механика. 2001. Т. 65. Вып. 2. С. 290–298.
16. Ахтямов А.М. Можно ли определить вид закрепления колеблющейся пластины по ее звучанию? // Акустический журнал. 2003. Т. 49, № 3. С. 325–331.
17. Akhtyamov A.M., Mouftakhov A.V. Identification of boundary conditions using natural frequencies // Inverse Problems in Science and Engineering. 2004. Vol. 12. No. 4. P. 393–408.
18. Ахтямов А. М., Муфтахов А. В., Ямилова Л. С. Определение вида и параметров закрепления стержня по собственным частотам его колебаний // Акустический журнал. 2008. Т. 54, № 2. С. 181–188.
19. Ахтямов А. М., Сафина Г. Ф. Определение виброзащитного закрепления трубопровода // Прикладная механика и техническая физика. 2008. Т. 49. № 1. С. 139–147.
20. Ахтямов А. М. Теория идентификации краевых условий. Уфа: Гилем, 2008. 300 с.
21. Ахтямов А. М. Диагностирование нагруженности механической системы // Приборы и системы. Управление, контроль, диагностика. 2003. № 6. С. 60.
22. Томпсон Дж. М.Т. Неустойчивости и катастрофы в науке и технике: Пер. с англ. — М.: Мир, 1985. 254 с.

23. Вибрации в технике: Справочник. В 6-ти т. / Ред. совет: В. Н. Челомей (пред.). М.: Машиностроение, 1978. Т. 1. Колебания линейных систем / Под ред. В. В. Болотина. 1978.
24. Коллатц Л. Задачи на собственные значения (с техническими приложениями). М.: Наука, 1968. 503 с.
25. Ланкастер П. Теория матриц: Пер. с англ. М.: Наука, 1982.

On solving the problem of diagnosing defects in a small cavity in the rod.

© A. M. Akhtyamov³, A. R. Aupova⁴

Abstract. The article proposes a method that allows calculate the location and volume of two cavities in the rod on natural frequencies of flexural vibrations. The case hinged ends of the rod. The cavity is modeled negative concentrated mass.

Key Words: vibrodiagnostics, rod, cavity, eigenfrequencies.

³Senior Researcher of Mechanics Laboratory, of Institute of Mechanics of Ufa Research Center; AkhtyamovAM@mail.ru

⁴Senior lecturer of the mathematical modeling chair, Neftekamsky branch of the Bashkir State University, Neftekamsk; aigul9@yandex.ru

В СРЕДНЕВОЛЖСКОМ МАТЕМАТИЧЕСКОМ ОБЩЕСТВЕ

УДК 519.876.5

Метод поиска интервалов неопределенности кинетических констант химической реакции

© Э. Р. Ахматсафина¹

Аннотация. В работе рассматривается задача поиска интервалов неопределенности для кинетических констант химической реакции циклоалюминирования олефинов с использованием параллельных вычислительных систем. Описан и обоснован метод распараллеливания для решения задачи поиска интервалов неопределенности. Приведены результаты расчетов.

Ключевые слова: интервалы неопределенности, кинетические константы, циклоалюминирование олефинов, параллельные вычисления.

1. Введение

Традиционно, алюминийорганические соединения широко применяются для осуществления таких реакций как термическое гидроалюминирование олефинов, диенов и ацетиленов, восстановление карбонильных соединений, сложных эфиров и нитрилов. В ряду этих исследований к числу наиболее крупных достижений отечественной и мировой науки последних лет в области химии алюминийорганических соединений следует отнести открытие реакции каталитического циклоалюминирования непредельных соединений (*Реакция Джемилева*) с помощью простейших триалкил- и алкилгалогеналанов с участием Ti - и Zr -содержащих комплексных катализаторов, позволяющей синтезировать ранее неописанные классы трех-, пяти- и макроциклических алуминакарбоциклов.

Изучение механизмов сложных реакций металлокомплексного катализа, к которым относятся реакции циклоалюминирования, на сегодняшний день представляет огромный практический интерес. При этом возникают как физико-химические, так и математические проблемы. Физико-химические проблемы сводятся к тому, что очень трудно, а иногда практически не представляется возможным на существующем оборудовании измерить характеристики промежуточных соединений реакции, из чего следует математическая неоднозначность решения обратных задач определения кинетических констант. Математические проблемы предполагают значительный объем вычислений при поиске этой многомерной области для констант. Для повышения эффективности решения данной задачи целесообразно использовать высокопроизводительные параллельные вычислительные системы.

Целью исследования является описание метода поиска интервалов неопределенности кинетических констант с использованием многопроцессорных технологий, поиск интервалов неопределенности констант скоростей для реакции циклоалюминирования олефинов, физико-химическая интерпретация полученных результатов. Для проведения

¹Аспирант, Учреждение РАН Институт нефтехимии и катализа, г. Уфа; elzaahmat@mail.ru.

расчётов использовался суперкомпьютер Уфимского государственного авиационно-технического университета.

2. Постановка задачи и схема поиска областей неопределенности

Классическая постановка задач математической обработки эксперимента восходит к работам Лежандра и Гаусса и состоит в поиске таких значений параметров математического описания, при которых минимизируется какой-либо критерий соответствия расчета измерениям. Определение точки, соответствующей глобальному минимуму критерия — достаточно сложная вычислительная задача. Возникает вопрос: чем константы, соответствующие минимуму критерия, предпочтительнее констант, соответствующих некоторой окрестности критерия, если при этом сохраняется достаточная точность описания эксперимента, сопоставимая с его погрешностью? Этот вопрос об определении области в пространстве параметров, каждая точка внутри которого достаточно хорошо описывает измерения, был поставлен Л.В. Канторовичем [1] как решение системы неравенств:

$$\sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J (x_{ij}^{\text{э}} - x_{ij}^{\text{р}}) \leq \varepsilon_i. \quad (2.1)$$

Величины ε_i в системе неравенств (2.1) есть характеристики предельно допустимой погрешности эксперимента, информация о величине которой, как правило, присутствует. И тогда выполнение условий (2.1) означает, что модель описывает измерения в пределах, обусловленных величиной максимально допустимой погрешности измерений, что совершенно естественно.

Рассмотрение многомерной области для констант скоростей начнем с одномерного и двумерного случаев. Для одномерного случая область представляет собой интервал неопределенности. Определим интервал неопределенности как отрезок, вариация константы внутри которого сохраняет совместность системы неравенств (2.1). Для определения интервала по k_i константе необходимо решить две задачи математического программирования: найти $\min k_i$ и $\max k_i$ при выполнении ограничений (2.1).

В начальный момент времени нам известна начальная точка, принадлежащая искомому интервалу — точка, полученная в решении обратной задачи. Необходимо найти интервал по каждой из констант, беря начальную точку за исходную в поиске. Предлагается следующий алгоритм. Пусть ищется интервал неопределенности по k_i константе. Чтобы найти границы искомого интервала, нужно зафиксировать все константы, кроме k_i . Для этой константы выберем достаточно большой отрезок (например, $[0; 2k_i]$), содержащий исходную точку, покроем его равномерной сеткой с определенным достаточно малым шагом. В узлах сетки получим различные значения k_i константы, в каждом из узлов проверим выполнение системы неравенств (2.1). Если неравенства верны, то данный узел принадлежит искомому интервалу. Определяя наименьшее и наибольшее значения принадлежащих интервалу узлов, получаем значения границ интервала неопределенности по k_i константе. Аналогичным образом поступаем для поиска границ двумерной области — области по паре констант.

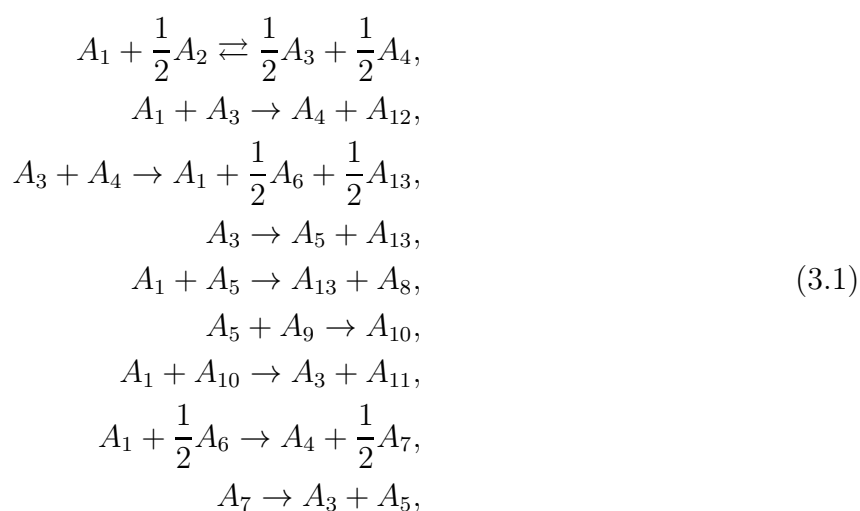
Оценим объем вычислений. Для определенности сначала будем искать двумерные области. Плоскость по паре констант покрываем сеткой — равномерной прямоугольной. Для нахождения интервалов неопределенности кинетических констант потребуется такой объем вычислений: прямую задачу придется решать $P = C_n^m \cdot q$ раз, где n — общее количество констант, m — количество констант, по набору которых получаем срез области,

q – количество узлов сетки, которой покрывается n -мерный куб. Например, количество констант $n = 10$, сетка двумерная 1000 на 1000 узлов, тогда потребуется $P = C_{10}^2 \cdot 1000000 = 45000000$ вычислений. Пусть одна прямая задача (одно вычисление) считается примерно 0.01 секунды. Тогда для поиска двумерной области придется затратить приблизительно 450000 секунд. Это составляет 125 часов или 5.2 дня. А если увеличить количество узлов сетки, если констант будет больше, если увеличить размерность области? Время расчетов увеличится на порядки! Поэтому решено было попробовать перейти на кластеры — использовать многопроцессорные вычисления для существенного ускорения расчетов по времени.

3. Объект исследования

Объектом исследования является разработанная на основании экспериментально обоснованной схемы процесса кинетическая модель реакции циклоалюминирования олефинов триэтилалюминием в присутствии Cp_2ZrCl_2 [2].

Для этой реакции схема химических превращений имеет вид (3.1), соответствующая ей система уравнений (3.2)



где $A_1 = Al(C_2H_5)_3$, $A_2 = Cp_2ZrCl_2$, $A_3 = Cp_2Zr(C_2H_5)Cl$, $Al(C_2H_5)_3$, $A_4 = ClAl(C_2H_5)_2$, $A_5 = Cp_2ZrCH_2CH_2Al(Cl)(C_2H_5)_2$, $A_6 = (Cl)Cp_2ZrCH_2CH_2ZrCp_2(Cl) \cdot 2[ClAl(C_2H_5)_2]$, $A_7 = (Cl)Cp_2ZrCH_2CH_2ZrCp_2(Cl) \cdot 2[Al(C_2H_5)_3]$, $A_8 = Cp_2Zr(Cl)CH_2CH[Al(C_2H_5)_2]_2$, $A_9 = CH_2CHR$, $A_{10} = Cp_2Zr(Cl)CH_2CH_2CH_2CH_2Al(C_2H_5)_2$, $A_{11} = (C_2H_5)Al(CH_2)_3CHR$, $A_{12} = Cp_2Zr(C_2H_5)_2Al(C_2H_5)$, $A_{13} = C_2H_6$, $Cp = C_5H_5$, R – олефин.

$$\begin{aligned}
\frac{dX_1}{dt} &= -W_1 - W_2 + W_3 - W_5 - W_7 - W_8, & \frac{dX_8}{dt} &= \frac{1}{2}W_8 - W_9, \\
\frac{dX_2}{dt} &= -\frac{1}{2}W_1, & \frac{dX_9}{dt} &= W_5, \\
\frac{dX_3}{dt} &= \frac{1}{2}W_1 - W_2 - W_3 - W_4 + W_7 - W_9, & \frac{dX_{10}}{dt} &= -W_6, \\
\frac{dX_4}{dt} &= \frac{1}{2}W_1 + W_2 - W_3 + W_8, & \frac{dX_{11}}{dt} &= W_6 - W_7, \\
\frac{dX_5}{dt} &= \frac{1}{2}W_3 + W_4 + W_5, & \frac{dX_{12}}{dt} &= W_7, \\
\frac{dX_6}{dt} &= W_4 - W_5 - W_6 + W_9, & \frac{dX_{13}}{dt} &= W_2.
\end{aligned} \tag{3.2}$$

где $W_1 = k_1X_1X_2^{\frac{1}{2}} - k_{10}X_3^{\frac{1}{2}}X_4^{\frac{1}{2}}$, $W_2 = k_2X_2X_3$, $W_3 = k_3X_3X_4$, $W_4 = k_4X_3$, $W_5 = k_5X_1X_5$, $W_6 = k_6X_6X_9$, $W_7 = k_7X_1X_{10}$, $W_8 = k_8X_1X_6^{\frac{1}{2}}$, $W_9 = k_9X_7$ – скорости стадий; $X_1, \dots, X_{13}$ – концентрации веществ $A_1, \dots, A_{13}$.

Были найдены следующие приведенные значения кинетических констант реакции для соотношения $Cp_2ZrCl_2 : AlEt_3 = 1 : 10$ (таблица 1)

i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
k_i	165.556	1.121	26.478	4.061	4.843	90.344	373.523	26.792	1.986	0.179

Таблица 1: Найденные значения кинетических констант

В нашем случае измеряемыми компонентами являются $X_2, X_3, X_5, X_7, X_8, X_{12}$, поэтому система неравенств (2.1) приобретает вид:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N |X_{2j}^{\text{э}} - X_{2j}^{\text{п}}| &\leq \varepsilon_2, & \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N |X_{7j}^{\text{э}} - X_{7j}^{\text{п}}| &\leq \varepsilon_7, \\
\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N |X_{3j}^{\text{э}} - X_{3j}^{\text{п}}| &\leq \varepsilon_3, & \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N |X_{8j}^{\text{э}} - X_{8j}^{\text{п}}| &\leq \varepsilon_8, \\
\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N |X_{5j}^{\text{э}} - X_{5j}^{\text{п}}| &\leq \varepsilon_5, & \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N |X_{12j}^{\text{э}} - X_{12j}^{\text{п}}| &\leq \varepsilon_{12},
\end{aligned} \tag{3.3}$$

где ε_i задаются из условий анализа экспериментальных данных, но не более 15% от экспериментальных значений.

4. Программная реализация

Для решения поставленной задачи использовалась разработанная в Институте нефтехимии и катализа РАН информационно-аналитическая система обратных задач химической кинетики (ИАС ОЗХК). Вся информация, относящая к эксперименту,

сведена в базу данных, которая организована следующим образом: входная информация: количество веществ, стадий, констант, точность численного решения прямой кинетической задачи численным методом Кутта-Мерсона, начальные данные концентраций, набор экспериментальных данных концентраций измеряемых веществ по разным температурам; выходная информация: рассчитанные константы скоростей стадий, энергия активации, левые и правые границы интервалов для пар констант.

Прямая кинетическая задача решается методом Кутта-Мерсона. Алгоритм решения системы $\dot{x} = f(x)$ данным методом требует пятикратного вычисления правых частей $f(x)$:

$$\begin{aligned} F_1 &= f(x_k) \cdot h, \\ F_2 &= f\left(x_k + \frac{F_1}{3}\right) \cdot h, \\ F_3 &= f\left(x_k + \frac{F_1 + F_2}{6}\right) \cdot h, \\ F_4 &= f\left(x_k + \frac{F_1 + 3F_3}{8}\right) \cdot h, \\ x_{k+1} &= x_k + \frac{F_1 - 3F_3 + 4F_4}{2}, \\ F_5 &= f(x_{k+1}) \cdot h, \\ x_{k+1}^* &= x_k + \frac{F_1 + 4F_4 + F_5}{6}, \end{aligned}$$

где $h = \tau_{k+1} - \tau_k$ – шаг интегрирования, x_k – значения переменных в начале интервала интегрирования $[\tau_k, \tau_{k+1}]$. В конце интервала интегрирования τ_{k+1} получается два решения: x_{k+1} – методом Рунге-Кутты с точностью $O(h_4)$ и x_{k+1}^* – методом Кутта-Мерсона с точностью $O(h_5)$.

Систему (3.2) решали методом перебора вдоль границ при условии выполнения системы (3.3). Распараллеливание вычислений осуществлялось средствами библиотеки MPI (Message Passing Interface) с использованием языка программирования Fortran. Для проведения расчётов использовался суперкомпьютер Уфимского государственного авиационно-технического университета.

5. Результаты расчетов

С использованием созданного программного комплекса[3] найдены области неопределенности кинетических констант реакции циклоалюминирования олефинов (таблица 2).

Основной вывод по полученным интервалам заключается в том, что начальная точка, вокруг которой находился интервал, не является геометрическим центром этого интервала. Кроме того, были построены фазовые плоскости по некоторым константам при разных значениях ε .

6. Заключение

Определены кинетические параметры реакции, наилучшим образом описывающие экспериментальные данные, полученные при различных начальных концентрациях

№	Константа	Область при $\varepsilon = 5\%$	Область при $\varepsilon = 10\%$
k_1	165.555	[164; 167]	[154.5; 176.6]
k_2	1.121	[1.1; 1.2]	[1.1; 1.2]
k_3	26.478	[25.6; 33.7]	[25.6; 36.4]
k_4	4.061	[3.9; 4.4]	[3.8; 4.6]
k_5	4.843	[4.6; 5.1]	[4.6; 5.3]
k_6	90.344	[85.4; 100.1]	[82.3; 101.4]
k_7	373.523	[370.6; 381.2]	[365.3; 382.4]
k_8	26.792	[17.3; 29.6]	[10.0; 70.5]
k_9	1.986	[1.6; 2.1]	[1.43; 2.25]
k_{10}	0.179	[0.166; 0.185]	[0.162; 0.185]

Таблица 2: Интервалы неопределенности кинетических констант

компонентов и температурах протекания реакции. Создан метод и алгоритм распараллеливания в обратных задачах химической кинетики. Разработан комплекс прикладных программ для расчета областей неопределенности кинетических параметров с использованием многопроцессорных технологий. Проведен вычислительный эксперимент для анализа данных реакции циклоалюминирования олефинов, построены фазовые плоскости для констант исследуемой реакции.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Канторович Л.В. О некоторых новых подходах к вычислительным методам и обработке наблюдений. // Сиб. мат. журн., 1962, Т. 3, № 5. с. 701-709.
2. Балаев А.В., Парфенова Л.В., Русаков С.В., Губайдуллин И.М., Спивак С.И., Халилов Л.М., Джемилев У.М. Механизм реакции циклоалюминирования алкенов триэтилалюминием в алюмациклопентаны, катализируемой Cp_2ZrCl_2 . // Доклады Академии Наук, 2001, Т. 381, № 3. с. 364-367.
3. Э.Р. Ахматсафина, И.М. Губайдуллин, С.И. Спивак. Метод поиска интервалов неопределенности кинетических констант химической реакции с использованием параллельных вычислительных систем. Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2010): Труды международной научной конференции (Уфа, 29 марта — 2 апреля 2010 г.) [Электронный ресурс] — Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2010. — с. 387–394.

Search methods of intervals of the uncertainty for kinetic constants of chemical reactions

© E.R. Akhmatsafina²

Abstract. This work considers the problem of search the intervals of uncertainty for the kinetic constants of chemical reaction of cycloalumination of olefines using parallel computing systems. Described and proved the method of parallelization for the decision of a problem of search of intervals of uncertainty. The results of calculations are resulted.

Key Words: uncertainty interval, the kinetic constants, cycloalumination of olefines, parallel computing.

²Post graduate student, Establishment of the Russian Academy of Sciences Institute of Petrochemistry and Catalysis, Ufa; elzaahmat@mail.ru.

УДК 541.127

Разработка кинетической модели реакции получения метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты

© И. В. Ахметов¹, И. М. Губайдуллин², А. В. Балаев³

Аннотация. Разработана кинетическая модель реакции получения метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты, включающая 5 стадий химического превращения. Проведен численный анализ по сравнению двух видов кинетических уравнений: в рамках закона действующих масс и в виде зависимостей Ленгмюра-Хиншельвуда. Решена обратная кинетическая задача и определены численные значения кинетических параметров, описывающие экспериментальные данные в пределах погрешности количественного анализа.

Ключевые слова: обыкновенные дифференциальные уравнения, кинетическая модель, закон действующих масс, зависимости Ленгмюра-Хиншельвуда, константы скорости реакции, энергии активации, адсорбционные параметры.

1. Введение

Пирролкарбоновые кислоты представляют большой интерес как исходные соединения для получения порфиринов и лекарственных препаратов [1, 2]. Так, производные 2-пирролкарбоновых кислот проявляют противовирусные свойства, в частности, они активны по отношению к вирусам классической чумы птиц [3], а натриевые соли 2-арил-5-пирролкарбоновых кислот обладают противосудорожной активностью [4].

Построение и анализ кинетической модели есть один из этапов идентификации механизма сложной химической реакции. По определению М.Г.Слинько [5], кинетическая модель включает стадийный механизм реакции, уравнения скорости каждой стадии химического превращения и численные значения кинетических параметров, позволяющих воспроизвести экспериментальные данные в пределах погрешности количественного анализа.

Настоящая работа посвящена построению кинетической модели реакции получения метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты (МЭАПКК) и сравнению двух кинетических уравнений на основе закона действующих масс (ЗДМ) и кинетики Ленгмюра-Хиншельвуда (Л-Х).

При построении модели необходимо решение следующих задач: построение и анализ математической модели; определение численных значений кинетических параметров, описывающих экспериментальные данные.

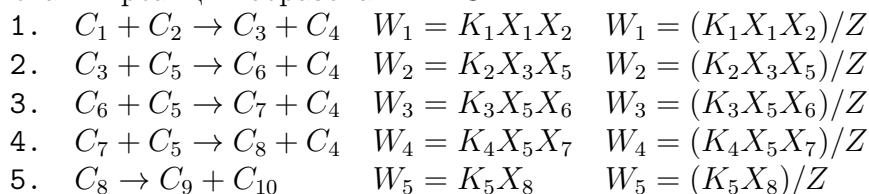
¹Аспирант лаборатории математической химии, Институт нефтехимии и катализа РАН, г.Уфа; ilnurav@mail.ru

²Старший научный сотрудник лаборатории математической химии, Институт нефтехимии и катализа РАН, г.Уфа; irekmars@mail.ru

³Ведущий научный сотрудник лаборатории математической химии, Институт нефтехимии и катализа РАН, г.Уфа; avbalaev@gmail.com.

2. Кинетическая модель

На основе анализа экспериментальных данных предложен следующий механизм протекания реакции образования МЭАПКК:



где C_i — концентрации компонентов, моль/л: C_1 — C_6H_7NO , C_2 — CCl_4 , C_3 — $C_7H_6NOCl_3$, C_4 — HCl , C_5 — CH_4O , C_6 — $C_8H_9Cl_2NO_2$, C_7 — $C_9H_{12}ClNO_3$, C_8 — $C_{10}H_{15}NO_4$, C_9 — $C_8H_9NO_3$, C_{10} — C_2H_6O ; K_j — кинетическая константа j -ой реакции ($j = 1-5$).

Кинетические уравнения схемы превращений проанализированы в виде двух функциональных зависимостей: в рамках закона действующих масс (ЗДМ — второй столбец), а также в виде зависимостей Ленгмюра-Хиншельвуда (Л-Х — третий столбец). Предполагается, что имеет место линейное торможение химических реакций стадий образования адсорбционных комплексов, т.е. $Z = 1 + b_1 X_1 + b_2 X_9$, где b_n — константы образования адсорбционных комплексов ($n = 1, 2$).

Построена кинетическая модель реакции получения МЭАПКК. Кинетическая модель включает в себя математическое описание реакции в виде нелинейных дифференциальных уравнений для концентраций участвующих в реакции веществ.

Корректным описанием лабораторного реактора является модель идеального смешения [6], уравнения материального баланса которой представляются системой (2.1)-(2.2):

$$\frac{d\bar{N}}{dt} = F_N, \quad F_N = \frac{1}{V_o} \sum_{j=1}^5 \delta_j \omega_j, \quad \delta_j = \sum_{i=1}^5 \nu_{ij}, \quad (2.1)$$

$$\frac{dX_i}{dt} = \frac{F_i - X_i F_N}{\bar{N}}, \quad F_i = \frac{1}{V_o} \sum_{j=1}^5 \nu_{ij} \omega_j, \quad (2.2)$$

с начальными условиями при $t = 0$: $X_i = X_i^0$, $\bar{N} = 1$; где $\bar{N} = C/C_0$ — относительное изменение числа молей реакционной смеси; C и C_0 — мольная плотность и ее начальное значение, моль/л; $X_i = C_i/C$ — концентрации компонентов, мольные доли ($i = 1-10$); $\omega_j = W_j/C_0$ — приведенные скорости реакций, 1/ч; W_j — скорость j -ой стадии, моль/(л·ч) ($j = 1-5$).

Правые части системы (2.1),(2.2) имеют вид:

$$F_1 = -\omega_1, F_2 = -\omega_1, F_3 = \omega_1 - \omega_2, F_4 = \omega_1 + \omega_2 + \omega_3 + \omega_4, F_5 = \omega_2 - \omega_3 - \omega_4, F_6 = \omega_2 - \omega_3, F_7 = \omega_3 - \omega_4, F_8 = \omega_4 - \omega_5, F_9 = \omega_5, F_{10} = \omega_5, F_{11} = F_N = \omega_5.$$

3. Результаты и выводы

Сравнение расчетных и экспериментальных данных для двух вариантов кинетических уравнений приведено в таблице 1.

Как видно из таблицы 1, разработанная модель адекватно описывает экспериментальные наблюдения: расхождение расчетных и экспериментальных изменений концентраций во времени не превышает 7 %.

Таблица 1. Сравнение расчетных и экспериментальных данных для двух кинетических уравнений на основе закона действующих масс и кинетики Ленгмюра-Хиншельвуда:

а) Температура опыта 105 °С

Время, ч	Опыт(X_1)	ЗДМ(X_1)	Л-Х(X_1)	Опыт(X_9)	ЗДМ(X_9)	Л-Х(X_9)
4	100	78,98	78,94	0	21,02	21,06
4,5	70	70	70	30	30	30
5	59,6	60,54	60,57	40,4	39,45	39,43
6	43	43	43	57	57	57

б) Температура опыта 110 °С

Время, ч	Опыт(X_1)	ЗДМ(X_1)	Л-Х(X_1)	Опыт(X_9)	ЗДМ(X_9)	Л-Х(X_9)
3	92,9	82,71	82,46	7,7	17,29	17,54
4	38	62,18	61,87	62	37,82	38,13
6	29	29	29	71	71	71

в) Температура опыта 115 °С

Время, ч	Опыт(X_1)	ЗДМ(X_1)	Л-Х(X_1)	Опыт(X_9)	ЗДМ(X_9)	Л-Х(X_9)
3	62,6	62,6	62,6	37,4	37,4	37,4
4	26,2	26,2	26,2	73,8	73,8	73,8
6	0	3,09	2,72	100	96,91	97,28

Полученные результаты показывают, что наблюдается высокая сходимость расчетных и экспериментальных данных для любой из температур: 105 °С, 110 °С, 115 °С. Однако при повышении температуры до 115 °С, т.е. в условиях предполагаемой практической реализации процесса, кинетические уравнения в виде зависимостей Ленгмюра-Хиншельвуда более точно описывают данные эксперимента.

В работе использовалась разработанная в нашем институте информационно-аналитическая система обратных задач химической кинетики (ИАС ОЗХК) [7].

Система обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений (2.1)-(2.2) решалась с помощью модифицированного метода Кутты-Мерсона [8] пятого порядка точности.

Решена обратная кинетическая задача и найдены численные значения кинетических параметров (констант скоростей стадий и энергий активации). В ходе поиска было найдено несколько наборов констант, одинаково хорошо описывающих измерения. Для достижения однозначности в определении констант были обработаны измерения при различных температурах. Коррекция константы при разных температурах с использованием закона Аррениуса позволила выделить единственный набор констант, описывающий весь экспериментально исследованный интервал изучения температуры.

Константы таблицы 2 k_i (1/ч) являются некоторыми приведенными величинами, которые имеют размерность обратного времени и связаны с истинными константами K_i (л/(моль · ч)) соотношениями: $k_i = K_i \cdot C_0$ ($i = \overline{1,4}$), $k_5 = K_5$.

Численные значения найденных кинетических и адсорбционных констант, энергий активации и теплот адсорбции для кинетических уравнений в виде зависимостей Ленгмюра-Хиншельвуда приведены в таблице 2.

Таблица 2. Численные значения кинетических параметров реакции получения метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты для кинетических уравнений в виде зависимостей Лэнгмюра-Хиншельвуда.

Кинетические константы	105 °С	110 °С	115 °С	E_i , ккал/моль
k_1	0,049	0,058	0,111	23,8
k_2	0,0043	0,0045	0,005	3,57
k_3	0,041	0,044	0,048	4,41
k_4	0,0007	0,0009	0,001	9,68
k_5	6,37	6,86	7,076	3,07
Адсорбционные константы	105 °С	110 °С	115 °С	Q_i , ккал/моль
b_1	0,24	0,26	0,34	10
b_2	0,66	0,68	0,93	9,89

Построенная кинетическая модель реакции позволила определить, что лимитирующей стадией процесса является алкилирование 2-ацетилпиррола с помощью CCl_4 , т.е. первая стадия схемы превращений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Vogel E., Richert K., Benninghaus T., Muller M., Cross A.D. Пат. 5179120 (1993). США.
2. Kleinspehn G.G., Corwin A.H. // J. Am. Chem. Soc. 1960, 82 (11), 2750.
3. Коробченко Л.В., Владыко Г.В., Боренко Е.И., Собенина Л.Н., Михалева А.И., Сергеева М.П., Трофимов Б.А. // Хим.-фарм. журнал. 1992. Т.57. С.11-12.
4. Собенина Л.Н., Михалева А.И., Бахарева Е.В., Васильева Н.Н., Пушечкина Т.Я., Казимировская В.Б., Сергеева С.Е., Коростова С.Е., Нестеренко Р.Н., Голованова Н.И., Половникова Р.И. // Хим.-фарм. ж. 1992, 6, 26.
5. Слинько М.Г. // Кинетика и катализ. 2000. Т.41. № 6. С.933-946.
6. Слинько М.Г. Основы и принципы математического моделирования каталитических процессов. Новосибирск: изд-во Ин-та катализа им. Борескова СО РАН, 2004, 488.
7. Губайдуллин И.М., Спивак С.И. Системы управления и информационные технологии. 2008, 1.1(31), 150.
8. Augustin S.C.,/ Modified Mersons investigation algorithm with saves two evaluation at each step // Simulation. 1974. V. 22. № 3. P. 90-92.

Development of kinetic model of reaction of 5-acetyl-2-pyrrole carbonic methyl ether

© I. V. Akhmetov⁴, I. M. Gubaydullin⁵, A. V. Balaev⁶

Abstract. It was developed of kinetic model of reaction of 5-acetyl-2-pyrrole carbonic methyl ether production which includes 5 stages of chemical conversions. It was made digital analysis of two types of kinetic equations comparison: law of mass action and Langmuir-Hinshelwood relations. It was solved inversed kinetic problem and was estimated kinetic parameters, which described experimental data in the limits of quantities analysis inaccuracy.

Key Words: ordinary differential equations, kinetic model, law of mass action, Langmuir-Hinshelwood relations, reaction rate constants, activation energies, adsorption parameters.

⁴Graduate student, Institute of Petrochemical and Catalysis, Ufa; ilnur-av@mail.ru

⁵Senior Researcher, Institute of Petrochemical and Catalysis, Ufa; irekmars@mail.ru

⁶Leader Researcher, Institute of Petrochemical and Catalysis, Ufa; avbalaev@gmail.com.

УДК 519.876.5

Дискриминация вида кинетического уравнения для реакции алкилирования бензола этиленом

© А. В. Балаев¹, Н. М. Сафуанова²

Аннотация. В настоящей работе приведены результаты, полученные при разработке кинетической модели реакции алкилирования бензола этиленом на цеолитном катализаторе ZSM-5. Проведена дискриминация кинетических уравнений и для последующих исследований предложено использовать зависимости Ленгмюра-Хиншельвуда, учитывающие торможение химических реакций поверхностной реакцией бензола с этиленом. Решена обратная кинетическая задача и определены численные значения кинетических параметров, описывающие экспериментальные данные в пределах погрешности количественного анализа.

Ключевые слова: Кинетические уравнения, система дифференциальных уравнений, закон действующих масс, зависимости Ленгмюра-Хиншельвуда, константы скорости реакции, энергии активации, адсорбционные параметры.

1. Введение

Экспериментальные исследования реакции алкилирования бензола этиленом проводили в лабораторном реакторе с неподвижным слоем катализатора. В ходе экспериментов варьировали: соотношение концентраций этилена x_1 и бензола x_2 , объемную скорость подачи (или время контакта) исходной реакционной смеси, температуру реакции. На основе анализа литературных [1]-[3] и экспериментальных данных, полученных в лаборатории контактных каталитических процессов ОАО «Салаватнефтеоргсинтез», предложена схема химических превращений реакции алкилирования бензола этиленом на цеолитном катализаторе ZSM-5:

- | | | |
|--|--|--|
| 1. $C_1 + C_2 \rightleftharpoons C_3$ | $\omega_1 = k_1 x_1 x_2 - k_7 x_3$ | $\omega_1 = (k_1 x_1 x_2 - k_7 x_3)/z$ |
| 2. $C_1 + C_3 \rightleftharpoons C_4$ | $\omega_2 = k_2 x_1 x_3 - k_8 x_4$ | $\omega_2 = (k_2 x_1 x_3 - k_8 x_4)/z$ |
| 3. $C_1 + C_4 \rightleftharpoons C_5$ | $\omega_3 = k_3 x_1 x_4 - k_9 x_5$ | $\omega_3 = (k_3 x_1 x_4 - k_9 x_5)/z$ |
| 4. $C_3 \rightleftharpoons C_6$ | $\omega_4 = k_4 x_3 x_2 - k_{10} x_6$ | $\omega_4 = (k_4 x_3 x_2 - k_{10} x_6)/z$ |
| 5. $C_3 + C_7 \rightleftharpoons C_{10}$ | $\omega_5 = k_5 x_3 - k_{11} x_7 x_{10}$ | $\omega_5 = (k_5 x_3 - k_{11} x_7 x_{10})/z$ |
| 6. $C_3 + C_{10} \rightarrow C_8 + C_9$ | $\omega_6 = k_6 x_3 x_{10}$ | $\omega_6 = k_6 x_3 x_{10}/z$ |

где C_i концентрации компонентов, моль/л: C_1 - этилен (C_2H_4), C_2 - бензол (C_6H_6), C_3 - этилбензол ($C_6H_5C_2H_5$), C_4 - диэтилбензол ($C_6H_4(C_2H_5)_2$), C_5 - три-этилбензол ($C_6H_3(C_2H_5)_3$), C_6 - ($C_6H_4(CH_3)_2$), C_7 - стирол ($C_6H_5C_2H_3$), C_8 - толуол ($C_6H_5CH_3$), C_9 - парафин (CH_4), C_{10} - водород H_2 ; x_i - концентрации компонентов, нумерация которых совпадает с нумерацией C_i , мольные доли; $\omega_j = W_j/C_o$ - приведенные скорости реакций, мин^{-1} ; W_j - скорость j -ой стадии, $\text{кмоль} \cdot \text{м}^{-3} \cdot \text{мин}^{-1}$.

Входящие в ω_j константы k_j являются некоторыми приведенными величинами, которые имеют размерность обратного времени, и связаны с истинными константами (K_j) соотношениями: $k_j = K_j \cdot C_o$ ($j=1,2,3,5,6$), размерность K_j ($\text{м}^3 \cdot \text{кмоль}^{-1} \cdot \text{мин}^{-1}$); размерность константы k_4 и всех констант обратных реакций k_j ($j=7 \dots 11$) совпадают с размерностью констант K_j (мин^{-1}).

¹Ведущий научный сотрудник лаборатории математической химии Института нефтехимии и катализа РАН, г.Уфа, avbalaev@gmail.com

²Аспирант, Институт нефтехимии и катализа РАН, г.Уфа; snurija@yandex.ru.

2. Дискриминация вида кинетических уравнений

Кинетические уравнения, соответствующие схеме превращений, проанализированы в виде двух функциональных зависимостей: в рамках закона действующих масс (ЗДМ) - второй столбец, а также в виде зависимостей Ленгмюра-Хиншельвуда (ЛХ) - третий столбец.

Предполагается, что скорость реакции алкилирования бензола этиленом может замедляться за счет торможения следующими процессами:

- поверхностной реакцией (ЛХ-Р): $z = (1 + k_E x_1 + k_B x_2)^2$;
- адсорбцией бензола (ЛХ-Б): $z = 1 + k_E x_1$;
- адсорбцией этилена (ЛХ-Э): $z = 1 + k_B x_2$.

Безразмерные константы торможения k_E и k_B связаны с размерными величинами соотношениями: $k_E = K_E C_o$ и $k_B = K_B C_o$.

Математическое описание процесса алкилирования бензола этиленом в изотермическом реакторе идеального вытеснения, учитывающее протекание реакций с изменением числа молей реакционной смеси, представляется системой уравнений:

$$\frac{1}{S} \frac{d\bar{N}}{dl} = F_N, F_N = \frac{1}{V_o} \sum_{j=1}^6 \omega_j \sum_{i=1}^{10} \nu_{ij}, \quad (2.1)$$

$$\frac{1}{S} \frac{dx_i}{dl} = \frac{F_i - x_i F_N}{\bar{N}}, F_i = \frac{1}{V_o} \sum_{j=1}^6 \nu_{ij} \omega_j, \quad (2.2)$$

с начальными условиями - $l=0$: $x_j = x_j^o, \bar{N} = 1$.

Следствием того, что реакция протекает с изменением числа молей, является неравенство нулю хотя бы одного из коэффициентов δ_j .

В уравнениях (2.1), (2.2) $\bar{N} = N/N_o$ - относительное изменение числа молей реакционной смеси; $N = V \cdot C$ и $N_o = V_o \cdot C_o$; V и V_o - объемная скорость подачи реакционной смеси и ее начальное значение, $\text{м}^3/\text{с}$; C и C_o - мольная плотность реакционной смеси и ее начальное значение, $\text{кмоль}/\text{м}^3$; l - осевая координата, м. Правые части дифференциальных уравнений (2.1), (2.2) имеют вид:

$$F_1 = -\omega_1 - \omega_2 - \omega_3, F_2 = -\omega_1, F_3 = \omega_1 - \omega_2 - \omega_4 - \omega_5 - \omega_6, F_4 = \omega_2 - \omega_3, F_5 = \omega_3, F_6 = \omega_4, F_7 = \omega_5, F_8 = \omega_6, F_9 = \omega_6, F_{10} = \omega_5 - \omega_6, F_{11} = F_N = \omega_1 - \omega_2 - \omega_3 + \omega_5 + \omega_6.$$

Для решения системы уравнений (2.1), (2.2) использовался метод Рунге-Кутты 4-го порядка точности с автоматическим выбором шага интегрирования по пространственной координате [4]. При дискриминации кинетических уравнений в качестве критерия минимизации рассматривался следующий функционал:

$$F = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \left(\frac{1}{10} \sum_{i=1}^{10} \frac{|x_i^g - x_i^p|}{x_i^g} \right)_n, \quad (2.3)$$

где N - число измерений в n -том опыте.

Приведенные в таблице 1 значения функционала показывают, что кинетические уравнения в виде зависимостей Ленгмюра-Хиншельвуда в предположении, что торможение определяется поверхностной реакцией этилена с бензолом, лучше описывают экспериментальные данные.

Именно такие кинетические уравнения будут использоваться при дальнейшем моделировании процесса алкилирования бензола этиленом.

Решение обратной кинетической задачи осуществляли, комбинируя метод случайного поиска, градиентный метод и метод покоординатного спуска. Найденные при решении обратной кинетической задачи численные значения кинетических и адсорбционных констант, энергий активации и теплот адсорбции приведены в таблице 2.

Таблица 1. Средняя относительная ошибка, рассчитанная по критерию (2.3), для различных видов кинетических уравнений.

Время контакта	ЗДМ	ЛХ-Р	ЛХ-Э	ЛХ-Б
6.78 с	18%	9,2%	11,8%	11,8%
9.04 с	20%	6,7%	16%	11,8%
13.6 с	15,5%	4,2%	17%	11,1%

Таблица 2. Численные значения кинетических и адсорбционных констант при 380°C , энергий активации (E , ккал/моль) и теплот адсорбции (Q , ккал/моль) для кинетических уравнений ЛХ-Р.

№ констант	$k_i(1/\text{с})$	E_i	№ констант	$k_i(1/\text{с})$	E_i
1	0.87	31.0	7	$0.95 \cdot 10^{-4}$	30.4
2	1.82	34.9	8	0.045	19.6
3	9.46	36.6	9	0.02	20.7
4	$0.42 \cdot 10^{-2}$	30.6	10	1.45	30.5
5	$0.17 \cdot 10^{-3}$	33.2	11	0.01	31.8
6	2.29	19.5			
	$b_B(380^{\circ}\text{C})$	Q_B		$b_E(380^{\circ}\text{C})$	Q_E
	0.07	21.7		$0.12 \cdot 10^{-2}$	12.8

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Shi Y-f., Gfo Y., Dai Y-c., Yuan W-k.,/ Kinetics for benzene + ethylene reaction in near critical regions // Chem.Eng.Sci. 2001. V.56. P.1403-1410.
2. Perego C., Ingallina P.,/ Recent advances in alkylation of aromatics: new catalysis and new processes //Catalysis Today. 2002. V.73. P.3-22.
3. Zhang Y., Du Z., Min E.,/ Effect of acidity and strutures of supported tungsto-phosphoric acid on its catalytic activity and selectivity in liquid phase synthesis of ethylbenzene // Catalysis Today. 2004. V.93-95. P.327-332
4. Augustin S.C.,/ Modified Mersons investigation algorithm with saves two evaluation at each step // Simulation. 1974. V. 22. № 3. P. 90-92.

Discrimination of kinetical equation type for reaction of benzene with ethylene alkylation

© A. V. Balaev, N. M. Safuanova

Abstract. In this work are presented the results received under development of kinetic model of benzene with ethylene alkylation reaction on zeolite catalyst ZSM-5. It was carried out discrimination of kinetic equations and for further investigation was proposed to use Langmuir-Hinshelwood relations with surface reaction rate-determining step. It was solved inversed kinetic problem and were estimated kinetic parameters, which described experimental data in the limits of quantities analysis inaccuracy.

Key Words: Kinetic equations, system of differential equations, law action mass, Langmuir-Hinshelwood relations, reaction rate constants, activation energies, adsorption parameters.

УДК 517.938

Краевая задача управляемой системы дифференциальных уравнений с интегральным критерием качества

© Е. С. Дюба¹

Аннотация. В работе определены условия существования векторов α_0 , β_0 и u_0 , таких, что решение $x(t, \alpha_0, u_0)$, удовлетворяющее краевому условию $x(T, \alpha_0, u_0) = \beta_0$ доставляет экстремум функционалу.

Ключевые слова: системы дифференциальных уравнений, управляемость, функционал, экстремум, краевые условия.

1. Введение

Проблема управляемости с критерием качества исследовалась в работах [1-3].

В настоящей статье решается задача нахождения решения системы дифференциальных уравнений, доставляющего локальный экстремум нелинейному функционалу.

Введем следующие обозначения: $|y| = \max_i \{|y_i|\}$, $y \in E_s$, E_s - s - мерное векторное пространство, $T > 0$ - некоторое число.

Рассмотрим систему дифференциальных уравнений вида

$$\frac{dx}{dt} = A(t)x + B(t)u, \quad (1.1)$$

в которой $x \in \mathbb{E}^n$, $u \in \mathbb{E}^m$ вектор-управление, $A(t), B(t)$ - матрицы.

Предположим, что матрицы $A(t), B(t)$ определены и непрерывны на сегменте $[0, T]$.

На множестве решений системы (1.1) определим функционал $I = \int_0^T \Phi(t, x, u)dt$, функция $\Phi(t, x, u)$ определена и непрерывна на множестве $(\mathcal{T} \times \mathbb{E}^n \times \mathbb{E}^m)$.

2. Постановка задачи

Пусть $\alpha \in \mathbb{E}^n, \beta \in \mathbb{E}^n$. Решение $x(t)$ системы ((1.1)) при управлении u , удовлетворяющее начальным условиям $x(0) = \alpha$, далее будем обозначать символом $x(t, \alpha, u)$, $x(0, \alpha, u) = \alpha$.

Пусть $I(\alpha, u) = \int_0^T \Phi(t, x(t, \alpha, u), u)dt$.

О п р е д е л е н и е 2.1. Будем говорить, что решение $x(t, \alpha_0, u_0)$ системы (1.1), определенное на сегменте $[0, T]$, доставляет экстремум (максимум, минимум) функционалу I , если существует число $\delta > 0$ такое, что при любых α и u , удовлетворяющих неравенствам $0 < |\alpha - \alpha_0| < \delta, 0 < |u - u_0| < \delta$ выполняется

¹Аспирант кафедры математики и МПМД, Рязанский государственный университет имени С. А. Есенина, г. Рязань; m.terehin@rsu.edu.ru.

неравенство $|I(\alpha, u) - I(\alpha_0, u_0)| > 0$ (максимум, если $I(\alpha, u) - I(\alpha_0, u_0) < 0$, минимум, если $I(\alpha, u) - I(\alpha_0, u_0) > 0$).

Ставится задача найти такие векторы α_0 , β_0 и u_0 , чтобы решение $x(t, \alpha_0, u_0)$, удовлетворяющее краевому условию $x(T, \alpha_0, u_0) = \beta_0$, доставляло экстремум функционалу I .

Решение системы дифференциальных уравнений (1.1) определяется равенством

$$x(t, \alpha, u) = X(t)\alpha + D(t)u, \quad (2.1)$$

где $X(t)$ - фундаментальная матрица системы $\dot{x} = A(t)x$, $X(0) = E$, E - единичная матрица, $D(t) = X(t) \int_0^t X^{-1}(\tau)B(\tau)d\tau$.

Пусть β - произвольный, но фиксированный вектор.

3. Условия существования векторов α_0 , β_0 и u_0

Определим условия существования управления u , удовлетворяющего равенству

$$\beta = X(T)\alpha + D(T)u. \quad (3.1)$$

Рассмотрим следующие случаи.

1. Пусть $n = m$ и $\det D(T) \neq 0$. Тогда для любых векторов α_0, β_0 вектор u_0 определится равенством $u_0 = D^{-1}(T)(\beta_0 - X(T)\alpha_0)$.

Выясним, какими должны быть векторы α_0, β_0 и u_0 , удовлетворяющие равенству (3.1), при котором решение $x(t, \alpha_0, u_0) = X(t)\alpha_0 + D(t)u_0$ доставляло бы экстремум функционалу I .

Проведем замену переменных $y = x - X(t)\alpha_0 - D(t)u_0$, $v = u - u_0$, где $\alpha_0 \in En$ и $u_0 \in En$ - некоторые векторы. Система (1.1) сведется к системе

$$\dot{y} = A(t)y + B(t)v. \quad (3.2)$$

Решением дифференциального уравнения (3.2) является вектор-функция

$$y(t, A, v) = X(t)c + D(t)v. \quad (3.3)$$

Функционал I примет вид $I = \int_0^T \Phi(t, y + X(t)\alpha_0 + D(t)u_0, v + u_0)dt$.

Предположим, что в окрестности точки $(y, v) = (0, 0)$ справедливо представление

$$\begin{aligned} \Phi(t, y + X(t)\alpha_0 + D(t)u_0, v + u_0) &= \Phi(t, X(t)\alpha_0 + D(t)u_0, u_0) + \\ &+ R_1(t, X(t)\alpha_0 + D(t)u_0, u_0)y + R_2(t, X(t)\alpha_0 + D(t)u_0, u_0)v + \\ &+ \sum_{i=1}^k P_i(t, X(t)\alpha_0 + D(t)u_0, z) + o(|z|^k), \end{aligned}$$

где $R_j(t, X(t)\alpha_0 + D(t)u_0, u_0)$ - известная матрица, $j \in \{1, 2\}$, при любом $i \in \{2, \dots, k\}$ $P_i(t, X(t)\alpha_0 + D(t)u_0, z)$ - форма порядка i относительно координат вектора $z = (y, v)$, $\lim_{z \rightarrow 0} \frac{o(|z|^k)}{|z|^k} = 0$, равномерно относительно $t \in [0, T]$.

Тогда, учитывая, что решение системы (3.2) определяется равенством (3.3), получим, что функционал I примет вид $I = f(\alpha_0, u_0) + f_1(\alpha_0, u_0)c + f_2(\alpha_0, u_0)v + \sum_{i=2}^k \bar{P}_i(\alpha_0, u_0, \gamma) + o(|\gamma|^k)$,

в котором $f(\alpha_0, u_0), f_1(\alpha_0, u_0), f_2(\alpha_0, u_0)$ – известные величины, при любом $i \in \{2, \dots, k\}$ $\bar{P}_i(\alpha_0, u_0, \gamma)$ – форма порядка i относительно координат вектора $\gamma = (c, v)$.

Пусть существует число $\mu \in \{2, \dots, k\}$ такое, что $\bar{P}_\mu(\alpha_0, u_0, \gamma)$ не тождественно равно нулю, при любом $i < \mu$ $\bar{P}_i(\alpha_0, u_0, \gamma) \equiv 0$.

Тогда функционал I можно записать так:

$$I = f(\alpha_0, u_0) + f_1(\alpha_0, u_0)c + f_2(\alpha_0, u_0)v + \bar{P}_\mu(\alpha_0, u_0, \gamma) + o(|\gamma|^\mu).$$

Т е о р е м а 3.1. *Необходимым условием существования экстремума функционала I является существование векторов α_0, u_0 , удовлетворяющих равенству*

$$f_1(\alpha_0, u_0) = f_2(\alpha_0, u_0) = 0.$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. проведем от обратного. Для определённости допустим, $f_1(\alpha_0, u_0) \neq 0$.

Убедимся, что в окрестности точки (α_0, u_0) имеются как точки, в которых $I - f(\alpha_0, u_0) > 0$, так и точки, в которых $I - f(\alpha_0, u_0) < 0$.

Действительно, положим $v = 0$. Тогда $I - f(\alpha_0, u_0) = f_1(\alpha_0, u_0)c + \bar{P}_\mu(\alpha_0, u_0, c) + o(|c|^\mu)$.

Так как $f_1(\alpha_0, u_0) \neq 0$, то вектор c_0 можно выбрать так, чтобы $f_1(\alpha_0, u_0)c_0 \neq 0$. Очевидно, $|c_0| \neq 0$.

Следовательно, при $c = \tau c_0$, $\tau \neq 0$, τ – число, получим $I - f(\alpha_0, u_0) = \tau[f_1(\alpha_0, u_0)c_0 + \tau^{\mu-1}\bar{P}_\mu(\alpha_0, u_0, c_0) + \tau^{\mu-1}O(|\tau||c_0|^\mu)]$.

Значит, число $\delta > 0$ можно выбрать так, что при $c_1 = \tau c_0$ и при $c_2 = -\tau c_0$ разность $I - f(\alpha_0, u_0)$ будет иметь значение разных знаков для любого τ ($0 < |\tau| \leq \delta$), то есть значение $f(\alpha_0, u_0)$ функционала I на решении $x(t, \alpha_0, u_0)$ не является локальным экстремумом. Полученное противоречие доказывает теорему.

Д о к а з а т е л ь с т в о з а к о н ч е н о.

Т е о р е м а 3.2. *Пусть векторы α_0, u_0 таковы, что $f_1(\alpha_0, u_0) = f_2(\alpha_0, u_0) = 0$.*

Тогда:

1) *если форма $\bar{P}_\mu(\alpha_0, u_0, \gamma)$ знакоопределенная, то на решении $x(t, \alpha_0, u_0) = X(t)\alpha_0 + D(t)u_0$ системы (1.1) функционал I имеет экстремум, минимум при $\bar{P}_\mu(\alpha_0, u_0, \gamma) > 0$, максимум при $\bar{P}_\mu(\alpha_0, u_0, \gamma) < 0$.*

2) *если форма $\bar{P}_\mu(\alpha_0, u_0, \gamma)$ – знакопеременная, то функционал I на решении $x(t, \alpha_0, u_0) = X(t)\alpha_0 + D(t)u_0$ экстремума не имеет.*

Д о к а з а т е л ь с т в о. Доказательство проводится непосредственным определением знака разности $I - f(\alpha_0, u_0)$ в достаточно малой окрестности точки (α_0, u_0) .

Таким образом, из равенств $f_1(\alpha_0, u_0) = f_2(\alpha_0, u_0) = 0$ и (3.1) находятся значения векторов α_0, β_0 и u_0 такие, что при выполнении условия 1) теоремы 2 решение $x(t, \alpha_0, u_0)$ системы (1.1), удовлетворяющее краевому условию $x(T, \alpha_0, u_0) = \beta_0$, доставляет экстремум функционалу I .

2. Пусть $m < n$, $\text{rang} D(T) = k$, $0 < k \leq m$.

Предположим, что минор порядка k , отличный от нуля, расположен в левом верхнем углу матрицы $D(T)$. Пусть $\beta = (\beta_1, \beta_2)$, β_1 – k -мерный вектор, β_2 – $(n - k)$ -мерный вектор. Элементарными преобразованиями можно убедиться, что существуют матрицы P и Q такие, что при $\beta_2 = P\beta_1 + Q\alpha$ система (3.1) разрешима, а матрица $D(T) = (D_{ij}(T))_1^2$ преобразуется в матрицу $(\bar{D}_{ij}(T))_1^2$, в которой $\bar{D}_{11}(T) = D_{11}(T)$, $\bar{D}_{12}(T) = D_{12}(T)$, $\bar{D}_{21}(T) = D_{21}(T)$ – $k \times k$ -матрица, $\det D_{11}(T) \neq 0$, $\bar{D}_{22}(T) = \bar{D}_{21}(T) = 0$, при этом $u = (u_1, u_2)$, u_1 – k -мерный вектор, u_2 – $(m - k)$ -мерный вектор. Тогда система (3.1) имеет решение

$u_1 = D_{11}^{-1}(T)(\beta_1 - X_1(T)\alpha - D_{12}(T)u_2)$, $X_1(T)$ - $k \times n$ - матрица, расположенная на первых k строках матрицы $X(T)$.

В этом случае проводим следующую замену переменных: $y = x - X(t)\alpha_0 - D(t)u_0 = x - X(t)\alpha_0 - D(t)\text{colon}(D_{11}^{-1}(T)(\beta_1^0 - X_1(T)\alpha_0 - D_{12}(T)u_2^0), u_2^0) = x - X(t)\alpha_0 - D(t)\varphi(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0)$, $v = u - u_0$, где

$u_0 = \text{colon}(D_{11}^{-1}(T)(\beta_1^0 - X_1(T)\alpha_0 - D_{12}(T)u_2^0), u_2^0)$. Система (1.1) сведется также к системе (3.2).

Функционал I примет вид $I = \int_0^T \Phi(t, y + X(t)\alpha_0 + \varphi(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0), v + u_0) dt$.

Предположим, что в окрестности точки $(y, v) = (0, 0)$ справедливо следующее представление функционала:

$I = f(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0) + f_1(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0)c + f_2(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0)v + \sum_{i=2}^k \bar{P}_i(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0, \gamma) + o(|\gamma|^k)$, в котором $f(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0)$, $f_1(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0)$, $f_2(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0)$ - известные величины, при любом $i \in \{2, \dots, k\}$ $\bar{P}_i(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0, \gamma)$ - форма порядка i относительно координат вектора $\gamma = (c, v)$.

Пусть существует число $\mu \in \{2, \dots, k\}$ такое, что $\bar{P}_\mu(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0, \gamma)$ не тождественно равно нулю, при любом $i < \mu$ $\bar{P}_i(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0, \gamma) \equiv 0$.

Тогда функционал I можно записать так:

$$I = f(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0) + f_1(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0)c + f_2(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0)v + \bar{P}_\mu(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0, \gamma) + o(|\gamma|^\mu).$$

Т е о р е м а 3.3. *Необходимым условием существования экстремума функционала I является существование векторов $\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0$, удовлетворяющих равенству*

$$f_1(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0) = f_2(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0) = 0.$$

Т е о р е м а 3.4. *Пусть векторы $\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0$ таковы, что $f_1(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0) = f_2(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0) = 0$. Тогда:*

1) *если форма $\bar{P}_\mu(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0, \gamma)$ знакоопределенная, то на решении $x(t, \alpha_0, u_0) = X(t)\alpha_0 + D(t)u_0$ системы (1.1) функционал I имеет экстремум, минимум при $\bar{P}_\mu(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0, \gamma) > 0$, максимум при $\bar{P}_\mu(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0, \gamma) < 0$.*

2) *если форма $\bar{P}_\mu(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0, \gamma)$ - знакопеременная, то функционал I на решении $x(t, \alpha_0, u_0) = X(t)\alpha_0 + D(t)u_0$ экстремума не имеет.*

Таким образом, из равенств $f_1(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0) = f_2(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0) = 0$, $\beta_2^0 = P\beta_1^0 + Q\alpha_0$ и $u_1^0 = D_{11}^{-1}(T)(\beta_1^0 - X_1(T)\alpha_0 - D_{12}(T)u_2^0)$ находятся значения векторов α_0 , β_0 и u_0 таких, что при выполнении условия 1) теоремы 4 решение $x(t, \alpha_0, u_0)$ системы (1.1), удовлетворяющее краевому условию $x(T, \alpha_0, u_0) = \beta_0$, доставляет экстремум функционалу I .

3. Пусть $\text{rang} D(T) = 0$. Равенство (3.1) запишется в виде $\beta = X(T)\alpha$.

Проводя рассуждения, аналогичные тем, что были приведены для первых двух теорем, получим значения векторов α_0 , β_0 и u_0 , определяемые равенствами $f_1(\alpha_0, u_0) = f_2(\alpha_0, u_0) = 0$ и $\beta_0 = X(T)\alpha_0$, таких, что решение $x(t, \alpha_0, u_0)$ системы (1.1), удовлетворяющее краевому условию $x(T, \alpha_0, u_0) = \beta_0$, доставляет экстремум функционалу I .

П р и м е р 3.1. Пусть в системе (1.1): $A(t) = (\text{colon}(\frac{1}{t+1}, 0, 0), \text{colon}(0, \frac{-t}{1-t^2}, \frac{1}{1-t^2}), \text{colon}(0, \frac{1}{1-t^2}, \frac{-t}{1-t^2})), B(t) = (\text{colon}(t+1, 2t^2-1, t), \text{colon}(0, -t, 1-2t^2)), t \in [0, 1]$ функционал $I = \int_0^1 (x^2(t, \alpha, u) + bu)dt$, где $b = (2, 2)$, определен на множестве решений системы (1.1).

Фундаментальная матрица системы $\dot{x} = A(t)x$ имеет вид $X(t) = (\text{colon}(t + 1, 0, 0), \text{colon}(0, 1, t), \text{colon}(0, t, 1))$.

Непосредственным вычислением устанавливаем, что матрица $D(t) = X(t) \int_0^t X^{-1}(\tau)B(\tau)d\tau$ определяется равенством $D(t) = (\text{colon}(t^2+1, t^3-t, 0), \text{colon}(0, 0, t-t^3))$.

Тогда $D(1) = (\text{colon}(2, 0, 0), \text{colon}(0, 0, 0))$, $\text{rang} D(1) = 1$, значит, имеет место второй случай. Здесь $D_{11}(T) = 2$, $D_{12}(T) = 0$. Следовательно, $u_1^0 = \frac{1}{2}(\beta_1^0 - (t+1)\alpha_1^0)$.

Проведя замену переменных $y = x - X(t)\alpha_0 - \varphi(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0)$, $v = u - u_0$, получим следующее представление функционала: $I = \int_0^1 ([y + X(t)\alpha_0 + \varphi(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0)]^2 + b(v + u_0))dt$,

где $u_0 = \text{colon}(\frac{1}{2}(\beta_1^0 - (t+1)\alpha_0), u_2^0)$, $\varphi(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0) = \text{colon}(\frac{1}{2}(t^2+1)(\beta_1^0 - (t+1)\alpha_0), u_2^0, \frac{1}{2}(t^3-t)(\beta_1^0 - (t+1)\alpha_0), (t-t^3)u_2^0)$.

В окрестности точки $(y, v) = (0, 0)$ справедливо следующее представление функционала $I = f(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0) + f_1(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0)c + f_2(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0)v + \bar{P}_2(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0, \gamma)$ где $f(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0) = \int_0^1 [(X(t)\alpha_0 + \varphi(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0))^2 + bu_0]dt = -4, 39$, $f_1(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0) = 2 \int_0^1 [X(t)\alpha_0 +$

$\varphi(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0)]X(t)]dt = 0$, $f_2(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0) = \int_0^1 [2(X(t)\alpha_0 + \varphi(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0))D(t) + b]dt = 0$,

$\bar{P}_2(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0, \gamma) = \int_0^1 [X(t)c + D(t)v]^2dt$, $\alpha_0 = (0, 51; 1, 51; -1, 82)$, $u_0 = (-1, 4; -4, 31)$, $\beta_0 = (-1, 79; -0, 29; -0, 29)$.

Так как выполнены условия теоремы 1, то имеет смысл проводить дальнейшее исследование.

Форма $\bar{P}_2(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0, \gamma)$ имеет вид: $\bar{P}_2(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0, \gamma) = 2, 33c_1^2 + 1, 42c_1v_1 + 1, 33c_2^2 + c_2c_3 - 0, 25c_2v_1 + 0, 13c_2v_2 + c_3c_2 + 1, 33c_3^2 - 0, 13c_3v_1 + 0, 25c_3v_2 + 1, 42v_1c_1 - 0, 25v_1c_2 - 0, 13v_1c_3 + 1, 11v_1^2 + 0, 13v_2c_2 + 0, 25v_2c_3 + 0, 41v_2^2$. Матрица формы $\bar{P}_2(\alpha_0, \beta_1^0, u_2^0, \gamma)$ определяется равенством:

$M = (\text{colon}(2, 33; 0; 0; 1, 42; 0), \text{colon}(0; 1, 33; 1; -0, 25; 0, 13), \text{colon}(0; 1; 1, 33; -0, 13; 0, 25), \text{colon}(1, 4; -0, 25; -0, 13; 1, 11; 0), \text{colon}(20; 0, 13; 0, 25; 0; 0, 41))$

Непосредственным вычислением убеждаемся, что согласно условиям Сильвестра ([3]) форма является определенно положительной. Это значит, что найдено представление векторов α_0, β_0, u_0 таких, что на решении $x(t, \alpha_0, u_0)$ функционал I имеет минимум $I = -4, 39$, и выполняется краевое условие $x(T, \alpha_0, u_0) = \beta_0$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Альбрехт, Э.Г. Об управлении движением нелинейных систем // Дифференциальные уравнения. – 1966. – Т. 2. – №3 – С. 324-334.
2. Ли, Э.Б., Маркус Д. Основы теории оптимального управления. – М. : Наука, 1972. – 574 с.
3. Ильин, В.А., Позняк Э.Г. Линейная алгебра. – М. : ФИЗМАТЛИТ, 2002. – 320 с.

Boundary value problems controlled system of differential equations integral performance criterion for.

© E. S. Dyuba²

Abstract. It is determined the condition of existence of vectors α_0 , β_0 and u_0 such that a solution $x(t, \alpha_0, u_0)$ satisfying the boundary condition $x(T, \alpha_0, u_0) = \beta_0$, gives the extremum of a functional.

Key Words: system of the differential equations, controllability, functional, extremum, the boundary conditions.

²Post graduate student Char of Mathematics and MTMD, Ryazan State University after A.S. Esenin, Ryazan; m.terehin@rsu.edu.ru.

УДК 517.9

Вопросы о робастной устойчивости и неустойчивости

© И.В. Зубов ¹, А.Ф. Зубова ², С.А. Стрекопытов ³

Аннотация. В работе рассматривается вопрос о робастной устойчивости и неустойчивости характеристического полинома матрицы линейной динамической системы. Предлагаемый подход позволяет исследовать робастную устойчивость и неустойчивость множества семейств, полученных при пропорциональном изменении интервалов вещественных и мнимых частей коэффициентов полиномов исходного семейства.

Ключевые слова: устойчивость, полином, динамическая система, коэффициент, интервальное семейство.

При исследовании поведения линейной динамической системы часто ставится задача об определении робастной устойчивости семейства систем с интервальными ограничениями на коэффициенты характеристического полинома. Эта задача эффективно решается с помощью теоремы Харитонов и графического критерия Ципкина-Поляка. Более полную информацию об исследуемой системе может дать приведенный ниже подход. Он решает вопрос не только о робастной устойчивости, но и робастной неустойчивости интервального семейства полиномов в смысле принадлежности всех полиномов семейства классу (n, k) - эквивалентности. Более того, этот подход позволяет определить робастную устойчивость и неустойчивость множества семейств, полученных при пропорциональном изменении интервалов вещественных и мнимых частей коэффициентов полиномов исходного семейства.

Рассмотрим интервальное семейство полиномов с комплексными коэффициентами вида:

$$\Phi(S) = \begin{cases} f(S) = A_0 + A_1 S + \dots + A_n S^n, \\ A_i = a_i + j b_i, \quad |a_i - a_i^0| \leq \alpha_i \gamma, \\ |b_i - b_i^0| \leq \beta_i \mu, \quad \alpha_i \geq 0, \beta_i \geq 0, \gamma > 0, \mu > 0. \end{cases} \quad (1.1)$$

Рассмотрим номинальный годограф при $-\infty < \omega < \infty$:

$$f_0(j\omega) = g_0(\omega) + j h_0(\omega) \quad (1.2)$$

$$\begin{cases} g_0(\omega) = a_0^0 - b_1^0 \omega - a_2^0 \omega^2 + b_3^0 \omega^3 + a_4^0 \omega^4 - \dots, \\ h_0(\omega) = b_0^0 + a_1^0 \omega - b_2^0 \omega^2 - a_3^0 \omega^3 + b_4^0 \omega^4 + \dots \end{cases} \quad (1.3)$$

Для номинального годографа (2) рассмотрим нормировочные функции:

$$\begin{cases} R(\omega) = \alpha_0 + \frac{\mu}{\gamma} \beta_1 |\omega| + \alpha_2 \omega^2 + \frac{\mu}{\gamma} \beta_3 |\omega|^3 + \alpha_4 \omega^4 + \dots, \\ T(\omega) = \beta_0 + \frac{\gamma}{\mu} \alpha_1 |\omega| + \beta_2 \omega^2 + \frac{\gamma}{\mu} \alpha_3 |\omega|^3 + \beta_4 \omega^4 + \dots \end{cases} \quad (1.4)$$

Покажем, что множество значений $S(\omega)$ годографов $f(j\omega)$ интервального полинома (1) является прямоугольником:

¹Профессор факультета ПМ-ПУ СПбГУ, Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург, a_v_zubov@mail.ru.

²Профессор факультета ПМ-ПУ СПбГУ, Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург, a_v_zubov@mail.ru.

³Доцент факультета ПМ-ПУ СПбГУ, Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург, a_v_zubov@mail.ru.

$$S(\omega) = \begin{cases} f(j\omega) = x(\omega) + jy(\omega); \\ |x - g_0(\omega)| \leq \gamma R(\omega), \\ |y - h_0(\omega)| \leq \mu T(\omega). \end{cases} \quad (1.5)$$

В стандартных обозначениях $x(\omega) = g(\omega)$; $y(\omega) = h(\omega)$ и неравенства (5) можно записать точнее:

$$\begin{cases} g_0(\omega) - \gamma R(\omega) \leq g(\omega) \leq g_0(\omega) + \gamma R(\omega), \\ h_0(\omega) - \mu T(\omega) \leq h(\omega) \leq h_0(\omega) + \mu T(\omega). \end{cases} \quad (1.6)$$

Чтобы доказать неравенства (6), сделаем очевидные преобразования с границами первого неравенства из (6):

Для $\omega > 0$:

$$\begin{aligned} g_0(\omega) - \gamma R(\omega) &= (a_0^0 - b_1^0\omega - a_2^0\omega^2 + b_3^0\omega^3 + a_4^0\omega^4 - \dots) - \\ &- \gamma(\alpha_0 + \beta_1\frac{\mu}{\gamma}\omega + \alpha_2\omega^2 + \beta_3\frac{\mu}{\gamma}\omega^3 + \alpha_4\omega^4 + \dots) = \\ &= (a_0^0 - \gamma\alpha_0) - (b_1^0 + \beta_1\mu)\omega - (a_2^0 + \gamma\alpha_2)\omega^2 + \\ &+ (b_3^0 - \beta_3\mu)\omega^3 + (a_4^0 - \gamma\alpha_4)\omega^4 - \dots = \underline{g_1}(\omega). \end{aligned}$$

Аналогично при $\omega \geq 0$:

$$\begin{aligned} g_0(\omega) + \gamma R(\omega) &= (a_0^0 + \gamma\alpha_0) - (b_1^0 - \beta_1\mu)\omega - (a_2^0 - \gamma\alpha_2)\omega^2 + \\ &+ (b_3^0 + \beta_3\mu)\omega^3 + (a_4^0 + \gamma\alpha_4)\omega^4 - \dots = \underline{g_1}(\omega). \end{aligned}$$

Для $\omega \leq 0$:

$$\begin{aligned} g_0(\omega) - \gamma R(\omega) &= (a_0^0 - b_1^0\omega - a_2^0\omega^2 + b_3^0\omega^3 + a_4^0\omega^4 - \dots) - \\ &- \gamma(\alpha_0 - \beta_1\frac{\mu}{\gamma}\omega + \alpha_2\omega^2 - \beta_3\frac{\mu}{\gamma}\omega^3 + \alpha_4\omega^4 \dots) = \\ &= (a_0^0 - \gamma\alpha_0) - (b_1^0 - \beta_1\mu)\omega - (a_2^0 + \alpha_2\gamma)\omega^2 + \\ &+ (b_3^0 + \beta_3\mu)\omega^3 + (a_4^0 - \gamma\alpha_4)\omega^4 - \dots = \\ &= (a_0^0 - \gamma\alpha_0) + (b_1^0 - \beta_1\mu)|\omega| - (a_2^0 + \alpha_2\gamma)\omega^2 - \\ &- (b_3^0 + \beta_3\mu)|\omega|^3 + (a_4^0 - \gamma\alpha_4)\omega^4 - \dots = \underline{g_2}(\omega) \\ g_0(\omega) + \gamma R(\omega) &= (a_0^0 + \gamma\alpha_0) + (b_1^0 + \beta_1\mu)|\omega| - \\ &- (a_2^0 - \alpha_2\gamma)\omega^2 - (b_3^0 - \beta_3\mu)|\omega|^3 = \overline{g_2}(\omega) \end{aligned}$$

Теперь рассмотрим границы второго неравенства из (6). Для $\omega \geq 0$:

$$\begin{aligned} h_0(\omega) - \mu T(\omega) &= (b_0^0 - \mu\beta_0) + (a_1^0 - \gamma\alpha_1)\omega - (b_2^0 + \mu\beta_2)\omega^2 - \\ &\quad - (a_3^0 + \gamma\alpha_3)\omega^3 + (b_4^0 - \mu\beta_4)\omega^4 + \dots = \underline{h_1}(\omega) \end{aligned}$$

Аналогично при $\omega \geq 0$:

$$\begin{aligned} h_0(\omega) + \mu T(\omega) &= (b_0^0 + \mu\beta_0) + (a_1^0 + \gamma\alpha_1)\omega - (b_2^0 - \mu\beta_2)\omega^2 - \\ &\quad - (a_3^0 - \gamma\alpha_3)\omega^3 + (b_4^0 + \mu\beta_4)\omega^4 + \dots = \overline{h_1}(\omega) \end{aligned}$$

Для $\omega \leq 0$:

$$\begin{aligned} h_0(\omega) - \mu T(\omega) &= (b_0 - \mu\beta_0) + (a_1^0 + \gamma\alpha_1)\omega - (b_2^0 + \mu\beta_2)\omega^2 - \\ &\quad - (a_3^0 - \gamma\alpha_3)\omega^3 + (b_4^0 - \mu\beta_4)\omega^4 + \dots = \underline{h_2}(\omega) \\ h_0(\omega) + \mu T(\omega) &= (b_0 + \mu\beta_0) + (a_1^0 - \gamma\alpha_1)\omega - (b_2^0 - \mu\beta_2)\omega^2 - \\ &\quad - (a_3^0 + \gamma\alpha_3)\omega^3 + (b_4^0 + \mu\beta_4)\omega^4 + \dots = \overline{h_2}(\omega) \end{aligned}$$

Таким образом, доказано, что семейство значений $S(\omega)$ годографов $f(i\omega)$ находится при $-\infty < \omega < \infty$ в прямоугольнике $[\underline{g_1}, \overline{g_1}] \times [\underline{h_1}, \overline{h_1}]$ при $\omega \geq 0$ и в прямоугольнике $[\underline{g_2}, \overline{g_2}] \times [\underline{h_2}, \overline{h_2}]$ при $\omega \leq 0$, т. е. доказаны неравенства (5) и (6).

Заметим, что при $\omega = 0$ значения $S(\omega)$ семейства годографов $f(j\omega)$ остаются прямоугольником:

$$S(0) = [a_0^0 - \gamma\alpha_0, a_0^0 + \gamma\alpha_0] \times [b_0^0 - \mu\beta_0, b_0^0 + \mu\beta_0].$$

Условие $0 \notin S(\omega)$ и (5) для выполнения принципа исключения нуля в комплексном случае. Эквивалентно тому, что

$$\left| \frac{g_0(\omega)}{R(\omega)} \right| > \gamma, \quad \left| \frac{h_0(\omega)}{T(\omega)} \right| > \mu.$$

О п р е д е л е н и е 1.1. Назовем при $\alpha_0 > 0$, $\beta_0 > 0$, $\alpha_n > 0$, $\beta_n > 0$, функцию $Z(\omega)$

$$Z(\omega) = \frac{g_0(\omega)}{R(\omega)} + j \frac{h_0(\omega)}{T(\omega)},$$

определенную на всей вещественной оси, сложным нормированным номинальным годографом или кратко - сложным годографом.

Т е о р е м а 1.5. Для робастной устойчивости комплексного интервального полинома $\Phi(S)$ степени n при $\alpha_0 > 0$, $\beta_0 > 0$, $\alpha_n > 0$, $\beta_n > 0$, необходимо и достаточно выполнение двух условий:

1.

$$\begin{cases} \max((a_0^0)^2 - (\gamma\alpha_0)^2, (b_0^0)^2 - (\mu\beta_0)^2) > 0, \\ \max((a_n^0)^2 - (\gamma\alpha_n)^2, (b_n^0)^2 - (\mu\beta_n)^2) > 0. \end{cases}$$

2. $Z(\omega)$ при $-\infty < \omega < \infty$ проходит последовательно $2n$ квадратов, не пересекая прямоугольника с вершинами $(\pm\gamma, \pm\mu)$.

Из определения выше следует, что сложный годограф $Z(\omega)$ является ограниченным при $-\infty < \omega < \infty$, и функции $\operatorname{Re} Z(\omega)$, $\operatorname{Im} Z(\omega)$ могут иметь скачок первой производной при $\omega = 0$.

О п р е д е л е н и е 1.2. Полином степени n с вещественными или комплексными коэффициентами, не имеющий нулевых и чисто мнимых корней

$$\varphi(s) = a_0 + a_1 s + \dots + a_n s^n, \quad a_0 \neq 0, \quad a_n \neq 0,$$

принадлежит классу (n, k) - эквивалентности, если k его корней, с учетом их кратности, лежат в правой полуплоскости.

Назовем интервальный полином $\Phi(S)$ интервальным полиномом класса (n, k) - эквивалентности, если любой полином из этого семейства принадлежит классу (n, k) - эквивалентности.

Т е о р е м а 1.6. Для того, чтобы комплексный интервальный полином $\Phi(S)$ степени n был интервальным полиномом класса (n, k) - эквивалентности при $\alpha_0 > 0$, $\beta_0 > 0$, $\alpha_n > 0$, $\beta_n > 0$, необходимо и достаточно выполнение двух условий: 1.

$$\begin{cases} \max((a_0^0)^2 - (\gamma\alpha_0)^2, (b_0^0)^2 - (\mu\beta_0)^2) > 0, \\ \max((a_n^0)^2 - (\gamma\alpha_n)^2, (b_n^0)^2 - (\mu\beta_n)^2) > 0. \end{cases}$$

2. Годограф $Z(\omega)$ при изменении ω от $-\infty$ до ∞ проходит последовательно против часовой стрелки ровно $n - 2k$ полуоборотов, не пересекая прямоугольника с вершинами $(\pm\gamma, \pm\mu)$.

З а м е ч а н и е 1.1. При $k = 0$ речь идет об устойчивых интервальных семействах, при $k > 0$ о неустойчивых.

З а м е ч а н и е 1.2. За счет изменения двух независимых параметров γ и μ можно исследовать на робастную устойчивость и неустойчивость интервальные полиномы с комплексными коэффициентами, варьируя величину интервалов по реальной и мнимой частям коэффициентов, что дает две степени свободы.

З а м е ч а н и е 1.3. За счет потери ограниченности и непрерывности сложного годографа $Z(\omega)$ можно отбросить условие на масштабные множители: $\alpha_0 > 0$, $\beta_0 > 0$, $\alpha_n > 0$, $\beta_n > 0$, заменив их условиями:

$$\sum_{\substack{2r+1 \leq n \\ 2m \leq n}}^n (\alpha_{2m} + \beta_{2r+1}) > 0, \quad \sum_{\substack{2r+1 \leq n \\ 2m \leq n}} (\alpha_{2r+1} + \beta_{2m}) > 0$$

или одним условием $T(\omega)R(\omega) > 0$.

З а м е ч а н и е 1.4. Если γ и μ зависимы линейно, т. е. $\mu = k\gamma$, то можно указать $\gamma_{\max}$, что интервальный полином $\Phi(S)$ робастно устойчив или неустойчив при $\gamma < \gamma_{\max}$. В этом случае нормировочные функции $R(\omega)$ и $T(\omega)$ не зависят от γ и μ , $\gamma_{\max}$ определяется по формуле $\gamma_{\max} = \min(\gamma^*, \gamma_\infty)$, где $2\gamma^*$, $2k\gamma^*$ - размеры наибольшего

прямоугольника, вписанного в сложный годограф $Z(\omega)$. В условиях теоремы (годограф $Z(\omega)$ - ограниченный и непрерывный) число γ_∞ определяется формулой $\gamma_\infty = \frac{|b_n|}{k\beta_n}$ при нечетном n и $\gamma_\infty = \frac{|a_n|}{k\alpha_n}$ при четном n . Если же сложный годограф:

$Z(\omega)$ неограничен, но непрерывен, то $\gamma_{\max} = \min(\gamma^*, \gamma^0)$;

$Z(\omega)$ неограничен из-за разрыва при $\omega = 0$, а в окрестности $\omega = \infty$ $Z(\omega)$ ограниченная функция, то $\gamma_{\max} = \min(\gamma^*, \gamma_\infty)$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зеленков Г.А., Дикусар В.В., Зубов Н.В. Методы анализа робастной утойчивости и неустойчивости. М.: ВЦ РАН, 2007. 234 с.
2. Поляк Б.Т., Щербаков П.С. Робастная устойчивость и управление. М.: Наука, 2002. 303 с.
3. Зубов А.В., Зубов Н.В., Лаптинский В.Н. Динамика управляемых систем. СПб., СПбГУ, 2008. 337 с.

The questions about robust stability and instability

© I.V. Zubov ⁴, A.F. Zubova ⁵, S.A. Strecopitov ⁶

Abstract. In work is considers the question about robust stability and instability of characteristic polynomials of matrix linear dynamical system. The proposing approach ia allows to investigate robust stability and instability of multitude families, giving with proportion change of intervals substantial and insubstantial parts coefficient polynomial first family.

Key Words: stability, polinomial, dynamical system, coefficient, interval family.

⁴Professor of faculty Applied Mathematics - Process Control SPbGU, Saint-Petersburg State University, Saint-Petersburg; a_v_zubov@mail.ru

⁵Professor of faculty Applied Mathematics - Process Control SPbGU, Saint-Petersburg State University, Saint-Petersburg; a_v_zubov@mail.ru

⁶Associate professor of faculty Applied Mathematics - Process Control SPbGU, Saint-Petersburg State University, Saint-Petersburg; a_v_zubov@mail.ru

УДК 519.622

Исследование устойчивости метода вариационных сплайнов

© Ю. В. Мартыненко¹

Аннотация. Строится функция устойчивости метода вариационных сплайнов и исследуются ее свойства.

Ключевые слова: дифференциально-алгебраические уравнения, метод вариационных сплайнов, устойчивость.

1. Введение

Метод вариационных сплайнов (ВС) разработан для решения задачи Коши для дифференциально-алгебраических уравнений [1]:

$$F(\dot{x}, x, t) = 0, \quad x(t_0) = x^0. \quad (1.1)$$

Он основан на представлении искомого решения в виде сплайна с подвижными узлами. Параметры сплайна ищутся как решение задачи минимизации функционала невязки

$$J(x(\cdot)) = \int_{t_0}^T \|F(\dot{x}, x, t)\|^2 dt \rightarrow \min. \quad (1.2)$$

При этом на сплайн накладываются дополнительные условия непрерывности или непрерывной дифференцируемости в узлах сетки. Согласно основной вычислительной схеме метода, на каждом промежутке решается задача безусловной минимизации функционала невязки с точностью ε , что обеспечивает выполнение неравенства

$$J(x(\cdot)) \leq \varepsilon. \quad (1.3)$$

Такой подход позволяет решать задачи (1.1), не имеющие конечного индекса дифференцирования (т.е. не сводимые к нормальной форме Коши)

$$\dot{x} = f(x, t). \quad (1.4)$$

Кроме того, метод ВС способен решать непосредственно задачи в нормальной форме. При этом по временным и вычислительным затратам он уступает классическим конечно-разностным методам, но позволяет получить решение в виде непрерывной или непрерывно-дифференцируемой функции. Поэтому особый интерес представляет изучение свойств метода ВС при решении задач в нормальной форме (1.4).

В работе [2] было проведено частичное исследование метода ВС для решения (1.4). Были получены оценки погрешности метода и функция устойчивости для непрерывного сплайна степени 1. Данная работа посвящена изучению устойчивости метода ВС в случае непрерывного сплайна степени 2.

¹Ст. преподаватель кафедры ЭММиИТ, Ульяновский государственный университет, г. Ульяновск; Marj2005@yandex.ru

Как известно, важной характеристикой численных методов решения задачи Коши является их устойчивость, т.е. ограниченность погрешности приближенного решения $\{x_k\}$ при $k \rightarrow \infty$. Свойство устойчивости изучается на основе тестового уравнения Далквиста

$$\dot{x} = \lambda x, \quad x(0) = 1, \quad t \geq 0. \quad (1.5)$$

Исследуемый метод применяется к решению (1.5) и записывается в виде

$$x_k = R(\lambda h) x_{k-1}, \quad (1.6)$$

где $R(\lambda h)$ называется функцией устойчивости метода и определяет его свойства [3].

О п р е д е л е н и е 1.1. Областью устойчивости метода называется множество $S = \{z \in \mathbb{C} : |R(z)| \leq 1\}$.

О п р е д е л е н и е 1.2. Метод называется А-устойчивым, если для него $S = \{z \in \mathbb{C} : \operatorname{Re} z \leq 0\}$.

Разностный метод с рациональной функцией устойчивости вида $R(z) = \frac{P(z)}{Q(z)}$ А-устойчив тогда и только тогда, когда:

- 1) $|R(iy)| \leq 1$ для $\forall y \in \mathbb{R}$;
- 2) $R(z)$ аналитическая функция при $\operatorname{Re} z < 0$.

Первое требование называется I-устойчивостью. I-устойчивость эквивалентна условию, что для функции

$$E(y) = Q(iy)Q(-iy) - P(iy)P(-iy) \quad (1.7)$$

выполняется $E(y) \geq 0$ для $\forall y \in \mathbb{R}$.

При решении жестких задач кроме А-устойчивости желательно, чтобы значение $|R(z)|$ было много меньше 1 при $z \rightarrow -\infty$. В противном случае жесткие компоненты решения будут демпфироваться очень медленно. Поэтому свойство А-устойчивости усиливается дополнительным требованием.

О п р е д е л е н и е 1.3. Метод называется L-устойчивым, если он А-устойчив и $\lim_{z \rightarrow \infty} R(z) = 0$.

В работе [2] была получена функция устойчивости метода в случае непрерывного сплайна 1-й степени. Доказано, что в этом случае метод вариационных сплайнов является А-устойчивым и не является L-устойчивым.

Рассмотрим возможность исследования устойчивости метода ВС для непрерывного сплайна степени 2.

2. Построение функции устойчивости

Пусть тестовое уравнение Далквиста (1.5) решается методом ВС на отрезке $[0, T]$. Разобьем этот отрезок на равные промежутки $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_N \equiv T$ и на каждом из них определим квадратичный сплайн с условиями непрерывности в узлах сетки:

$$x^k(t, v^k) = \sum_{\alpha=0}^2 v_{\alpha}^k (t - t_k)^{\alpha}, \quad x^{k+1}(t_{k+1}, v^{k+1}) = x^k(t_{k+1} - 0, v^k), \quad t_k \leq t < t_{k+1}, \quad (2.1)$$

где $v^k = \{v_0^k, v_1^k, v_2^k\}$. При этом $v_0^k = x^0$ на первом промежутке, а на остальных $v_0^k = x^{k-1}(t_k, v^{k-1})$, т.е. v_0^k определяется из условия непрерывности сплайна. Согласно общей вычислительной схеме метода ВС, на каждом промежутке $[t_k, t_{k+1}]$ необходимо решить задачу безусловной минимизации функционала невязки

$$\varphi_k(v^k) = \int_{t_k}^{t_{k+1}} \|\dot{x}(t, v^k) - \lambda x(t, v^k)\|^2 dt \rightarrow \min \quad (2.2)$$

по параметрам $v^k = \{v_1^k, v_2^k\}$. Обозначим $t_{k+1} - t_k = h$, $x(t_k) = x_k$, $k = 0, 1, \dots, N$. Тогда

$$x_{k+1} = v_0^k + (t_{k+1} - t_k) v_1^k + (t_{k+1} - t_k)^2 v_2^k = v_0^k + h v_1^k + h^2 v_2^k. \quad (2.3)$$

Далее для простоты положим $v^k \equiv v$.

Для решения задачи (2.2) находим производные функционала невязки по v_1 и v_2 и приравняем их к нулю:

$$\begin{cases} \frac{\partial \varphi_k(v)}{\partial v_1} \equiv \int_{t_k}^{t_{k+1}} (v_1 + 2v_2(t - t_k) - \lambda(v_0 + v_1(t - t_k) + v_2(t - t_k)^2)) (1 - \lambda(t - t_k)) dt = 0, \\ \frac{\partial \varphi_k(v)}{\partial v_2} \equiv \int_{t_k}^{t_{k+1}} (v_1 + 2v_2(t - t_k) - \lambda(v_0 + v_1(t - t_k) + v_2(t - t_k)^2)) \cdot \\ \cdot (2(t - t_k) - \lambda(t - t_k)^2) dt = 0. \end{cases} \quad (2.4)$$

Получаем линейную систему из двух уравнений относительно двух неизвестных, где левая часть - матрица C размерности 2×2 :

$$C = \begin{pmatrix} h(1 - \lambda h + (\lambda h)^2/3) & h^2(1 - \lambda h + (\lambda h)^2/4) \\ h^2(1 - \lambda h + (\lambda h)^2/4) & h^3(4/3 - \lambda h + (\lambda h)^2/5) \end{pmatrix}, \quad (2.5)$$

а правая часть - вектор d размерности 2×1 :

$$d = \begin{pmatrix} \lambda v_0 h(1 - \lambda h/2) \\ \lambda v_0 h^2(1 - \lambda h/3) \end{pmatrix}. \quad (2.6)$$

Найдем определитель матрицы C :

$$\begin{aligned} \det(C) &= h^4 \left((1 - \lambda h + \lambda^2 h^2/3) (4/3 - \lambda h + \lambda^2 h^2/5) - (1 - \lambda h + (\lambda h)^2/4)^2 \right) = \\ &= h^4 (1/3 - \lambda h/3 + 13\lambda^2 h^2/90 - \lambda^3 h^3/30 + \lambda^4 h^4/240). \end{aligned}$$

Обозначим $z = \lambda h$, а

$$Q(z) = 1/3 - z/3 + 13z^2/90 - z^3/30 + z^4/240. \quad (2.7)$$

Корнями полинома $Q(z)$ являются комплексные числа $z_1 = 1.7 + 3.141i$, $z_2 = 1.7 - 3.141i$, $z_3 = 2.3 + 0.991i$, $z_4 = 2.3 - 0.991i$. Таким образом, для любых действительных значений λ и $h \neq 0$ это выражение не обращается в 0. Тогда решение соответствующей системы линейных уравнений может быть получено по формулам Крамера:

$$\begin{cases} v_1 = \begin{vmatrix} \lambda v_0 h (1 - \lambda h/2) & h^2 (1 - \lambda h + (\lambda h)^2/4) \\ \lambda v_0 h^2 (1 - \lambda h/3) & h^3 (4/3 - \lambda h + (\lambda h)^2/5) \end{vmatrix} / \det(C), \\ v_2 = \begin{vmatrix} h (1 - \lambda h + (\lambda h)^2/3) & \lambda v_0 h (1 - \lambda h/2) \\ h^2 (1 - \lambda h + (\lambda h)^2/4) & \lambda v_0 h^2 (1 - \lambda h/3) \end{vmatrix} / \det(C). \end{cases} \quad (2.8)$$

Тогда

$$v_1 = \frac{h^3 P1(z)}{h^4 Q(z)} v_0 = \frac{P1(z)}{h Q(z)} v_0, \quad v_2 = \frac{h^2 P2(z)}{h^4 Q(z)} v_0 = \frac{P2(z)}{h^2 Q(z)} v_0, \quad (2.9)$$

где

$$P1(z) = z/3 - z^2/3 + 7z^3/60 - z^4/60, \quad (2.10)$$

$$P2(z) = z^2/6 - z^3/12 + z^4/72. \quad (2.11)$$

Тогда в силу (2.3)

$$x_{k+1} = v_0^k + h \frac{P1(z)}{h Q(z)} + h^2 \frac{P2(z)}{h^2 Q(z)} = v_0^k \frac{Q(z) + P1(z) + P2(z)}{Q(z)}. \quad (2.12)$$

Таким образом, получаем функцию устойчивости метода ВС для рассматриваемого случая:

$$R(z) = \frac{1 - z^2/15 + z^4/240}{1 - z + 13z^2/30 - z^3/10 + z^4/80}. \quad (2.13)$$

Как и для неявных методов Рунге-Кутты, функция (2.13) является рациональной функцией с вещественными коэффициентами над полем комплексных чисел [3].

3. А-устойчивость метода ВС

Далее исследуем полученную функцию устойчивости (2.13).

Т е о р е м а 3.1. *Метод вариационных сплайнов для кусочно-гладкого сплайна второй степени на равномерной сетке с шагом h является I-устойчивым, А-устойчивым и не является L-устойчивым.*

Д о к а з а т е л ь с т в о. Сначала докажем I-устойчивость.

Найдем функцию (1.7):

$$\begin{aligned} E(y) &= Q(iy) Q(-iy) - (Q(iy) + P1(iy) + P2(iy)) (Q(-iy) + P1(-iy) + P2(-iy)) = \\ &= 1 + \frac{4}{30} y^2 + \frac{345}{27000} y^4 + \frac{2}{2400} y^6 + \frac{1}{6400} y^8 - \left(1 + \frac{4}{30} y^2 + \frac{345}{27000} y^4 + \frac{1}{1800} y^6 + \frac{1}{57600} y^8 \right) = \\ &= \frac{5}{3600} y^6 + \frac{1}{7200} y^8. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Очевидно, что $E(y) \geq 0$ для $\forall y \in \mathbb{R}$. Таким образом, I-устойчивость доказана.

Функции $Q(z)$, $P1(z)$ и $P2(z)$ являются аналитическими в любой точке комплексной плоскости. Следовательно, $R(z)$ будет аналитической в любой точке, для

которой $Q(z) \neq 0$. Как было указано в п. 2, $Q(z)$ обращается в 0 при значениях $z_{1,2} = 1.7 \pm 3.141i$, $z_{3,4} = 2.3 \pm 0.991i$. Таким образом, при $\operatorname{Re} z < 0$ функция устойчивости метода является аналитической. А-устойчивость доказана.

Метод не является L-устойчивым, так как

$$\lim_{z \rightarrow \infty} R(z) = \frac{1/240}{1/80} = \frac{1}{3} \neq 0. \quad (3.2)$$

Доказательство закончено.

Обобщим теорему на случай неравномерной сетки. Разобьем отрезок $[0, T]$ на промежутки произвольной длины $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_N \equiv T$ и обозначим $h_k = t_k - t_{k-1}$, $k = 1, \dots, N$. Тогда

$$x_{k+1} = v_0^k + (t_{k+1} - t_k) v_1^k + (t_{k+1} - t_k)^2 v_2^k = v_0^k + h_{k+1} v_1^k + h_{k+1}^2 v_2^k. \quad (3.3)$$

Так как на каждом промежутке решение задачи минимизации (2.2) задается одной и той же общей формулой (2.8) и h_k в итоге сокращается, то все полученные результаты верны и для неравномерной сетки.

В случае кусочно-гладкого сплайна первой степени на равномерной сетке был получен аналогичный результат [2]. Функция устойчивости являлась рациональной функцией с вещественными коэффициентами:

$$R(z) = \frac{1 - z^2/6}{1 - z + z^2/3}. \quad (3.4)$$

Метод ВС являлся А-устойчивым и не являлся L-устойчивым. Так как обе функции (2.13) и (3.4) получены на основе общей вычислительной схемы метода ВС, результат для сплайна первой степени так же верен и для неравномерной сетки. Таким образом, выполняется теорема 3.2.

Т е о р е м а 3.2. *Если степень кусочно-гладкого сплайна не превышает 2, то метод ВС является А-устойчивым и не является L-устойчивым.*

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Горбунов В.К., Мартыненко Ю.В. Метод вариационных сплайнов для неявных дифференциальных уравнений // Вестник Самарского государственного технического университета. Математическая серия. – 2007. – № 2(6). – С. 16-28.
2. Мартыненко Ю.В. Метод вариационных сплайнов для дифференциальных уравнений в нормальной форме // Труды Средневолжского математического общества. – 2007. – Т. 9, № 2. – С. 110-120.
3. Хайрер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. – М.: Мир, 1999. – 685 с.

Stability of the variational spline method.

© Y. V. Martinenko²

Abstract. In the work stability function is obtained for variational spline method and properties of the function are investigated.

Key Words: differential-algebraic equations, variational spline method, stability.

²Senior teacher of EMM and IT Chair, Ulyanovsk State University, Ulyanovsk; Marj2005@yandex.ru.

УДК 519.688

Автоматизированная система исследования и анализа механизмов химических реакций

© Д. Ф. Масков¹, И. М. Губайдуллин²

Аннотация. В работе представлено описание разработанного программного комплекса. Приведены основные направления проектирования, проблемы при автоматизации процесса исследования кинетики сложных химических реакций. Показаны вычислительная архитектура, схема взаимодействия вычислительных блоков, методы увеличения производительности. Описана логическая модель хранилища данных изученных химических реакций, его взаимодействие с автоматизированной системой.

Ключевые слова: исследование, кинетика, программа, база данных, численные методы.

1. Введение

Исследование кинетики сложных химических реакций - процесс разработки кинетических моделей на основе большого объема экспериментальной информации, полученной при вариации реакционных параметров: температуры, давления, состава реагирующих веществ. Фактически, построение кинетической модели сводится к целенаправленному химическому эксперименту и его математической обработке, реализованной на базе решения систем дифференциальных уравнений, методов решения прямых и обратных задач. При этом возникает ряд трудностей: 1. невозможность измерения всех компонентов реакции приводит к недостаточной информативности проведенного химического эксперимента и, как следствие, множественности решения прямой задачи с серьезными затратами вычислительных ресурсов; 2. накапливаемый опыт разработки кинетических моделей ведет к увеличению числа методов и алгоритмов решения дифференциальных уравнений, прямых и обратных задач, что необходимо учитывать при эффективном поиске кинетических параметров; 3. кинетические модели изученных химических реакций необходимо должным образом хранить для последующей простой выборки и анализа. Эффективный процесс исследования механизмов химических реакций должен опираться на качественное решение приведенных выше задач: необходимо проанализировать доступные вычислительные ресурсы, учесть опыт внедрения аналогичных систем и пожелания химиков-аналитиков. Автоматизация процесса исследования позволит уделить больше внимания творческим задачам и предоставит больший простор для вычислительных экспериментов.

2. Анализ требований

АС продолжает работы ИНК РАН по автоматизации процесса расчета механизмов сложных химических реакций, поэтому наряду с общими требованиями, предъявляемыми к системе, необходимо указать и конкретные - на основе опыта разработки аналогичных систем - «ИАС ММХК»[1], «АСОД ХК»[2]. Детальный анализ этих систем выявил основные минусы проектирования:

¹Институт Нефтехимии и Катализа РАН, г. Уфа; DenisMaskov@mail.ru

²Старший научный сотрудник лаборатории математической химии, Институт нефтехимии и катализа РАН, г. Уфа; irekmars@mail.ru.

1. невозможность оперирования высшим уровнем математического моделирования физико-химических процессов химических технологий: внутри зерна катализатора, внутри слоя катализатора;
2. невозможность выполнения независимых от машины клиента ресурсоемких расчетов на стороне сервера, что приводит к высокой вычислительной нагрузке;
3. трудоемкое расширение существующей базы данных новыми сущностями вследствие жесткой логической структурой, что вызывает трудности при создании единого хранилища данных изученных реакций;
4. трудоемкое распараллеливание процесса решения прямых задач с использованием новых высокопроизводительных платформ и средств программирования.

На основе вышеприведенного и учитывая общие требования к системе можно сформулировать основные направления проектирования АС:

1. организация взаимосвязи кинетического моделирования на базе натуральных экспериментов и на основе диффузии и теплопереноса: исследование внутренней и внешней диффузионной области, кинетика при изменении температуры;
2. организация трехуровневой сетевой вычислительной архитектуры с возможностью выполнения ресурсоемких расчетов на многоядерных ЭВМ и высокопроизводительных графических картах;
3. разработка метода распараллеливания решения прямой задачи, типовой для разных вычислительных платформ;
4. развитие банка алгоритмов и методов решения прямых и обратных задач, дифференциальных уравнений;
5. модификация структуры базы данных согласно теории и детального исследования процесса разработки кинетических моделей.

3. Этапы проектирования

Основные функции системы:

- 1) верификация исходных данных по критериям кинетического расчета;
- 2) поиск кинетических параметров;
- 3) надежное хранение данных реакции;
- 4) вывод результатов расчета.

Представленные функции планируется реализовать последовательным подключением программных блоков: «Прием и верификация данных», «Расчет кинетических параметров», «Анализ результатов» (схема 1).

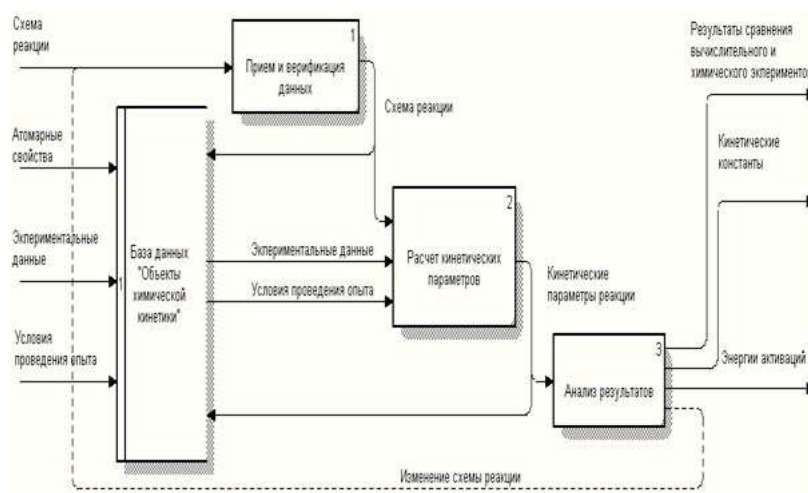


Схема 1 - Функциональная схема АС

Верификация данных предполагает соответствие гипотезы о механизме реакции закону сохранения масс. В зависимости от результатов сравнения происходит или расчет кинетических параметров, или изменение схемы реакции. Поиск кинетических параметров основан на системном подходе: в зависимости от целей исследования (чистая механика химических реакций, с учетом влияния катализатора, открытость и закрытость системы) выбирается соответствующее математическое описание объекта (СОНДУ, СОНДУ в частных производных, дифференциальные уравнения на основе разных физико-химических законов), численный метод и алгоритм реализации. В качестве основы вычислительного процесса используется опыт решения аналогичных задач, реализованный на основе банка алгоритмов и методов, и техника параллельного расчета на высокопроизводительных платформах. Полученные результаты могут быть проанализированы в удобном для анализа виде: графики, таблицы, 3D-модели («Анализ результатов»). Работа каждого программного модуля сопровождается сохранением данных в базе данных «объекты химической кинетики», исполненной в современной объектно-ориентированной СУБД PostgreSQL [3].

4. Вычислительная архитектура

В системе «АС» планируется организовать трехуровневую вычислительную архитектуру. Архитектура предполагает наличие следующих компонентов: клиентское приложение (терминал), сервер приложений (сервер задач) и сервер («База данных»).

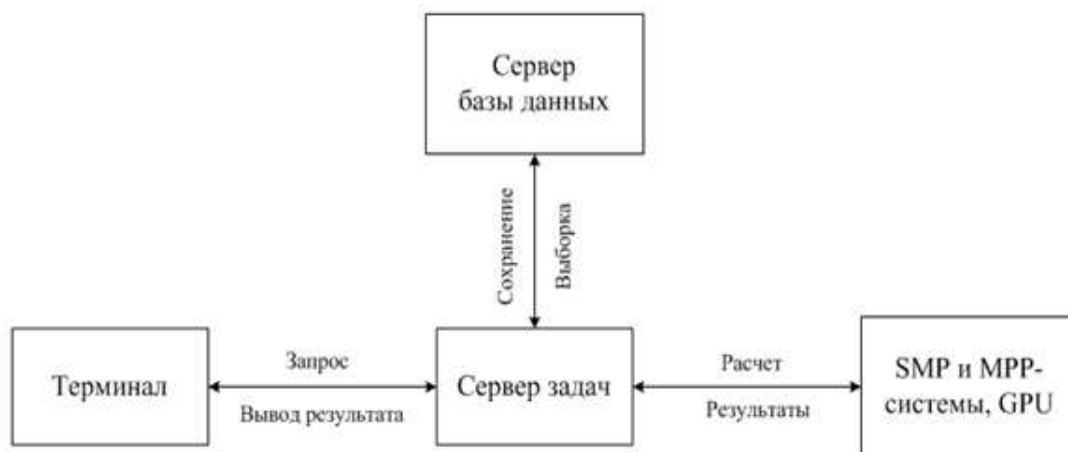


Схема 2 - Структурная схема вычислительной архитектуры

Посредством терминала пользователем системы «АС» (химик-экспериментатор) вводятся исходные данные кинетической задачи, выбирается метод, алгоритм и критерии эффективности, т.е. формируется запрос на решение. Сервер задач обрабатывает запрос и, анализируя предоставленные данные, принимает решение об организации вычислительного процесса: использовать мощности одно- и многоядерных процессоров, кластерных платформ, или производительность графических карт. Эти решения вырабатываются подключением специальных библиотек программного обеспечения, при этом тонкости расчета кинетической задачи возлагаются на химика-экспериментатора. По окончании расчета полученные результаты отсылаются серверу задач, который после согласования с клиентом сохраняет их на сервере базы данных. Сервер базы данных хранит кинетические модели всех изученных ранее химических реакций, что является удобным инструментом анализа. Представленная трёхуровневая вычислительная архитектура обладает такими достоинствами как: масштабируемость, конфигурируемость, высокая безопасность и надежность данных [4]. Простое подключение современных высокопроизводительных платформ делает архитектуру типовой для последующего расширения новыми методами распараллеливания.

4.1. Метод распараллеливания кинетической задачи

Исследование механизма сложной химической реакции сводится к циклическому решению множества обратных задач. Как следствие, поиск кинетических констант реакции требует серьезных затрат вычислительных ресурсов, и в среднем при определении механизма типовой реакции, прямая задача решается несколько миллионов раз [5]. Распараллеливание прямой задачи возможно по блокам экспериментальных данных, замеренных при разных температурах. Предлагаемая модель распараллеливания вычислительного процесса приведена на схеме 3.

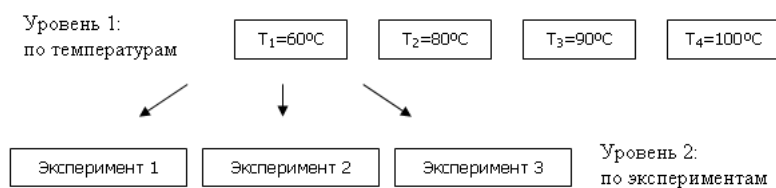


Схема 3 - Распределенный процесс обработки частной реакции

Как видно из схемы, разделение задач на первом уровне происходит по температурной составляющей экспериментальных данных, число температур которых ограничено, а на втором обрабатывается либо сразу серия экспериментов, либо каждый эксперимент по отдельности. Таким образом, имея достаточное количество вычислительных потоков возможно построение эффективного вычислительного процесса поиска приемлемых значений кинетических констант. Приведенная схема распараллеливания решения прямой задачи позволяет добиться кратного прироста производительности. В качестве платформ увеличения производительности в АС планируется использовать: регистры SSE одно- и многопроцессорных ЭВМ, графические карты, кластеры.

4.2. Расчет кинетических параметров

В качестве основы программного модуля «Расчет кинетических параметров» используется концепция, заложенная в программу - координатор обработки данных системы АСОД ХК [2]. Программный модуль включает: центр вычислений (координация и взаимодействие различных вычислительных блоков), библиотеки кинетических функций, методы решения прямых и обратных задач, различные варианты минимизируемых функционалов (схема 4). Все вычислительные блоки делятся на 4-ре категории:

1. Математическое описание - реализует кинетические зависимости, подставляемые в правые части СОНДУ (системы нелинейных дифференциальных и алгебраических уравнений, с учетом массы катализатора, законы действующих масс и Ленгмюра-Хиншельвуда). Включает так же в себя химический транслятор, преобразующий данные стехиометрической матрицы в функциональные зависимости. На текущий момент реализованы модели «Закона действующих масс» и «Ленгмюра-Хиншельвуда»



Схема 4 - Взаимодействие вычислительных блоков

2. Метод решения прямой задачи - является универсальным блоком для решения СОНДУ, не зависящий от текущего контекста (химическая кинетика) и может использоваться для любых других задач. Например, для исследования процессов на зерне и в слое катализатора. На основе функции правой части и начальных данных строится сетка значений с указанным шагом на отрезке. Реализованы: «Рунге-Кутта», Розенбрука и Мишельсона.

3. Функционал - минимизируемый функционал, используемый при решении обратной задачи. Сравнивает данные, полученные вычислительным и химическим экспериментами. Реализованы: «сумма абсолютных разностей», «среднеквадратичное отклонение»

4. Метод решения обратной задачи - на основе начальных значений кинетических констант осуществляет поиск новых с целью минимизации указанного функционала. Реализованы: «Покоординатный спуск», «Параболический спуск», «Случайный поиск», «Метод имитации отжига».

Вычислительный модуль работает следующим образом: для каждого из блоков указываются начальные параметры. Центр вычислений (вычислительной ядро) итеративно обращается к методу решения обратной задачи. Запрашивается значение функционала, на основе которого происходит обращение к методу решения прямой задачи. Метод решения прямой задачи использует функцию правых частей из блока математического описания. На каждой итерации вариация значений кинетических констант производится до достижения определенной степени точности. После определения в рамках выбранного функционала кинетических констант начинается второй этап исследования, на котором происходит расчет энергий активации и уточнение полученных кинетических констант. Поиск энергий активации производится методом наименьших квадратов на основе значений кинетических констант, полученных для экспериментов, проведенных при разных температурах. Значения энергий активации позволяют найти базовый набор кинетических констант, который описывает систему химических превращений, в целом, лучше, чем при использовании любого набора, полученного для отдельного опыта. Требование взаимосвязи кинетических моделей 1-го (натурные эксперименты) и высших (зерно, слой катализатора) уровней математического моделирования физико-химических процессов заставило дополнить структуру используемого программного обеспечения. Наряду с разработанными ранее вычислительными блоками - появилось связь с уровнем обработки зерна и слоя катализатора (схема 4). Расчет зерна и слоя катализатора происходит при найденных общих для стадий кинетических константах и энергий активации с перерасчетом прямой задачи при заданных начальных условиях (температура, концентрации веществ).

5. Базы данных

База данных «объекты химической кинетики» предназначена для хранения схем реакции, экспериментальных данных и кинетических параметров сложных химических реакций. База данных является составной частью системы АС и содержит все необходимые сведения для проведения вычислительных экспериментов. Проектирование структуры осуществлено согласно теории баз данных (удовлетворяет ограничениям третьей нормальной формы [6]) и детального исследования процесса разработки кинетических моделей. Структура базы данных поделена на четыре логических блока (схема 5):

1. сведения о реакциях
2. данные об участвующих в реакциях веществах

3. сведения по условиям и результатам проведения химических экспериментов
4. кинетические параметры

Данные исследуемых реакций включают в себя название (таблица «Реакция»), различные предполагаемые схемы реакций (таблицы «Схема реакции», «Стадия реакции», «Схема стадии»), на основе которых происходит автоматическое формирование стехиометрической матрицы, необходимой для задания системы обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений. На основании схемы стадий и структуры веществ (таблицы «Вещество», «Атомы веществ», «Атом») осуществляется расчет атомарно-молекулярных матриц, которые необходимы для проверки закона сохранения масс.

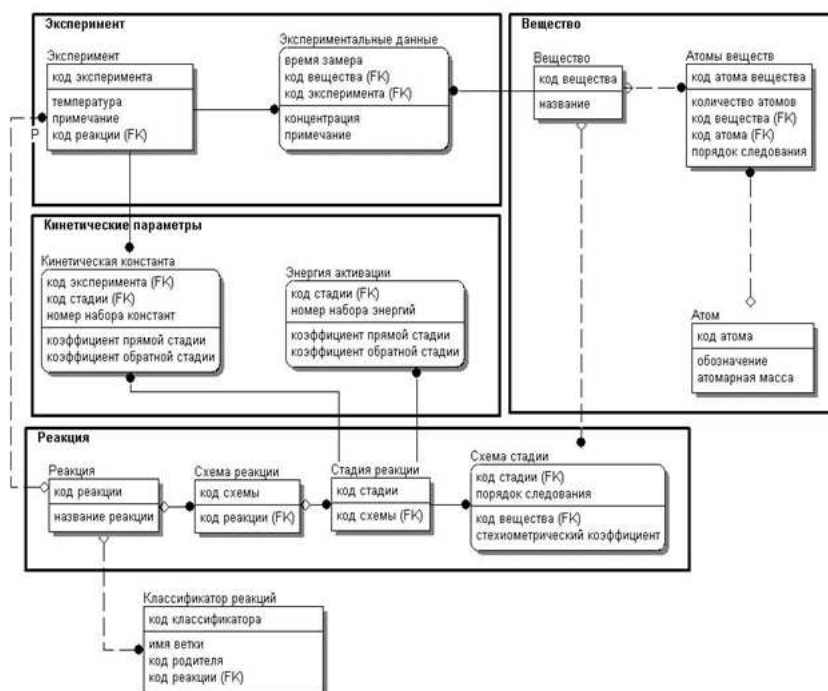


Схема 5 - Структура база данных «объекты химической кинетики»

Организационная структура базы данных предполагает постоянное обращение к ней на этапе поиска оптимального решения и сохранение полученных результатов в хранилище данных для последующего анализа и выработки рекомендаций химику-экспериментатору. В базу данных на первоначальном этапе заносятся сведения об условиях проведения химического эксперимента, экспериментальных данных и атомарных свойствах наблюдаемых в ходе реакции веществ (схема 5). Таким образом, происходит заполнение исходными данными логических блоков «Эксперимент» и «Вещество» базы данных «объекты химической кинетики» (схема 5). После проверки закона сохранения масс автоматизированной системой («Прием и верификация данных», схема 1), в базу данных заносится предполагаемая схема реакции. Рассчитанные автоматизированной системой кинетические параметры реакции («Расчет кинетических параметров») после согласования с химиком-экспериментатором («Анализ результатов») также заносятся в базу, в логический блок «Кинетические параметры». Таким образом, формируется хранилище данных со всей необходимой информацией по изучаемым химическим реакциям. Возможность использования базы в качестве хранилища данных накладывает

ряд таких ограничений на выбор инструмента как высокий уровень надежности, производительности и безопасности хранения данных. Клиент-серверная архитектура взаимодействия автоматизированной системы и хранилища данных предполагает наличие соответствующей возможности в выбранном инструменте. Кроме того, программирование базы должно отвечать принятым стандартам ANSI SQL для последующего простого расширения. С учетом приведенных ограничений и наличия лицензии GNU, выбор был остановлен на объектно-реляционной системе управления базами данных «PostgreSQL»[3].

6. Выводы

Разработан программный комплекс, который существенно автоматизирует процесс исследования механизмов сложных химических реакций. Комплекс позволяет оперировать математическими моделями как 1-го уровня (натурных эксперимент), так и высших уровней представления (зерно, слой катализатора) физико-химических процессов химических технологий. Разработана типовая модель оптимизации вычислительного процесса (архитектура, метод распараллеливания), что позволяет просто подключать новые платформы и средства программирования. Дополнен банк алгоритмов и методов решения прямых и обратных задач, дифференциальных уравнений, модифицирована структура базы данных и органично спроектировано хранилище изученных ранее реакций.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. И.М. Губайдуллин, С.И. Спивак. Информационно-аналитическая система обратных задач химической кинетики // Система управления и информационные технологии № 1.1(31). - 2008. - С. 150 -153.
2. Файзуллин Р.М., Балаев А.В. Автоматизированная система исследования кинетики сложных химических реакций. Вестник Башкирского университета. 2008. Т.13.№3(1). С.835-840.
3. Дж. Уорсли, Дж. Дрейк. PostgreSQL для профессионалов. Изд-во: СПб: Питер, 2003, 496 с.
4. М. Фаулер. Архитектура корпоративных программных приложений. Изд-во: Вильямс, 2007, 544с.
5. Спивак С.И., Губайдуллин И.М., Вайман Е.В. Обратные задачи химической кинетики. Уфа РИО БашГУ, 2003, 110 с.
6. Дж. Боуман, С. Эмерсон, М. Дарновски Практическое руководство по SQL. Изд-во: СПб: Питер, 2002, 325с.

Automated system for research and analysis of mechanisms of chemical reactions

© D. F. Maskov³, I. M. Gubaydullin⁴

Abstract. The paper includes description of developed software complex. Adduces main directions of design, problems in automation of researching of kinetics of complex chemical reactions. Shows computing architecture, interaction scheme of computing units, a method of increasing productivity. Describes logical model of storehouse of the data of studied chemical reactions, its interaction with the automated system.

Key Words: research, kinetics, program, database, numerical methods

³Institute of Petrochemistry and Catalysis RAS, Ufa city; DenisMaskov@mail.com

⁴chief researcher of laboratory of mathematical chemistry, Institute of Petrochemistry and Catalysis of RAS, Ufa; irekmars@mail.ru

УДК 517.9

Нейронные сети и карты Кохонена

© Р. Ф. Миникаев¹, З. Я. Якупов²

Аннотация. В работе проведено исследование карт Кохонена и выявлены процессы самоорганизации. Получены оптимальные параметры алгоритма самоорганизующихся карт для кластеризации сетевых соединений и построено приложение, реализующее данный алгоритм.

Ключевые слова: нейронные сети, карты Кохонена, векторное квантование.

1. Введение

Самоорганизующаяся карта (СОК) является новым, эффективным программным инструментом для визуализации многомерных данных. В своём основном варианте СОК создаёт граф подобия входных данных. Она преобразует нелинейные статистические соотношения между многомерными данными в простые геометрические связи между изображающими их точками на устройстве отображения низкой размерности, обычно в виде регулярной двумерной сетки узлов. Поскольку СОК осуществляет сжатие информации с сохранением в получаемом изображении наиболее важных топологических и/или метрических связей между первичными элементами данных, можно также считать, что с её помощью порождаются абстракции (обобщения) некоторого вида. Эти два характерных свойства СОК, визуализацию и обобщение, можно использовать различными способами в решении сложных задач таких, как анализ процессов, машинное восприятие, управление, передача информации. В той форме, в которой она существует в настоящее время, СОК была задумана Т. Кохоненом в 1982 г.

2. Инициализация

Изначально, самоорганизующаяся карта представляет собой сетку (прямоугольную или гексагональную) из узлов, соединённых между собой связями. Также определяется количество нейронов в сети.

Каждый из узлов описывается двумя векторами. Первый - вектор веса m_i , имеющий такую же размерность, что и входные данные. Вторым - координаты узла на карте, далее вектор r_i . Перед началом обучения карты необходимо проинициализировать весовые коэффициенты нейронов.

Случайная инициализация. Причина использования случайных начальных значений в приводимых демонстрационных примерах состояла в том, что алгоритмы СОК можно инициализировать с помощью произвольных значений кодирующих векторов $m_i(0)$. Другими словами, было показано, что начальные неупорядоченные векторы будут упорядочены, если процесс обучения достаточно длителен; в обычных приложениях

¹Студент, Казанский государственный технический университет имени А. Н. Туполева, г. Казань; minikaev@gmail.com.

²Доцент, Казанский государственный технический университет имени А. Н. Туполева, г. Казань; zumat@bk.ru.

это происходит за несколько сотен шагов. Это не означает, однако, что случайная инициализация обеспечивает наилучшее или наискорейшее обучение и что ее следует использовать на практике.

Линейная инициализация. Поскольку векторы $m_i(0)$ могут быть произвольными, можно предположить, что полезным будет любое упорядоченное начальное состояние, даже если значения, составляющие его, не обеспечивают адекватного представления для $p(x)$ - плотности распределения вероятностей. В методе, который с успехом использовался, для автокорреляционной матрицы, соответствующей вектору x , вначале определялись два собственных вектора с наибольшими собственными значениями. Затем в двумерном линейном подпространстве определялся прямоугольный массив (с прямоугольной или гексагональной регулярной решеткой), центр тяжести которого совпадал со средним значением входных параметров $x(t)$, два его измерения - с найденными двумя наибольшими собственными значениями автокорреляционной матрицы. Точки данного массива служили начальными значениями $m_i(0)$. Если требуется получить в СОК приблизительно равномерную пространственную решетку, то количества элементов в горизонтальном и вертикальном направлениях решетки должны быть соответственно пропорциональны двум наибольшим собственным значениям, о которых говорилось выше.

Так как теперь $m_i(0)$ уже упорядочены и задаваемая ими точечная плотность примерно приближает функцию $p(x)$, можно начинать обучение непосредственно с фазы сходимости. При этом для достижения состояния равновесия можно с самого начала задавать значения для $\alpha(t)$ значительно меньшими единицы и использовать функцию соседства, ширина которой близка к соответствующему значению этого параметра на завершающих итерациях процесса.

На каждом шаге обучения из исходного набора данных случайно выбирается один из векторов

$$x = \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n\}^T \in \mathbb{R}^n,$$

где $n \in \mathcal{N}$, а затем производится поиск наиболее похожего на него вектора коэффициентов нейронов. При этом выбирается нейрон-победитель, который наиболее похож на вектор входов, иными словами, определяется расстояние между векторами, которое обычно вычисляется в евклидовом пространстве. Если обозначим нейрон-победитель символом c , то получим:

$$\|x - m_c\| = \min \{\|x - m_i\|\}$$

или

$$c = \arg \min \{d(x, m_i)\},$$

т.е. c - номер элемента, для которого расстояние до x минимально. В случае, если таких победителей больше одного, то случайным образом выбирается единственный нейрон-победитель.

После того, как найден нейрон-победитель, производится корректировка весов нейросети. При этом вектор, описывающий нейрон-победитель, и векторы, описывающие его соседей в сетке, перемещаются в направлении входного вектора по формуле:

$$m_i(t+1) = m_i(t) + h_{ci}(t)[x(t) - m_i(t)],$$

где $h_{ci}(t)$ - функция соседства.

3. Процесс самоорганизации

Начать процесс самоорганизации, используя «широкую» функцию соседства, можно двумя способами. Во-первых, взяв большой радиус множества соседства $N_c(0)$. Во-вторых, среднеквадратичное отклонение функции h_{ci} может быть того же порядка, что и половина наибольшей протяженности массива. В обоих случаях обычно нет риска завершить процесс обучения в одной из «метастабильных» конфигураций карты (в которой средняя ожидаемая мера искажения или средняя ожидаемая ошибка квантования соответствует локальному минимуму вместо глобального). Однако, с инвариантной по времени функции соседства ситуация может оказаться совершенно другой, особенно если функция соседства будет «узкой».

В работе [1] проанализированы «метастабильные состояния» для случая одномерного массива. Здесь вначале функция соседства определяется как выпуклая на некотором множестве $I \equiv \{0, 1, 2, \dots, N\}$, если из условий

$$|s - q| > |s - r|$$

и

$$|s - q| > |r - q|$$

следует, что

$$[h(s, s) + h(s, q)] < [h(s, r) + h(r, q)]$$

для всех $s, r, q \in \mathcal{I}$. В противном случае функция соседства определялась как вогнутая.

Основной полученный результат состоит в том, что если функция соседства является выпуклой, то устойчивых состояний, отличных от упорядоченных, не существует. Если функция соседства вогнутая, существуют метастабильные состояния, которые могут резко замедлить процесс упорядочения. Если, однако, в начале процесса обучения функция соседства выпукла, примерно как функция Гаусса $h_{ci}(0)$ в своей средней части при большом среднеквадратическом отклонении, упорядочение может быть достигнуто почти наверняка; после завершения упорядочения функция соседства может быть сужена для более точной аппроксимации функции $p(x)$.

Условия упорядочения в общем случае будут наиболее строгими, если пространство входных сигналов имеет ту же размерность, что и решетка нейронов; на практике, однако, размерность пространства входных сигналов обычно много больше размерности решетки, что облегчает выполнение упорядочения.

Циклический процесс обучения, перебирающий входные данные, заканчивается по достижении картой допустимой (заранее заданной аналитиком) погрешности, или по совершении заданного количества итераций. Например, вычисление ошибки карты можно рассчитать как среднее арифметическое расстояний между наблюдениями и векторами весов соответствующего им нейрона - победителя:

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \|x_i - m_c\|,$$

где N - количество элементов набора входных данных.

Для визуализации структуры кластеров, полученных в результате обучения карты, применяется унифицированная матрица расстояний. Элементы матрицы определяют расстояние между весовыми коэффициентами каждого нейрона и его ближайшими соседями. Затем эти значения используются для определения цвета, которым узел будет

отрисован. При таком использовании узлам с большим расстоянием между ними и соседями соответствует чёрный цвет, а близлежащим узлам - белый.

Следует подчеркнуть, что нет никаких теоретических оснований, согласно которым рассматриваемый рекурсивный алгоритм основного варианта СОК должен определяться какой-то целевой функцией E , описывающей, например, среднее ожидаемое значение меры искажения. Есть только следующие факты:

1. Обычная оптимизация функции E по методу стохастической аппроксимации приводит к основному алгоритму СОК.

2. Эвристически полученный основной алгоритм СОК характеризует непараметрическую регрессию, что часто позволяет отразить важные и интересные топологические связи между кластерами первичных данных.

Чтобы показать, какую в действительности роль играет в рассматриваемом контексте формализм «функции энергии», требуется проделать более глубокий анализ среднего ожидаемого значения меры искажения [2].

Индекс c «победителя» представляет собой разрывную функцию от x и всех m_i . Значимость этого индекса можно увидеть более ясно, если интеграл E в формуле

$$E = \int ep(x)dx = \int \sum_{i \in L} h_{ci} d(x, m_i) p(x) dx,$$

при

$$d(x, m_i) = \|x - m_i\|^2$$

представить как сумму интегралов, взятых по тем областям X_i , для векторов x , для которых ближайшим эталонным вектором будет m_i (т. е. по фрагментам мозаики Вороного, см. рис. (3.1)):

$$E = \sum_i \int_{x \in X_j} \sum_k h_{ik} \|x - m_k\|^2 p(x) dx, \quad (3.1)$$

При вычислении истинного (глобального) градиента функции E по произвольному m_j необходимо принимать во внимание члены двух различных видов: для первого из них подынтегральное выражение будет варьируемым, а пределы интегрирования постоянны, для второго - подынтегральное выражение остается неизменным, но пределы интегрирования варьируются (вследствие изменения m_j). Обозначим эти слагаемые, соответственно, как G и H :

$$\nabla_{m_j} E = G + H. \quad (3.2)$$

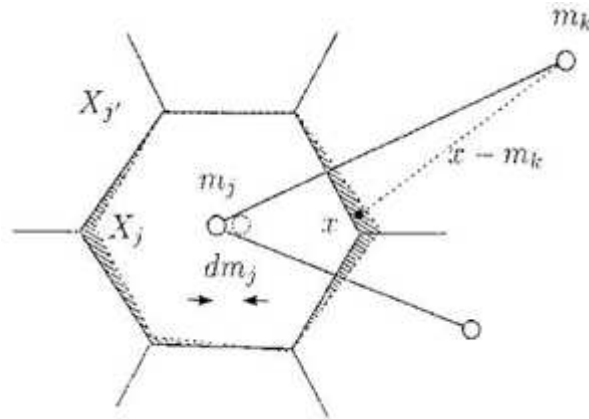
Не трудно показать, что

$$G = -2 \sum_i \int_{x \in X_j} h_{ij} (x - m_j) p(x) dx = -2 \int_{\cup_j X_j} h_{cj} (x - m_j) p(x) dx. \quad (3.3)$$

В классическом методе векторного квантования $H = 0$ вследствие того, что $h_{ck} = \delta_{ck}$. Тогда, при пересечении границы между X_i и X_j в мозаике Вороного, члены $\|x - m_i\|^2$ и $\|x - m_j\|^2$ остаются равными. Для общего случая функции h_{ck} вычисление H представляет собой весьма трудоемкую задачу, так как подынтегральные выражения сильно меняются при пересечении границ мозаики Вороного.

Для начала воспользуемся тем фактом, что при варьировании m_j сдвигаются только границы мозаики, выделяющие X_j .

Рассмотрим рис. (3.1), где дается схема выделения области X_j , а также сдвиг ее границ, вызванный отклонением dm_j . Первое изменение $\nabla_{m_j} E$ для расстояния $\|x - m_k\|^2$, вычисленного по топологической окрестности элемента m_j , получается интегрированием по заштрихованному участку (дифференциальному элементу гиперобъема). Поскольку все границы здесь представляют собой сегменты срединных плоскостей (гиперплоскостей) между соседними элементами m_i , представляется, что можно хотя бы приблизительно оценить своего рода «средний сдвиг».



Р и с у н о к 3.1

Пример граничного эффекта при варьировании m_j .

По существу, если бы вокруг m_j было так много соседей, что X_j можно было бы аппроксимировать гиперсферой, то при изменении m_j на величину dm_j окрестность X_j сохранила бы свою форму и сдвинулась на расстояние $(1/2)dm_j$. В общем же случае при произвольной размерности пространства значений x и произвольном расположении m_i форма X_j должна изменяться, однако упрощенная и осредненная аппроксимация состоит в том, что изменение формы не учитывается, по крайней мере, в первом приближении, а X_j только сдвигается на $(1/2)dm_j$. Еще одно допущение, позволяющее существенно упростить обсуждаемую задачу, состоит в том, чтобы считать функцию $p(x)$ постоянной на области X_j . Это допущение будет вполне справедливым в случае, когда для аппроксимации $p(x)$ используется значительное число элементов m_j . Если принять оба указанных упрощающих предположения, то вклад в H , получаемый за счет варьирования X_j , обозначаемый H_1 , будет приближенно равен разности двух интегралов: интеграла по деформированной области X_j и интеграла по недеформированной области X_j . Это равно интегралу от суммы

$$\sum h_{jk} \left\| x - \left(m_k - \frac{1}{2} dm_j \right) \right\|^2,$$

умноженной на $p(x)$, минус интеграл от суммы

$$\sum h_{jk} \|x - m_k\|^2,$$

умноженной на $p(x)$. Представляется, что опять получен случай, где каждый из элементов m_k изменяется на некоторую величину $-(1/2)dm_j$. Следовательно, данное различие может также быть выражено как сумма градиентов интеграла от суммы

$$\sum h_{jk} \left\| x - \left(m_k - \frac{1}{2} dm_j \right) \right\|^2,$$

умноженной на $p(x)$, найденных по каждому из m_k и умноженных на $-(1/2)dm_j$:

$$H_1 = -\frac{1}{2}(-2) \int \sum_{x \in X_j} \sum_{k \neq j} h_{ik}(x - m_k) p(x) dx = \int \sum_{x \in X_c} \sum_{k \neq c} h_{ck}(x - m_k) p(x) dx. \quad (3.4)$$

Случай $k = c$ в формуле (3.4) можно исключить по той причине, что это слагаемое соответствует основному алгоритму векторного квантования и его вклад, как показано в работе [3], равен здесь нулю.

Не следует забывать, что E представляет собой сумму по всем i , и поэтому второй главный вклад в H , обозначаемый H_2 , связан с интегралом по всем частным дифференциальным элементам гиперобъема (заштрихованные сегменты на рис. (3.1)), граничащим с $X_{j'}$, где j' - индекс любой области, граничащей с X_j . Подсчитать H_2 по-видимому еще сложнее, чем получить аппроксимацию для H_1 . Есть, однако, веские основания полагать, что в среднем

$$||H_2|| < ||H_1||,$$

поскольку каждая из областей интегрирования в H_2 есть лишь один сегмент дифференциала X_j , а величины $x - m_k$ различны в каждой из этих подобластей. При изучении порядка величины дополнительных коррекций представляется более интересным уделить основное внимание численному анализу слагаемого H_1 , которому, кроме всего прочего, можно дать также и наглядную интерпретацию.

Пытаясь вывести результаты, получаемые в рекурсивном пошаговом спуске в « E - ландшафте», можно заметить, что в выражении для G вектор x пробегает все пространство своих значений, а на величину градиента $\nabla_{m_j} E$ влияют все те области X_c , для которых элемент m_j есть топологический сосед в сети. Напротив, в H_1 интеграл берется только по X_j , тогда как подинтегральная функция содержит члены, зависящие от топологических соседей m_k для m_j . По аналогии с соотношениями [4] можно записать (пренебрегая членами, связанными с H_2):

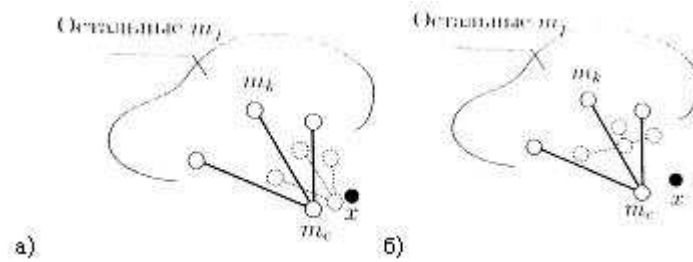
$$\begin{aligned} m_c(t+1) &= m_c(t) + \alpha(t) \left\{ h_{cc}[x(t) - m_c(t)] - \frac{1}{2} \sum_{k \neq c} h_{ck}[x(t) - m_k(t)] \right\}, \quad \top m_i(t+1) = \\ &= m_i(t) + \alpha(t) h_{ci}[x(t) - m_i(t)] \end{aligned} \quad (3.5)$$

для $i \neq c$. Напомним, что член

$$-\frac{1}{2} \sum_k h_{ck}[x(t) - m_k(t)]$$

в данном выражении был получен в предположении, что $p(x)$ сохраняет постоянное значение на каждом фрагменте мозаики Вороного. Для узлов, на краях которых мозаики соответствующие области X_i становятся бесконечными, такая аппроксимация уже не будет корректной. Поэтому здесь также появятся граничные эффекты, несколько отличающиеся от тех, что имели место в основном варианте СОК.

Прежде, чем перейти к изложению результатов численных экспериментов, дадим интерпретацию дополнительным членам, обусловленным интегралом H_1 .

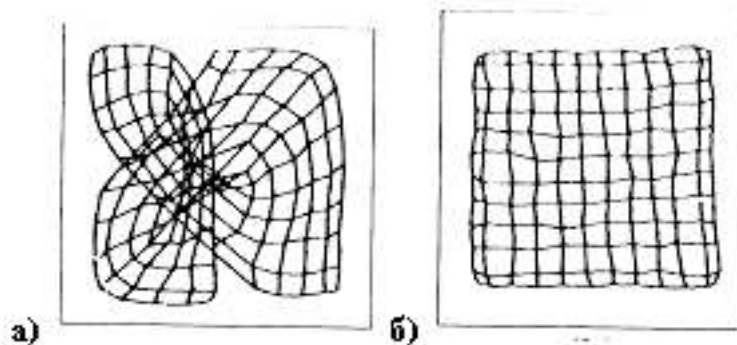


Р и с у н о к 3.2

Различия в выполняемых корректировках: (а) для базовой СОК, (б) для процесса, задаваемого формулами (3.5)

Рассмотрим рис. (3.2), иллюстрирующий особенности работы старого и нового алгоритма. Предположим, что на некотором шаге процесса обучения значение одного из векторов m_i получилось существенно отличающимся от значений остальных параметрических векторов. Когда вектор X окажется ближайшим именно к нему, в старом алгоритме полагается $m_i = m_c$ и его топологические соседи m_k должны быть сдвинуты по направлению к X . В новом алгоритме по направлению к X сдвигается только $m_k \neq m_c$, тогда как m_c перемещается в противоположном направлении, в сторону центра области соседства элемента m_k .

Численный эксперимент проводился с целью изучения свойств сходимости процесса, определяемого соотношениями (3.5). В этом эксперименте использовался квадратный массив узлов с двумерными векторами x и m_i . Применялись оба алгоритма, как старый, так и определяемый формулой (3.5), с одинаковыми начальными состояниями, значениями $\alpha(t)$ и используемой последовательностью случайных чисел. В качестве начальных векторов брались независимые случайные величины, а значения уменьшались линейно от 0.5 до 0. Ядро функции соседства h_{ck} было принято постоянным для всех узлов в пределах одного шага решетки от узла c в горизонтальном и вертикальном направлениях и $h_{ck} = 0$ в остальных случаях. (Следует напомнить, что в практических приложениях для ускорения сходимости ядра обычно определяются так, чтобы они «сжимались» во времени.) На рис. (3.3) для квадратной решетки показаны значения m_i после 8000 шагов процесса обучения. Функция $p(x)$ имеет постоянное значение внутри квадратной области, ограниченной рамкой, и нулевое значение вне ее. Из многочисленных экспериментов подобного рода (один из которых и показан на (3.3)) следуют два вывода.



Р и с у н о к 3.3

Двумерная карта после 8000 шагов: (а) основная СОК с небольшой областью схождения, (б) та же самая область соседства, но в результате использования алгоритма, определяемого соотношениями (3.5).

1. Новый алгоритм упорядочивает несколько быстрее и надежнее; после 8000 шагов (с узкими постоянными ядрами h_{ck}) ни одно из состояний, получаемых с помощью старого алгоритма, еще не было полностью упорядочено, тогда как для нового алгоритма около половины состояний уже стали упорядоченными.

2. Граничные эффекты в новом алгоритме выражены сильнее.

Частный случай. Если плотность распределения вероятностей $p(x)$ входных данных принимает дискретные значения, как это, например, имеет место в известной задаче коммивояжера, исходный алгоритм СОК может быть получен из средней ожидаемой меры искажения [5]. В свете проведенного выше обсуждения это вполне понятный результат, поскольку значения $p(x)$ на границах мозаики Вороного тогда равны нулю и дополнительный член H , обусловленный варьированием пределов интегрирования, исчезает.

4. Модификация определения понятия «победитель»

Доказано [6], [7], что если критерий отбора в определении «победителя» с модифицировать следующим образом

$$\sum_i h_{ci} \|x - m_i\|^2 = \min_j \left\{ \sum_j h_{ji} \|x - m_i\|^2 \right\}. \quad (4.1)$$

где h_{ci} - та же самая функция соседства, которая использовалась в процессе обучения, то средняя ожидаемая мера искажения становится функцией энергии или потенциала, минимизация которой может выполняться с помощью обычного метода градиентного спуска. Хотя это наблюдение и представляет определенный математический интерес, следующие факты несколько обесценивают его значение в нейросетевом моделировании.

1. В физиологическом толковании СОК функция соседства h_{ck} определяет только управляющее воздействие на синаптическую пластичность, но не прямое управление сетевой активностью в функции определения «победителя», как это подразумевается в выражении (4.1).

2. Величины h_{ji} , используемые выше, должны удовлетворять соотношению $\sum_j h_{ji} = 1$, в силу чего, в общем случае, $h_{ji} \neq h_{ij}$ при $i \neq j$.

В практических нейросетевых алгоритмах вычисление выражения (4.1) для нахождения «победителя» будет также более трудоемким по сравнению с простым подсчетом расстояний.

Несмотря на это, подобного рода теоретические построения полезны, поскольку позволяют пролить дополнительный свет на природу процессов СОК.

Целью работы является кластеризация сетевых пакетов, созданных программными закладками методом самоорганизующихся карт Кохонена. В качестве 9-тимерного входного вектора используется набор из IP получателя (4 числа); обратная зона DNS IP адреса получателя (3 цифры); электронная почта из WHOIS записи (2 цифры). В результате выполнения алгоритма получается кластеризация сетевой активности программных закладок.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Erwin E., Obermayer K., Schulten K. Self-organizing maps: Ordering, convergence properties and energy functions // Biological Cybernetics. - 1992. Vol. 67, - p. 47-55.

2. Kohonen T. Artificial Neural Network. - Amsterdam: North Holland, 1991. - Vol. 2, - p.981- 990.
3. Kohonen T. Things you havenot heard about the Self-Organizing Map // In Proc. IC-NN'93, Int.Conf. on Neural Networks. - 1993. - p. 1147-1156.
4. Кохонен Т. Самоорганизующиеся карты - М.: БИНОМ, Лаборатория знаний, 2008. - 655 с.
5. Ritter H., Martinetz T., Schulten K. Neural Computation and Self-Organizing Maps: An Introduction. Addison-Wesley, Reading, MA, 1992. - p. 350.
6. Luttrell S.P. Code vector density in topographic mappings. DRA, Malvern, 1992.
7. Heskes T.M., Kappen B. Error potential for self-organization // Int. Conf. on Neural Networks. - 1993. - Vol. 3, - p.1219-1223.

Neural Networks and Kohonon maps.

© R. F. Minikaev³, Z. Y. Yakupov⁴

Abstract. In the work research of Kohonen maps is analyzed and self-organizing processes are revealed. Optimal parameters of the algorithm of self-organizing maps for clustering network connections are received and the application realizing given algorithm is created.

Key Words: Neural Networks, Kohonen maps, vector quantization.

³Student, Kazan State Technical University after A. N. Tupolev, Kazan; minikaev@gmail.com.

⁴Associate professor, Kazan State Technical University after A. N. Tupolev, Kazan; zymat@bk.ru.

УДК 517.977.5

Математическое моделирование технологической схемы процесса сополимеризации.

© Э. Н. Мифтахов¹, Л. И. Насырова²

Аннотация. В работе построена математическая модель кинетической схемы процесса сополимеризации. При моделировании используется метод моментов. При переходе к непрерывным промышленным реакторным системам учитывается влияние гидродинамического и энергетического уровней.

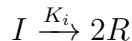
Ключевые слова: сополимеризация, кинетическая схема, метод моментов.

1. Кинетическая схема сополимеризации бутадиена со стиролом

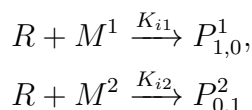
При построении модели сополимеризации будем исходить из того, что реакционная способность активного центра на конце растущей цепи определяется лишь природой концевой звена[1]. Поэтому будем рассматривать по четыре элементарных реакции роста и обрыва цепи с участием двух мономеров M^1 и M^2 и двух типов растущих цепей, отличающихся природой концевой звена.

Кинетическая схема сополимеризации бутадиена со стиролом включает в себя следующие стадии:

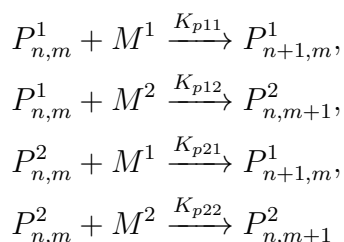
1. Распад инициатора



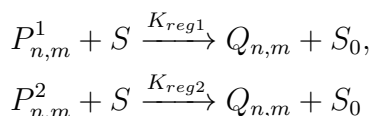
2. Иницирование активных центров



3. Рост цепи



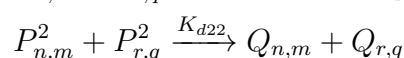
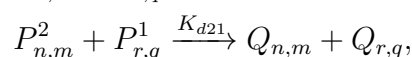
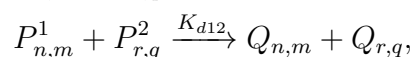
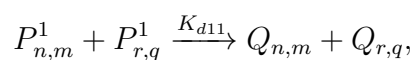
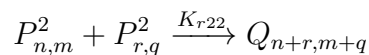
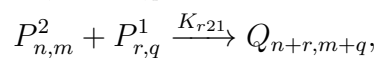
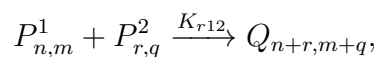
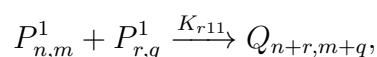
4. Передача цепи



¹Аспирант Стерлитамакской государственной педагогической академии им.Зайнаб Бишиевой, г. Стерлитамак; promif@mail.ru.

²Аспирант Стерлитамакской государственной педагогической академии им.Зайнаб Бишиевой, г. Стерлитамак; prikladniki@rambler.ru

5. Обрыв цепи (рекомбинация и диспропорционирование)



где M_1, M_2 - мономеры первого и второго типа соответственно; $P_{m,n}$ и $Q_{m,n}$ - соответственно, активные и неактивные цепи полимера длиной $m + n$, состоящей из m звеньев мономера M^1 и n звеньев мономера M^2 ; $k_i, k_p, k_{reg}, k_d, k_r$ - константы элементарных стадий иницирования, роста, передачи цепи, диспропорционирования и рекомбинации соответственно.

2. Математическая модель

Составляя матрицу стехиометрических коэффициентов и умножая ее на вектор-столбец скоростей реакции получим бесконечную систему дифференциальных уравнений (2.1).

Если ограничить длину цепи m или n величиной R , то общее число уравнений в системе (2.1), в лучшем случае составит $3R^2$. Обычно значение R колеблется от 10^3 до 10^5 , так что процесс описывается практически бесконечной системой нелинейных дифференциальных уравнений.

Статическая теория полимеризации исходит из предположения о возможности анализа ММР по средним молекулярным массам M_n , M_w и M_z . Важной характеристикой ММР являются различные соотношения средних молекулярных масс. Анализируя эти соотношения можно получить данные о механизме полимеризации и его особенностях. Для анализа вводятся понятия моментов, обычно применяемые в статистике и теории вероятностей для оценки распределения случайных величин[2].

$$\left\{ \begin{aligned}
& \frac{dP_{0,m}^1}{dt} = -k_{p11}M^1P_{0,m}^1 - k_{p12}M^2P_{0,m}^1 - K_{reg1}SP_{0,m}^1 - k_{d11}P_{0,m}^1 \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^1 - \\
& -k_{d12}P_{0,m}^1 \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^2 - k_{r11}P_{0,m}^1 \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^1 - k_{r12}P_{0,m}^1 \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^2, \quad m \geq 0, \\
& \frac{dP_{0,m}^2}{dt} = -k_{p21}M^1P_{0,m}^2 - k_{p22}M^2P_{0,m}^2 + k_{p12}M^2P_{0,m-1}^1 + K_{p22}M^2P_{0,m-1}^2 - \\
& -K_{reg2}SP_{0,m}^2 - k_{d21}P_{0,m}^2 \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^1 - k_{d22}P_{0,m}^2 \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^2 - k_{r21}P_{0,m}^2 \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^1 - \\
& -k_{r22}P_{0,m}^2 \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^2, \quad m \geq 1, \\
& \frac{dP_{n,0}^1}{dt} = -k_{p11}M^1P_{n,0}^1 - k_{p12}M^2P_{n,0}^1 + K_{p11}M^1P_{n-1,0}^1 + k_{p21}M^1P_{n-1,0}^2 - \\
& -K_{reg1}SP_{n,0}^1 - k_{d11}P_{n,0}^1 \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^1 - k_{d12}P_{n,0}^1 \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^2 - k_{r11}P_{n,0}^1 \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^1 - \\
& -k_{r12}P_{n,0}^1 \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^2, \quad n \geq 1, \\
& \frac{dP_{n,0}^2}{dt} = -k_{p21}M^1P_{n,0}^2 - k_{p22}M^2P_{n,0}^2 - K_{reg2}SP_{n,0}^2 - k_{d21}P_{n,0}^2 \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^1 - \\
& -k_{d22}P_{n,0}^2 \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^2 - k_{r21}P_{n,0}^2 \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^1 - k_{r22}P_{n,0}^2 \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^2, \\
& n \geq 0, \\
& \frac{dP_{n,m}^1}{dt} = -k_{p11}M^1P_{n,m}^1 + k_{p11}M^1P_{n-1,m}^1 - k_{p12}M^2P_{n,m}^1 + K_{p21}M^1P_{n-1,m}^2 - \\
& -K_{reg1}SP_{n,m}^1 - k_{d11}P_{n,m}^1 \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^1 - k_{d12}P_{n,m}^1 \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^2 - k_{r11}P_{n,m}^1 \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^1 - \\
& -k_{r12}P_{n,m}^1 \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^2, \quad n, m \geq 1 \\
& \frac{dP_{n,m}^2}{dt} = -k_{p21}M^1P_{n,m}^2 + k_{p22}M^2P_{n,m-1}^2 + K_{p12}M^2P_{n,m-1}^1 - k_{p22}M^2P_{n,m}^2 - \\
& -K_{reg2}SP_{n,m}^2 - k_{d21}P_{n,m}^2 \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^1 - k_{d22}P_{n,m}^2 \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^2 - k_{r21}P_{n,m}^2 \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^1 - \\
& -k_{r22}P_{n,m}^2 \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^2, \quad n, m \geq 1 \\
& \frac{dQ_{n,m}}{dt} = k_{d11}P_{n,m}^1 \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^1 + K_{d12}P_{n,m}^1 \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^2 + K_{d21}P_{n,m}^2 \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^1 + \\
& + K_{d22}P_{n,m}^2 \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^2 + \frac{k_{r11}}{2}P_{n,m}^1 \sum_{r=0}^n \sum_{q=0}^m P_{n-r,m-q}^1 + \frac{k_{r12}}{2}P_{n,m}^1 \sum_{r=0}^n \sum_{q=0}^m P_{n-r,m-q}^2 + \\
& + \frac{k_{r21}}{2}P_{n,m}^2 \sum_{r=0}^n \sum_{q=0}^m P_{n-r,m-q}^1 + \frac{k_{r22}}{2}P_{n,m}^2 \sum_{r=0}^n \sum_{q=0}^m P_{n-r,m-q}^2 + k_{reg1}SP_{n,m}^1 + k_{reg2}SP_{n,m}^2, \\
& n, m \geq 1.
\end{aligned} \right. \quad (2.1)$$

Моменты молекулярномассового распределения неактивного и активных сополимеров

будем вычислять по формуле[3]:

$$\begin{aligned}\psi_k^Q &= \sum_{n=0}^{+\infty} \sum_{m=0}^{+\infty} (nM^1 + mM^2)^k Q_{n,m}, \\ \psi_k^{M^1} &= \sum_{n=0}^{+\infty} \sum_{m=0}^{+\infty} (nM^1 + mM^2)^k P_{n,m}^1, \\ \psi_k^{M^2} &= \sum_{n=0}^{+\infty} \sum_{m=0}^{+\infty} (nM^1 + mM^2)^k P_{n,m}^2,\end{aligned}\quad (2.2)$$

где $k = 0, 1, \dots, \infty$.

Вычисление среднечисловой и среднемассовой молекулярной массы неактивного сополимера будет производиться по следующим соотношениям:

$$\begin{aligned}M_n^Q &= \frac{\psi_1^Q}{\psi_0^Q}, \\ M_w^Q &= \frac{\psi_2^Q}{\psi_1^Q}.\end{aligned}\quad (2.3)$$

Для нахождения распределения «растущего» полимера используются производящие функции[3]:

$$\begin{aligned}G &= \sum_{n=0}^{+\infty} \sum_{m=0}^{+\infty} u_1^n u_2^m P_{n,m}^1, \\ F &= \sum_{n=0}^{+\infty} \sum_{m=0}^{+\infty} u_1^n u_2^m P_{n,m}^2.\end{aligned}\quad (2.4)$$

Для вычисления моментов молекулярномассового распределения используются производящие функции вида:

$$\begin{aligned}G(s, u) &= \sum_{n=0}^{+\infty} \sum_{m=0}^{+\infty} s^{n+m} u^{nw_a + mw_b} P_{n,m}^1, \\ F(s, u) &= \sum_{n=0}^{+\infty} \sum_{m=0}^{+\infty} s^{n+m} u^{nw_a + mw_b} P_{n,m}^2,\end{aligned}\quad (2.5)$$

полученные из (2.4) подстановкой $u_1 = su^{w_a}$ и $u_2 = su^{w_b}$ соответственно.

При переходе к непрерывным промышленным реакторным системам необходимо учитывать влияние гидродинамического и энергетического уровней[4].

В случае полной сегрегации ($J = 1$) уравнение на выходе k -го реактора будет иметь вид:

$$m_j^{(k)}(t) = \int_0^t m_j^*(\tau) \psi^{(k)}(t - \tau) d\tau, \quad (2.6)$$

где $\psi(t)$ - известная функция распределения времени пребывания. В случае идеального смешения для каскада из k реакторов (при равных объемах) имеет вид:

$$\psi^{(k)}(t) = \frac{t^{k-1} e^{-\frac{t}{\theta}}}{(k-1)! \theta^k}. \quad (2.7)$$

Модель процесса полимеризации в этом случае запишется следующим образом:

$$\begin{cases} \bar{Y}^{(k)}(t) = \int_0^t \bar{Y}^*(\tau) \psi^{(k)}(t - \tau) d\tau, \\ \frac{d\bar{Y}^*}{dt} = \bar{R}_y, \\ \bar{Y}^*(0) = \bar{Y}_{00}. \end{cases} \quad (2.8)$$

Если принять во внимание влияние температурного режима, модель реактора непрерывного действия примет вид:

$$\begin{cases} \theta \frac{dT^{(k)}}{dt} = T^{(k-1)} - T^{(k)} + \theta q_R^*(\bar{Y}, T) - K_{\text{хл}}^* (T^{(k)} - T_{\text{хл}}^{\text{вх}}), \\ \theta \frac{d\bar{Y}^{(k)}}{dt} = \bar{Y}^{(k-1)} - \bar{Y}^{(k)} + \theta \bar{R}(\bar{Y}, T), \end{cases} \quad (2.9)$$

где

$$\theta q_R^*(T) = \frac{\theta}{C_p} \sum_{i=1}^s (-\Delta H_i) r_i,$$

$$Q_{\text{хл}} = K_{\text{хл}}^* (T - T_{\text{хл}}^{\text{вх}}) \quad - \text{теплоотвод за счет системы охлаждения},$$

$$\sum_{i=1}^s (-\Delta H_i) r_i = [(-\Delta H_i) r_i + (-\Delta H_p) r_p + (-\Delta H_{td}) r_{td}],$$

где r_i , r_p , r_{td} - суммарные скорости реакции на стадиях инициирования, роста и обрыва цепи.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Семчиков Ю.Д. Высокомолекулярные соединения. – М.: Издательский центр “Академия”, 2003. – 368 с.
2. Подвальный С.Л. Моделирование промышленных процессов полимеризации. – М.: Химия, 1979. – 256 с.
3. Ray W.H., Douglas T.I., Godsalve E.W. Molecular weight distribution in copolymer systems. II Free radical copolymerization. // Macromolecules, – 1971. – № 4(2). – P. 166–174.
4. Кафаров В.В., Дорохов И.Н., Дранишников Л.В. Системный анализ процессов химической технологии. – М.: Наука, 1991. – 350 с.

Mathematical modeling of technological schemes of copolymerization.

© E. N. Miftakhov³ L. I. Nasyrova⁴

Abstract. In this paper, a mathematical model of the kinetic scheme of the copolymerization. When modeling using moments method. In the transition to a continuous industrial reactor systems consider the effect of hydrodynamic and energy levels.

Key Words: copolymerization, kinetic scheme, method of moments.

³Post graduate student, Sterlitamak Teacher Training Academy after Z. Biyisheva, Sterlitamak; promif@mail.ru.

⁴Post graduate student, Sterlitamak Teacher Training Academy after Z. Biyisheva, Sterlitamak; prikladniki@rambler.ru

УДК 531.01

Построение алгоритма синтеза управления с насыщением в задаче слежения для колесного мобильного робота

© Д. Ю. Моторина¹

Аннотация. В работе рассматривается задача слежения для мобильного роликонесущего робота с неизвестной матрицей инерции и с запаздыванием в структуре обратной связи. С применением метода сравнения с вектор-функцией Ляпунова в виде векторной нормы обосновывается непрерывный закон управления. Для нахождения параметров управления предлагается алгоритм, основанный на вычислении операторных и логарифмических матричных норм. Представлены результаты реализации алгоритма и численного моделирования движения робота.

Ключевые слова: мобильный колесный робот, управление с насыщением, метод сравнения, запаздывание в структуре обратной связи.

1. Введение

В последнее время задача управления мобильными колесными роботами приобрела важное значение. В представленной работе рассматривается задача слежения для мобильного робота с тремя роликонесущими колесами типа «omni-directional» [1]. При этом предполагается, что матрица инерции системы неизвестна, а в структуре управления присутствует переменное запаздывание.

Вопросам исследования динамики и построения управления колесными системами посвящены известные работы [1]–[5]. В работе [2] предлагается использовать релейное адаптивное управление движением робота. В работе [3] рассматривается задача слежения для мобильного роликонесущего робота, дается обоснование релейного закона управления.

Синтез релейных управлений является перспективным подходом в решении задач управления колесными роботами. Преимущества такого подхода обусловлены универсальностью релейных управлений и возможностью использования для целого класса систем и траекторий. Недостатком релейных управлений является возникновение значительных автоколебаний в системе.

В данной работе для уменьшения колебаний предлагается использовать управление с насыщением следующего вида

$$u = \begin{cases} \operatorname{sign}(x), & |x| \geq \gamma, \\ \frac{x}{\gamma}, & |x| < \gamma. \end{cases}$$

Это позволит снизить нагрузку на устройства и повысить эффективность управления.

Применяемый подход основан на использовании метода сравнения с вектор-функцией Ляпунова в виде векторной нормы и оценке операторных и логарифмических норм матриц, входящих в уравнение движения системы [6]. Данный метод позволяет оценить

¹Аспирант кафедры информационной безопасности и теории управления, Ульяновский государственный университет, г. Ульяновск; motorina.dyu@gmail.com.

максимальную величину запаздывания, погрешность слежения и определить область начальных отклонений.

На основе предлагаемого подхода разработан алгоритм нахождения параметров управления. Данный алгоритм реализован с применением численных методов и математического пакета Mathcad. Результаты численного моделирования движения робота подтверждают эффективность предлагаемого метода и демонстрируют преимущества использования управления с насыщением.

2. Задача слежения для мобильного робота с роликонесущими колесами

Рассмотрим задачу слежения для мобильного робота с роликонесущими колесами. Робот состоит из платформы, перемещающейся по горизонтальной поверхности, и трех колес, на которых закреплены ролики. Ось вращения каждого ролика лежит в плоскости соответствующего колеса и направлена по касательной к его ободу. При наличии подобных колес платформа может двигаться в любом направлении с любой ориентацией. Движение робота происходит без проскальзывания под действием моментов, развиваемых тремя независимыми электродвигателями постоянного тока.

Движение робота описывается следующими уравнениями [7]

$$(\hat{H} + \Delta H) \ddot{q} + F(\dot{q}) = P(\psi)u(t - h(t)), \quad (2.1)$$

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} m & 0 & 0 \\ 0 & m & 0 \\ 0 & 0 & I_s \end{pmatrix}, \quad \Delta H = \begin{pmatrix} \Delta m & 0 & 0 \\ 0 & \Delta m & 0 \\ 0 & 0 & \Delta I_s \end{pmatrix}, \quad F(q) = \begin{pmatrix} n\dot{\xi} + m_d\dot{\eta}\dot{\psi} \\ n\dot{\eta} - m_d\dot{\xi}\dot{\psi} \\ 2a^2n\dot{\psi} \end{pmatrix},$$

$$P(\psi) = \begin{pmatrix} \sin(\psi) & \sin\left(\psi + \frac{2\pi}{3}\right) & \sin\left(\psi + \frac{4\pi}{3}\right) \\ -\cos(\psi) & -\cos\left(\psi + \frac{2\pi}{3}\right) & -\cos\left(\psi + \frac{4\pi}{3}\right) \\ -a & -a & -a \end{pmatrix},$$

где $q = (\xi, \eta, \psi)^T$, ξ и η – координаты центра масс платформы в неподвижной декартовой системе координат $O\xi\eta\zeta$, ψ – угол поворота платформы вокруг вертикали, отсчитываемой от оси $O\xi$, $\hat{H}$ – известная матрица инерции системы, ΔH – неизвестная матрица инерции системы, $u = (u_1, u_2, u_3)^T$ – управляющие напряжения, подаваемые на электродвигатели постоянного тока, $h(t)$ – ограниченная непрерывная функция запаздывания в управлении, $0 \leq h(t) \leq h_0 = \text{const}$, a – расстояние от центра масс платформы до центра каждого колеса, m , m_d , I_s – массово-инерционные характеристики робота, n – коэффициент, зависящий от параметров двигателей и характеризующий момент противоэлектродвижущей силы.

Поставим задачу отслеживания заданной траектории $q^*(t)$. Пусть $q(t)$ – некоторое решение системы (2.1) с начальной функцией $\varphi(s)$, удовлетворяющей условию

$$\max \left\{ \max_{-h_0 \leq s \leq 0} |\varphi(s) - q^*(s)|, \max_{-h_0 \leq s \leq 0} |\varphi(s) - q^*(s) + C^{-1}(\dot{\varphi}(s) - \dot{q}^*(s))| \right\} < \delta. \quad (2.2)$$

Необходимо построить управление $u(t - h(t))$, принадлежащее некоторому классу, при котором все решения $q(t)$ системы (2.1) с начальным условием (2.2) будут удовлетворять неравенству

$$|q(t) - q^*(t)| < \varepsilon, \quad \forall t \geq 0. \quad (2.3)$$

Величина ε зависит от значения δ и называется ошибкой слежения.

Управление в системе (2.1) будем искать в виде

$$u(t-h(t)) = -kP^{-1}(\psi^*(t))\hat{H}Csat[q(t-h(t)) - q^*(t-h(t)) + C^{-1}(\dot{q}(t-h(t)) - \dot{q}^*(t-h(t)))] , \quad (2.4)$$

где $C \in R^{3 \times 3}$ - постоянная невырожденная матрица, k - константа, которую необходимо определить. Вектор-функция $sat(z) = (sat(z_1), sat(z_2), sat(z_3))^T$ имеет следующие компоненты:

$$sat(z_i) = \begin{cases} sign(z_i), & |z_i| \geq \gamma, \\ \frac{z_i}{\gamma}, & |z_i| < \gamma, \end{cases} \quad (2.5)$$

где $0 < \gamma = const$.

Запишем уравнение (2.1) в следующем виде:

$$\hat{H}\ddot{q} + F(\dot{q}) = R(\dot{q}) + P(\psi)u(t-h(t)) - \Delta H H^{-1} P(\psi)u(t-h(t)), \quad (2.6)$$

где $H = \hat{H} + \Delta H$, $R(\dot{q}) = \Delta H H^{-1} F(\dot{q})$.

Введем отклонения $x = q - q^*(t)$, $\dot{x} = \dot{q} - \dot{q}^*(t)$ и линеаризуем систему в окрестности точки $(x = 0, \dot{x} = 0)$. Тогда система уравнений в отклонениях примет следующий вид:

$$\ddot{x} + A(t)\dot{x} = \hat{H}^{-1}P_1(t, x_3)u(t-h(t)) + S(t) + G(\dot{x}) + R_1(t, \dot{x}) - \hat{H}^{-1}\Delta H H^{-1}P_1(t, x_3)u(t-h(t)), \quad (2.7)$$

где $S(t) = -\hat{H}^{-1}F(\dot{q}^*(t)) - \ddot{q}^*(t)$, $P_1(t, x_3) = P(x_3 + \psi^*(t))$, $R_1(t, \dot{x}) = \hat{H}^{-1}R(\dot{x} + \dot{q}^*(t))$,

$$A(t) = \begin{pmatrix} \frac{n}{m} & \frac{m_d\psi^*(t)}{m} & \frac{m_d\eta^*(t)}{m} \\ -\frac{m_d\psi^*(t)}{m} & \frac{n}{m} & -\frac{m_d\xi^*(t)}{m} \\ 0 & 0 & \frac{m}{2a^2n} \\ & & I_s \end{pmatrix}, \quad G(\dot{x}) = \begin{pmatrix} -\frac{m_d\dot{x}_2\dot{x}_3}{m} \\ \frac{m_d\dot{x}_1\dot{x}_3}{m} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Сделаем в системе (2.7) замену переменных $y = x$, $z = x + C^{-1}\dot{x}$, где C — матрица, входящая в структуру управления (2.4). Получим следующую систему:

$$\begin{cases} \dot{y} = -Cy + Cz, \\ \dot{z} = (-C + C^{-1}A(t)C)y + (C - C^{-1}A(t)C)z + C^{-1}S(t) + C^{-1}G_1(y, z) + \\ + C^{-1}R_2(t, y, z) + kC^{-1}\hat{H}^{-1}\Delta H H^{-1}P_1(t, y_3)P^{-1}(\psi^*(t))\hat{H}Csat(z(t-h(t))) - \\ - kC^{-1}\hat{H}^{-1}P_1(t, y_3)P^{-1}(\psi^*(t))\hat{H}Csat(z(t-h(t))), \end{cases} \quad (2.8)$$

где $G_1(y, z) = G(-Cy + Cz)$, $R_2(t, y, z) = R_1(t, -Cy + Cz)$.

Выберем в качестве нормы в пространстве R^3 кубическую вектрную норму $|x| = \max_{1 \leq i \leq 3} |x_i|$. Тогда для любой матрицы M размерности 3×3 можно определить операторную норму $\|M\|$ и логарифмическую норму $lgn \|M\|$. Эти матричные нормы

подчинены выбранной векторной норме и в случае кубической нормы вычисляются следующим образом:

$$\|M\| = \max_{1 \leq i \leq 3} \sum_{j=1}^3 |M_{ij}|, \quad \lg n \|M\| = \max_{1 \leq i \leq 3} \left(M_{ii} + \sum_{j \neq i} |M_{ij}| \right).$$

Пусть имеется вектор-функция Ляпунова $V = (V_1, V_2)^T$ с компонентами в виде кубической векторной нормы: $V_1 = |y|$, $V_2 = c|z|$, где $c = -\frac{\|C\|}{\lg n \| -C \|} = \text{const} > 0$.

Правосторонние производные $\dot{V}_1$ и $\dot{V}_2$ в силу системы (2.8) удовлетворяют следующим дифференциальным неравенствам:

$$\begin{cases} \dot{V}_1 = \lg n \| -C \| V_1 - \lg n \| -C \| V_2, \\ \dot{V}_2 = c \| C - C^{-1}A(t)C \| V_1 + \lg n \| C - C^{-1}A(t)C \| V_2 + c |C^{-1}S(t)| + c |C^{-1}G_1(y, z)| + \\ + c |C^{-1}R_2(t, y, z)| + c \left\| kC^{-1}\hat{H}^{-1}\Delta HH^{-1}P_1(t, y_3)P^{-1}(\psi^*(t))\hat{H}C \right\| + \\ + c \lg n \left\| -kC^{-1}\hat{H}^{-1}P_1(t, y_3)P^{-1}(\psi^*(t))\hat{H}C \right\|. \end{cases} \quad (2.9)$$

Введем функцию $\bar{V}(t) = \max \{V_1(y(t), z(t)), V_2(y(t), z(t))\}$, где $(y(t), z(t))$ — решение системы (2.8). Управление (2.4) будет обеспечивать отслеживание заданной траектории $q^*(t)$ с погрешностью ε , если на всех решениях системы (2.8) с начальным условием $\max_{-h_0 \leq s \leq 0} \{|y(s)|, |z(s)|\} < \delta$ функция $\bar{V}(t)$ удовлетворяет неравенству

$$\bar{V}(t) < \varepsilon, \quad \forall t \geq 0. \quad (2.10)$$

Условия, при которых выполняется неравенство (2.10), сформулированы в следующей теореме.

Т е о р е м а 2.1. Пусть управление в системе (2.1) имеет вид (2.4), и найдутся такие положительные постоянные ε , a , b и N , что:

1. Число γ удовлетворяет неравенству $\gamma < \varepsilon$.
2. Матрица C такова, что выполняется неравенство $\lg n \| -C \| < 0$.
3. Матрицы $A(t)$, $B(t)$, $P(x_3)$, векторы $S(t)$, $G(y)$, $R(y)$ и число k удовлетворяют условию: для всех $t \geq 0$ и $x, y \in R^3$, таких, что $|x| < \varepsilon$, $|y| < (\|C\| - \lg n \| -C \|)\varepsilon$, справедливы неравенства

$$\begin{aligned} & \lg n \| C - C^{-1}A(t)C \| \leq b, \quad |C^{-1}G(y)| \leq N |y|^2, \\ & \| C - C^{-1}A(t)C \| \varepsilon + |C^{-1}S(t)| + N (\|C\| - \lg n \| -C \|^2 \varepsilon^2 + |C^{-1}R_1(t, y)| + \\ & + \left\| kC^{-1}\hat{H}^{-1}\Delta HH^{-1}P_1(t, x_3)P^{-1}(\psi^*(t))\hat{H}C \right\| + \left\| kC^{-1}\hat{H}^{-1}P_1(t, x_3)P^{-1}(\psi^*(t))\hat{H}C \right\| \leq a, \\ & \left[\| C - C^{-1}A(t)C \| + \frac{1}{c} \lg n \| C - C^{-1}A(t)C \| \right] \varepsilon + |C^{-1}S(t)| + N (\|C\| - \lg n \| -C \|^2 \varepsilon^2 + \\ & + |C^{-1}R_1(t, y)| + \left\| kC^{-1}\hat{H}^{-1}\Delta HH^{-1}P_1(t, x_3)P^{-1}(\psi^*(t))\hat{H}C \right\| + \\ & + \lg n \left\| -kC^{-1}\hat{H}^{-1}P_1(t, x_3)P^{-1}(\psi^*(t))\hat{H}C \right\| \leq 0. \end{aligned}$$

4. Начальная функция $\varphi : [-h_0, 0] \rightarrow R^3$ удовлетворяет неравенству (2.2), где число δ таково, что $0 < c\delta < \varepsilon$.
5. Максимальная величина запаздывания h_0 удовлетворяет неравенству

$$h_0 < \frac{1}{b} \ln \frac{b\varepsilon + ac}{c(a + b\gamma)}.$$

Тогда решение системы 2.1 отслеживает траекторию $q^*(t)$ посредством управления (2.4) с погрешностью слежения, не превышающей ε .

3. Алгоритм построения управления

Рассмотрим, как применяется теорема 2.1. для нахождения параметров управления. Пусть известны параметры системы, а также величина δ , задающая область начальных отклонений, и величина γ в управлении (2.4). Для отслеживаемой траектории $q^*(t)$ необходимо найти следующие параметры управления: матрицу C и коэффициент k , а также оценить максимальную величину запаздывания h_0 и погрешность слежения ε .

В качестве матрицы C удобно взять диагональную матрицу $C = \{c_{ij}\}_{i,j=1}^3$, где $c_{ij} = 0$ при $i \neq j$ и $c_{ii} = c_i = \text{const} > 0$.

Параметры управления можно найти по следующему алгоритму:

1. Найти положительные постоянные s_i^0 , $1 \leq i \leq 3$, для которых при всех $t \geq 0$ выполняются неравенства:

$$|S_i(t)| < s_i^0, \quad 1 \leq i \leq 3.$$

Параметры c_i подобрать так, чтобы выполнялось соотношение

$$\frac{s_1^0}{c_1} = \frac{s_2^0}{c_2} = \frac{s_3^0}{c_3}.$$

2. Зафиксировать число $\varepsilon > \max\{c\delta, \gamma\}$, характеризующее допустимую ошибку слежения для заданной траектории.
3. Найти оценки для следующих норм:

$$\begin{aligned} \lg n \|C - C^{-1}A(t)C\| &\leq b, \quad \|C - C^{-1}A(t)C\| \leq b_1 \\ |C^{-1}S(t)| &\leq s_0, \quad |C^{-1}R_1(t, y)| \leq r_0, \quad |C^{-1}G(y)| \leq N|y|^2, \\ \|C^{-1}\hat{H}^{-1}P_1(t, x_3)P^{-1}(\psi^*(t))\hat{H}C\| &\leq a_1, \quad \lg n \left\| -C^{-1}\hat{H}^{-1}P_1(t, x_3)P^{-1}(\psi^*(t))\hat{H}C \right\| \leq -a_2, \\ \|C^{-1}\hat{H}^{-1}\Delta HH^{-1}P_1(t, x_3)P^{-1}(\psi^*(t))\hat{H}C\| &\leq a_3. \end{aligned}$$

4. Найти коэффициент k по формуле

$$k = \frac{(b + cb_1)\varepsilon + c(s_0 + r_0 + N(\|C\| - \lg n \| -C\|)^2 \varepsilon^2)}{c(a_2 - a_3)}.$$

5. Найти максимальную величину запаздывания h_0 , используя следующее соотношение:

$$a = k(a_1 + a_3) + s_0 + r_0 + b_1\varepsilon + N(\|C\| - \lg n \| -C\|)^2 \varepsilon^2.$$

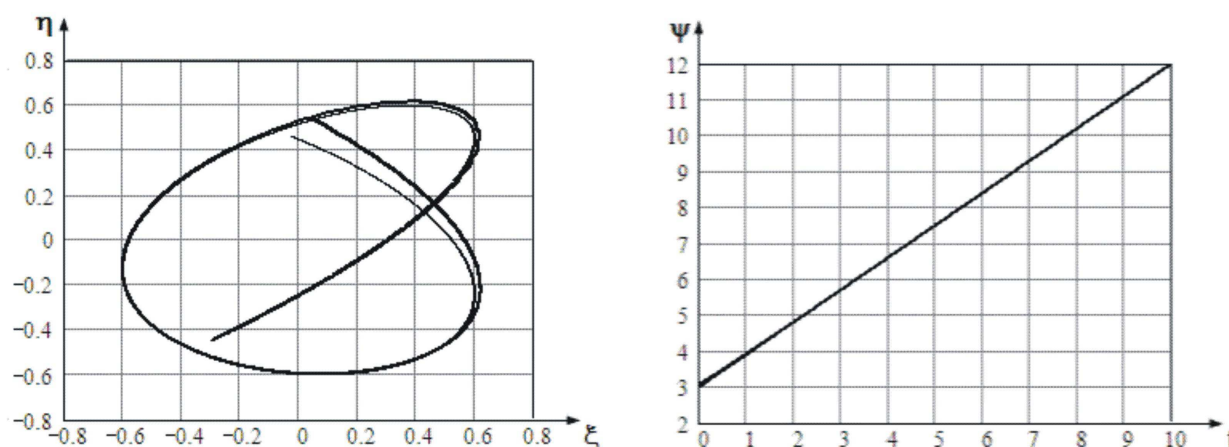
4. Реализация алгоритма и численное моделирование

Пусть параметры системы имеют следующие значения: $m = 23,101$ кг, $m_d = 6,601$ кг, $I_s = 9,486$ кг·м², $n = 1,78$ Н·с/м, $|\Delta m| \leq 5$ кг, $|\Delta I_s| \leq 2$ кг·м².

Отслеживаемая траектория имеет вид: $\xi^*(t) = 0,6 \cos t$, $\eta^*(t) = 0,6 \sin(0,8t + 2,3)$, $\psi^*(t) = 0,9t + 3$.

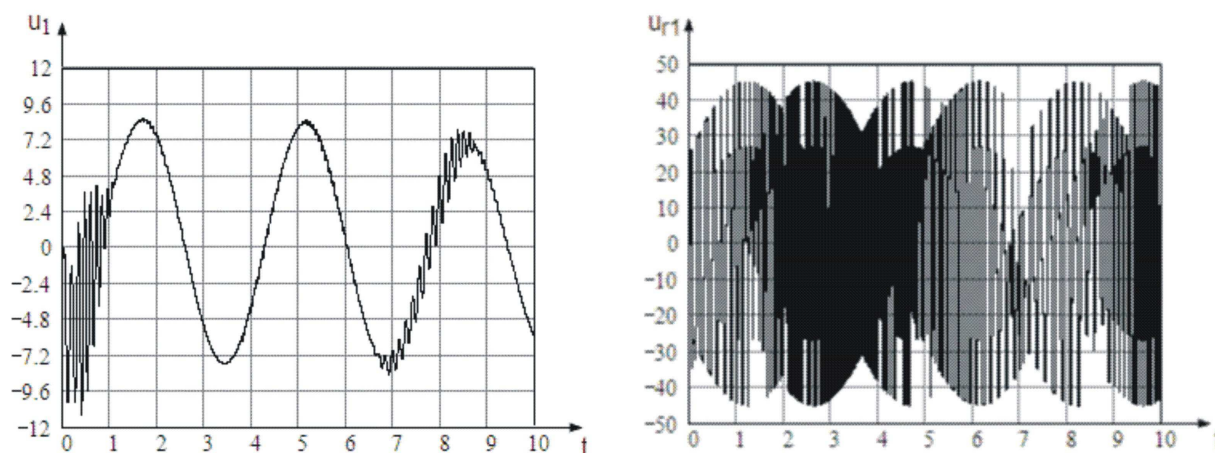
Численное моделирование дает следующие значения параметров управления: $c_1 = 1,3$, $c_2 = 0,97$, $c_3 = 1$, $\gamma = 0,04$, $k = -1,423$. Максимальная величина запаздывания $h_0 = 0,033$. Погрешность слежения $\varepsilon = 0,08$.

Результаты численного моделирования движения робота при построенном управлении представлены на рисунке 4.1.



Р и с у н о к 4.1

Если вместо функции с насыщением $\text{sat}(\cdot)$ в управлении (2.4) взять релейную функцию $\text{sign}(\cdot)$, то полученное релейное управление $u_r = (u_{r1}, u_{r2}, u_{r3})^T$ также будет решать задачу отслеживания траектории $q^*(t)$. Причем для релейного управления значения параметров c_i , k , ε , h_0 будут такие же, как и для управления с насыщением. На рисунке 4.2 представлены графики управления с насыщением u и релейного управления u_r .

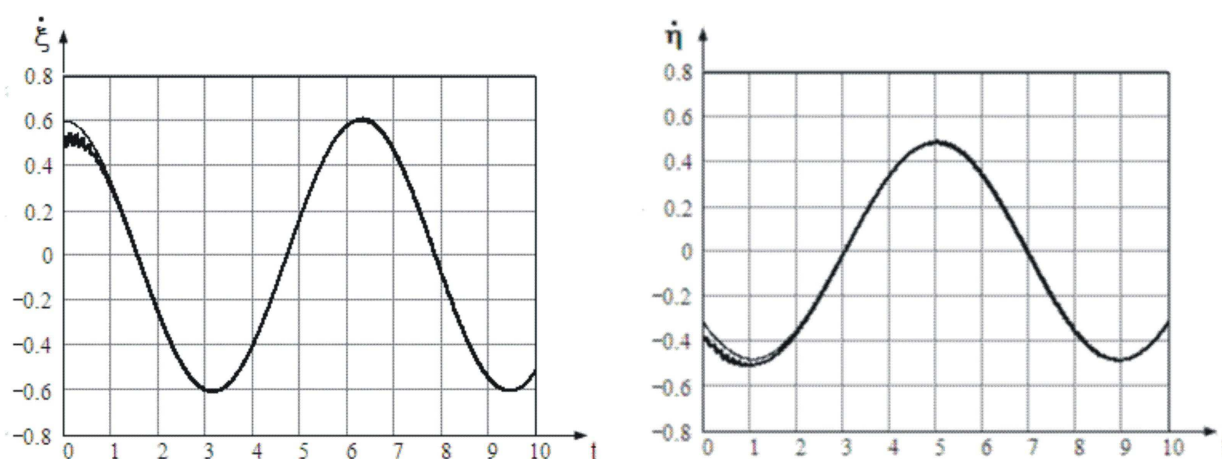


Р и с у н о к 4.2

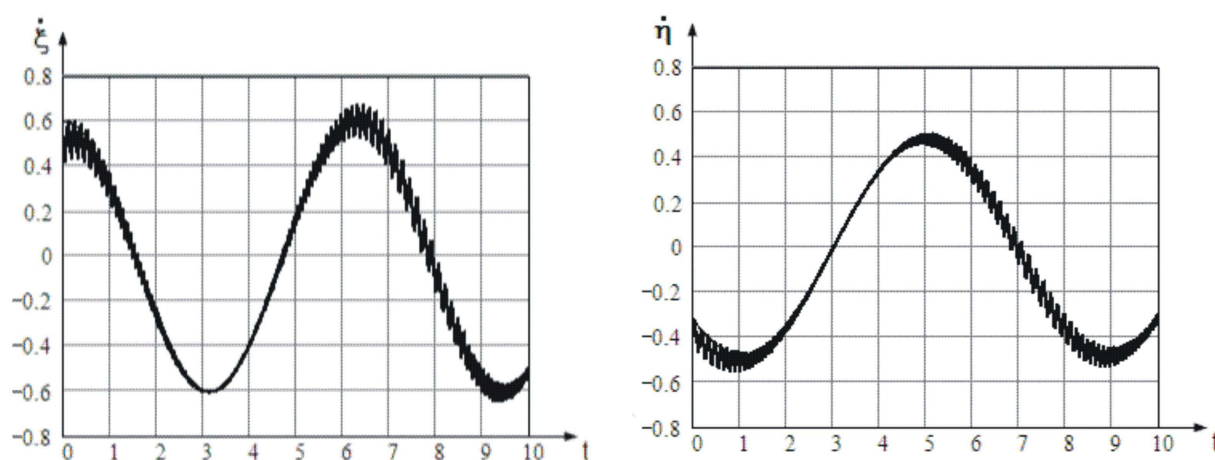
Как показывают графики, управление с насыщением действительно позволяет

уменьшить колебания в системе. Помимо этого, использование управления с насыщением дает возможность уменьшить значение напряжений, вырабатываемых электродвигателями.

Благодаря уменьшению колебаний в устройствах управления можно уменьшить колебания обобщенных скоростей системы. На рисунке 4.3 представлены графики скоростей $\dot{\xi}$ и $\dot{\eta}$ центра масс платформы при использовании управления с насыщением. На рисунке 4.4 представлены графики этих же скоростей, но при использовании релейного управления.



Р и с у н о к 4.3



Р и с у н о к 4.4

Таким образом, использование управления с насыщением позволяет снизить нагрузку на устройства и сэкономить на ресурсах управления.

5. Заключение

В работе рассмотрена задача слежения для мобильного колесного робота с учетом запаздывания в цепи обратной связи и в предположении, что матрица системы неизвестна. Разработан алгоритм нахождения параметров управления, максимальной величины запаздывания и ошибки слежения. Предлагаемый алгоритм обладает такими преимуществами, как простота производимых операций и возможность использования

для широкого класса траекторий. Матрицу C можно подобрать так, что бы получить наиболее подходящие параметры управления.

Программная реализация алгоритма подтвердила эффективность предложенного подхода и возможность уменьшения колебаний в системе по сравнению с использованием релейного управления.

Работа выполнена при финансовой поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» (НК-408П, госконтракт П/2230) и в рамках программы «Развитие научного потенциала высшей школы», проект № 2.1.1/6194.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Tamas Kalmar-Nagy, Raffaello D'Andrea, Pritam Ganguly. Near-optimal dynamic trajectory generation and control of an omnidirectional vehicle // Robotics and Autonomous Systems – 2004. – № 46. – P. 47-64.
2. Hsu-Chih Huang, Ching-Chih Tsai. Adaptive Trajectory Tracking and Stabilization for Omnidirectional Stabilization Mobile Robot with Dynamic Effect and Uncertainties // Proceedings of the 17th World Congress The International Federation of Automatic Control. Seoul, Korea. – July 6–11, 2008. – P. 5383-5388.
3. Перегудова О. А. Метод сравнения в задачах устойчивости и управления движениями механических систем. – Ульяновск: УлГУ, 2009. – 253 с.
4. Yong Liu, J. Jim Zhu, Robert L. Williams II, Jianhua Wu. Omni-directional mobile robot controller based on trajectory linearization // Robotics and Autonomous Systems – 2008. – № 56. – P. 461-479.
5. Ching-Chih Tsai, Hsu-Chih Huang, Tai-Yu Wang. Simultaneous tracking and stabilization of an omnidirectional mobile robot in polar coordinates // Journal of the Chinese Institute of Engineers. – 2009. – Vol. 32. – № 4. – P. 569-575.
6. Перегудова О. А. К задаче слежения для механических систем с запаздыванием в управлении // АИТ. – 2009. – № 5. – С. 95-105.
7. Мартыненко Ю. Г., Формальский А. М. О движении мобильного робота с роликонесущими колесами // Известия РАН. Теория и системы управления. – 2007. – № 6. – С. 142-149.

Desing saturation control synthesis algorithm in the tracking problem for wheeled mobile robot.

© D. Y. Motorina²

Abstract. In the work tracking problem is considered for mobile roller-bearing robot with unknown inertia matrix and delay in the feedback structure. Uninterrupted control law is justified with applying Lyapounov vector-function in the form of vector norm. An algorithm based on estimation operator and logarithmic matrix norm is proposed to find the control parameters. Results of algorithm implementation and numerical simulation of robot motion are presented.

Key Words: Mobile wheeled robot, saturation control, comparison method, delay in the feedback structure.

²Graduate of Information Security and Control Theory Chair, Ulyanovsk State University, Ulyanovsk; motorina.dyu@gmail.com.

УДК 517.9

Аналитическое решение задачи о течении Пуазейля

© В. Н. Попов,¹ И. В. Тестова,² А. А. Юшканов³

Аннотация. В рамках кинетического подхода в изотермическом приближении построено аналитическое (в виде ряда Неймана) решение задачи о течении разреженного газа в плоском канале с бесконечными стенками, обусловленного градиентом давления, параллельного стенкам канала (течении Пуазейля). В качестве основного уравнения используется БГК-модель кинетического уравнения Больцмана, а в качестве граничного условия – модель диффузного отражения. С учетом построенной функции распределения вычислен поток массы в направлении градиента давления, приходящийся на единицу ширины канала, и построен профиль массовой скорости газа в канале. Проведено сравнение с аналогичными результатами, полученными численными методами.

Ключевые слова: течение газа в канале, течение Пуазейля, кинетическое уравнение Больцмана, модельные кинетические уравнения, точные аналитические решения.

1. Введение

Выбор математического аппарата, используемого для моделирования течений газа в канале, существенным образом зависит от соотношения его характерного размера D' и средней длины свободного пробега молекул газа l_g . При $D' \gg l_g$ можно использовать гидродинамический подход, основанный на решении с заданными на стенках канала макроскопическими граничными условиями системы уравнений Навье-Стокса. В противном случае нужно использовать кинетический подход, основанный на решении кинетического уравнения Больцмана с микроскопическими граничными условиями, которым должна удовлетворять на стенках канала функция распределения молекул газа по координатам и скоростям [1]. Учитывая, что точные решения кинетического уравнения Больцмана в силу нелинейности стоящего в его правой части пятикратного интеграла столкновений в общем случае получить не представляется возможным, при решении многих задач используется не само уравнение Больцмана, а его модели, которые получаются путем замены интеграла столкновений Больцмана более простыми с математической точки зрения выражениями, наследующими, тем не менее, основные свойства истинного интеграла столкновений. Одной из таких моделей является БГК (Бхатнагар, Гросс, Крук) модель, которая для стационарного случая в декартовой системе координат записывается в виде [2]

$$\mathbf{v} \nabla f = \frac{p}{\eta_g} (f_{eq} - f).$$

Здесь $f(\mathbf{r}', \mathbf{v})$ – функция распределения молекул газа по координатам и скоростям, $f_{eq}(\mathbf{r}', \mathbf{v})$ – локально-равновесный максвеллиан, p и η_g – давление и коэффициент динамической вязкости газа, $\mathbf{v}$ – скорости поступательного движения молекул газа, $\mathbf{r}'$ – размерный радиус-вектор. В представленной работе данная модель используется для

¹Заведующий кафедрой математики, Северный (Арктический) федеральный университет, г. Архангельск; popov.vasily@pomorsu.ru.

²Старший преподаватель кафедры информатики, Поморский государственный университет имени М. В. Ломоносова, г. Архангельск; testovairina@mail.ru.

³Профессор кафедры теоретической физики, Московский государственный областной университет, г. Москва; yushkanov@inbox.ru.

решения задачи о течении разреженного газа в плоском канале при наличии касательного к его стенкам градиента давления (течения Пуазейля).

Данная задача неоднократно рассматривалась ранее разными авторами с использованием численных методов, обзор которых представлен в [3]. Аналитические решения представлены в [4], [5], авторы которых на основе БГК и ЭС моделей уравнения Больцмана для почти зеркальных граничных условий на стенках канала получили выражения, описывающие профиль массовой скорости газа и потоки тепла и массы вдоль его оси.

Целью представленной работы является построение аналитического решения БГК модели кинетического уравнения Больцмана в задаче о течении Пуазейля с использованием модели диффузного отражения молекул газа стенками канала. Следует отметить, что данная модель граничного условия является более реалистичной по сравнению с использованной в [4] особенно для не обработанных специальным образом технических поверхностей. В то же время следует отметить, что использование данной модели граничного условия влечет за собой ряд дополнительных математических сложностей, которых удалось избежать в [4]. В частности, это относится к возникшей необходимости решения задачи факторизации коэффициента краевой задачи, к которой сводится с использованием методов теории функции комплексного переменного сингулярное интегральное уравнение, получаемое после подстановки граничных условий в общее решение исходного уравнения, а также необходимость решения интегрального уравнения для нахождения коэффициентов в разложении решения задачи по собственным векторам непрерывного спектра. Для решения упомянутых выше проблем использовались методы, разработанные в [6].

2. Постановка задачи. Построение функции распределения молекул газа

Рассмотрим течение разреженного газа в плоском канале, толщиной D' , стенки которого расположены в плоскостях $x' = \pm d'$ прямоугольной декартовой системы координат ($d' = D'/2$). Предположим, что течение газа обусловлено наличием постоянного градиента давления. Направим ось Oz' вдоль градиента давления. Будем считать, что относительный перепад давления на длине свободного пробега молекул газа малым. Тогда рассматриваемая задача допускает линеаризацию. Учитывая, что в задачах скольжения функция распределения пропорциональна касательной к обтекаемой поверхности компоненте массовой скорости газа, функцию распределения молекул газа по координатам и скоростям можно представить в виде

$$f(\mathbf{r}', \mathbf{v}) = n(z)\beta^{3/2}\pi^{-3/2} \exp(-C^2) [1 + C_z G_n Z(x, C_x)]. \quad (2.1)$$

Здесь $\mathbf{r}'$ – размерный радиус-вектор; $\mathbf{C} = \sqrt{\beta} \mathbf{v}$ – безразмерная скорость молекул газа; $\beta = m/2k_B T$; m – масса молекулы газа; k_B – постоянная Больцмана; T – температура газа; $G_n = (1/p)dp/dz$ – безразмерный градиент давления в направлении оси Oz' ; p – давление газа; $Z(x, C_x)$ – линейная поправка к локально-равновесной функции распределения; $x = x'/l_g$ и $z = z'/l_g$ – безразмерные координаты; $l_g = \eta_g \beta^{-1/2}/p$.

Запишем в выбранной системе координат БГК модель кинетического уравнения Больцмана

$$v_x \frac{\partial f}{\partial x'} + v_z \frac{\partial f}{\partial z'} = \frac{p}{\eta_g} (f_{eq} - f). \quad (2.2)$$

Подставляя (2.1) в (2.2) и линеаризуя $f_{eq}(\mathbf{r}', \mathbf{v})$ относительно абсолютного максвеллиана, приходим к уравнению для нахождения $Z(x, \mu)$ ($\mu = C_x$)

$$\mu \frac{\partial Z}{\partial x} + Z(x, \mu) + 1 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\tau^2) Z(x, \tau) d\tau. \quad (2.3)$$

Непосредственной подстановкой можно убедиться, что

$$Z_1(x, \mu) = x^2 - 2x\mu + 2\mu^2$$

есть частное решение (2.3). Общее решение (2.3) приведено в [2]

$$Z_0(x, \mu) = A_0 + A_1(x - \mu) + \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{x}{\eta}\right) F(\eta, \mu) a(\eta) d\eta,$$

$$F(\eta, \mu) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \eta P \frac{1}{\eta - \mu} + \exp(\eta^2) \lambda(\eta) \delta(\eta - \mu), \quad (2.4)$$

$$\lambda(z) = 1 + \frac{1}{\sqrt{\pi}} z \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-\mu^2)}{\mu - z} d\mu, \quad (2.5)$$

$P(1/z)$ – распределение в смысле главного значения при вычислении интеграла от $1/z$, $\delta(z)$ – дельта-функция Дирака. Таким образом, общее решение (2.3) построено и имеет вид

$$Z(x, \mu) = x^2 - 2x\mu + 2\mu^2 + A_0 + A_1(x - \mu) + \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{x}{\eta}\right) F(\eta, \mu) a(\eta) d\eta, \quad (2.6)$$

где A_0 , A_1 и $a(\eta)$ – неизвестные параметры и функция, подлежащие дальнейшему определению.

Рассмотрим теперь вопрос о граничных условиях, которым должно удовлетворять решение (2.6) на стенках канала. С учетом используемой модели диффузного отражения записываем граничное условие на верхней стенке, расположенной в плоскости $x = d$

$$Z(d, \mu) = 0, \quad \mu < 0. \quad (2.7)$$

На нижней стенке при $x = -d$

$$Z(-d, \mu) = 0, \quad \mu > 0. \quad (2.8)$$

Подставляя (2.6) в (2.7) и (2.8), приходим к интегральным уравнениям

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\eta b(\eta, d)}{\eta - \mu} d\eta + \exp(\mu^2) b(\mu, d) \lambda(\mu) = \\ = -d^2 - 2\mu^2 - A_0 - A_1 d + (A_1 + 2d)\mu, \quad \mu < 0, \end{aligned} \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\eta b(\eta, -d)}{\eta - \mu} d\eta + \exp(\mu^2) b(\mu, -d) \lambda(\mu) = \\ = -d^2 - 2\mu^2 - A_0 + A_1 d + (A_1 - 2d)\mu, \quad \mu > 0, \end{aligned} \quad (2.10)$$

$$b(\eta, x) = \exp\left(-\frac{x}{\eta}\right) a(\eta). \quad (2.11)$$

Заменим в (2.9) μ на $-\mu$ и представим входящий в него интеграл в виде суммы двух. С учетом сказанного перепишем (2.9)

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^0 \frac{\eta b(\eta, d)}{\eta + \mu} d\eta + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{\eta b(\eta, d)}{\eta + \mu} d\eta + \exp(\mu^2) b(-\mu, d) \lambda(-\mu) = \\ = -d^2 - 2\mu^2 - A_0 - A_1 d - (A_1 + 2d)\mu, \quad \mu > 0. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Первый интеграл в (2.12) является сингулярным, а второй – регулярным. Заменим в первом интеграле переменную интегрирования η на $-\eta$. Тогда (2.9) примет вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{\eta b(-\eta, d)}{\eta - \mu} d\eta + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{\eta b(\eta, d)}{\eta + \mu} d\eta + \exp(\mu^2) b(-\mu, d) \lambda(\mu) = \\ = -d^2 - 2\mu^2 - A_0 - A_1 d - (A_1 + 2d)\mu, \quad \mu > 0. \end{aligned} \quad (2.13)$$

При записи (2.13) учли, что на действительной оси $\lambda(\mu)$ является четной функцией. Аналогичным образом преобразуем интеграл в (2.10)

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{\eta b(-\eta, -d)}{\eta + \mu} d\eta + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{\eta b(\eta, -d)}{\eta - \mu} d\eta + \exp(\mu^2) b(\mu, -d) \lambda(\mu) = \\ = -d^2 - 2\mu^2 - A_0 + A_1 d + (A_1 - 2d)\mu, \quad \mu > 0. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Складывая, далее, (2.13) и (2.14) и принимая во внимание (2.11), приходим к уравнению

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{\eta [a(\eta) + a(-\eta)] \exp(d/\eta) d\eta}{\eta - \mu} + \exp(\mu^2) [a(\eta) + a(-\eta)] \exp(d/\eta) \lambda(\mu) + \\ + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{\eta [a(\eta) + a(-\eta)] \exp(-d/\eta) d\eta}{\eta + \mu} = \\ = -2[d^2 + 2\mu^2 + A_0 + 2d\mu], \quad \mu > 0. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Аналогично, вычитая (2.13) из (2.14), получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{\eta [a(\eta) - a(-\eta)] \exp(d/\eta) d\eta}{\eta - \mu} + \exp(\mu^2) [a(\eta) - a(-\eta)] \exp(d/\eta) \lambda(\mu) + \\ + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{\eta [a(\eta) - a(-\eta)] \exp(-d/\eta) d\eta}{\eta + \mu} = \\ = 2A_1[d + \mu], \quad \mu > 0. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Нетрудно видеть, что (2.16) обращается в тождество при выполнении условий

$$a(\eta) = a(-\eta), \quad A_1 = 0. \quad (2.17)$$

При этом (2.15) можно переписать в виде

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{\eta b(\eta, -d)}{\eta - \mu} d\eta + \exp(\mu^2) b(\mu, -d) \lambda(\mu) = f(\mu), \quad \mu > 0, \quad (2.18)$$

$$f(\mu) = -d^2 - 2\mu^2 - A_0 - 2d\mu - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{\eta b(\eta, d)}{\eta + \mu} d\eta. \quad (2.19)$$

Решение (2.18) ищем с использованием методов краевых задач теории функций комплексного переменного. С этой целью введем вспомогательную функцию, заданную интегралом типа Коши

$$N(z) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{\eta b(\eta, -d)}{\eta - z} d\eta, \quad (2.20)$$

для которой

$$N^+(\mu) - N^-(\mu) = 2\sqrt{\pi} i \mu b(\mu, -d), \quad 0 < \mu < +\infty, \quad (2.21)$$

$$N^+(\mu) + N^-(\mu) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{\eta b(\eta, -d)}{\eta - \mu} d\eta, \quad (2.22)$$

Здесь $N^+(\mu)$ и $N^-(\mu)$ – краевые значения функции $N(z)$ на верхнем и нижнем берегах разреза, совпадающего с действительной положительной полупрямой. Аналогичные соотношения для $\lambda(z)$, определяемой равенством (2.5), имеют вид

$$\lambda^+(\mu) - \lambda^-(\mu) = 2\sqrt{\pi} i \mu \exp(-\mu^2), \quad -\infty < \mu < +\infty, \quad (2.23)$$

$$\lambda^+(\mu) + \lambda^-(\mu) = 2\lambda(\mu). \quad (2.24)$$

Здесь разрез совпадает со всей действительной числовой прямой. С учетом (2.21)–(2.24) сведем интегральное уравнение (2.18) к краевой задаче Римана

$$N^+(\mu) \lambda^+(\mu) - N^-(\mu) \lambda^-(\mu) = 2\sqrt{\pi} i \mu f(\mu) \exp(-\mu^2), \quad \mu > 0, \quad (2.25)$$

Особенность краевой задачи (2.25) состоит в том, что функции $N(z)$ и $\lambda(z)$ имеют различные разрезы. Чтобы устранить эту особенность воспользуемся решением однородной краевой задачи

$$\frac{X^+(\mu)}{X^-(\mu)} = \frac{\lambda^+(\mu)}{\lambda^-(\mu)}, \quad \mu > 0, \quad (2.26)$$

которое имеет вид [4]

$$X(z) = \frac{1}{z} \exp \left[\frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{\theta(\tau) - \pi}{\tau - z} d\tau \right], \quad (2.27)$$

$$\theta(\tau) = \frac{\pi}{2} - \operatorname{arctg} \frac{\lambda(\tau)}{\sqrt{\pi} \tau \exp(-\tau^2)}.$$

С учетом решения однородной краевой задачи (2.26) перепишем (2.25)

$$N^+(\mu) X^+(\mu) - N^-(\mu) X^-(\mu) = \frac{X^-(\mu)}{\lambda^-(\mu)} 2\sqrt{\pi} i \mu f(\mu) \exp(-\mu^2), \quad \mu > 0. \quad (2.28)$$

Линии скачков функций $N(z)$ и $X(z)$ совпадают с контуром краевого условия. Следовательно, получили краевую задачу определения аналитической функции по заданному скачку. Учитывая поведение входящих в (2.28) функций, по формулам Сохоцкого получаем ее общее решение

$$N(z) = \frac{1}{X(z)} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{X^-(\eta)}{\lambda^-(\eta)} \eta f(\eta) \exp(-\eta^2) \frac{d\eta}{\eta - z}. \quad (2.29)$$

Учитывая, что в окрестности бесконечно удаленной точки

$$\frac{1}{X(z)} = z + Q_1 + O\left(\frac{1}{z}\right),$$

находим

$$N(z) = -\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{X^-(\eta)}{\lambda^-(\eta)} \eta f(\eta) \exp(-\eta^2) d\eta + O\left(\frac{1}{z}\right), \quad |z| \rightarrow +\infty.$$

Так как функция $N(z)$ согласно (2.20) задана интегралом типа Коши то в окрестности бесконечно удаленной точки $N(z) = O(1/z)$. Отсюда приходим к условию разрешимости краевой задачи (2.28)

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{X^-(\eta)}{\lambda^-(\eta)} \eta f(\eta) \exp(-\eta^2) d\eta = 0. \quad (2.30)$$

С учетом (2.11), (2.19) перепишем (2.30) в виде

$$d^2 - 2Q_2 + A_0 - 2dQ_1 - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{X^-(\eta)}{\lambda^-(\eta)} \eta \exp(-\eta^2) d\eta \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{\tau b(\tau, d)}{\tau + \eta} d\tau = 0. \quad (2.31)$$

Здесь Q_n – интегралы Лойалки [7]

$$Q_n = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{X^-(\eta)}{\lambda^-(\eta)} \eta^{n+1} \exp(-\eta^2) d\eta, \quad (2.32)$$

в частности, $Q_0 = -1$, $Q_1 = -1.01619$, $Q_2 = -1.26632$. Изменяя в последнем интеграле (2.31) порядок интегрирования и учитывая (2.11) и интегральное представление функции $X(-\tau)$

$$X(-\tau) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{X^-(\eta)}{\lambda^-(\eta)} \frac{\eta \exp(-\eta^2) d\eta}{\eta + \tau},$$

из (2.31) находим

$$A_0 = -d^2 + 2Q_2 + 2dQ_1 + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \tau X(-\tau) a(\tau) \exp\left(-\frac{d}{\tau}\right) d\tau. \quad (2.33)$$

Коэффициенты $a(\eta)$ в разложении (2.6) решения рассматриваемой задачи по собственным векторам непрерывного спектра найдем из условия (2.21), предварительно преобразовав (2.29). Учитывая, что

$$X(z) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{X^-(\eta)}{\lambda^-(\eta)} \frac{\eta \exp(-\eta^2) d\eta}{\eta - z},$$

перепишем (2.29) в виде

$$N(z) = -d^2 - A_0 - 2zd - 2z^2 + \frac{1}{X(z)} \left[2(z + d - Q_1) - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{X^-(\eta)}{\lambda^-(\eta)} \frac{\eta \exp(-\eta^2) d\eta}{\eta - z} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{\tau b(\tau, d)}{\tau + \eta} d\tau \right]. \quad (2.34)$$

Для вычисления интеграла от последнего слагаемого в (2.34) заметим, что

$$\frac{1}{\eta - z} \frac{1}{\tau + \eta} = \frac{1}{\eta - z} \frac{1}{\tau + z} - \frac{1}{\tau + z} \frac{1}{\tau + \eta}.$$

Тогда

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{X^-(\eta)}{\lambda^-(\eta)} \frac{\eta \exp(-\eta^2) d\eta}{\eta - z} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{\tau b(\tau, d)}{\tau + \eta} d\tau = \\ = X(z) \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{\tau b(\tau, d)}{\tau + z} d\tau - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{\tau X(-\tau) b(\tau, d)}{\tau + z} d\tau. \end{aligned}$$

Таким образом,

$$N^+(\mu) - N^-(\mu) = \frac{2\sqrt{\pi} i \mu \exp(-\mu^2) X(-\mu)}{|\lambda^+(\mu)|^2} \left[Q_1 - \mu - d - \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{\tau X(-\tau) b(\tau, d)}{\tau + \mu} d\tau \right], \quad \mu > 0.$$

Отсюда, принимая во внимание (2.11) и (2.21), находим

$$a(\mu) = \frac{\exp(-\mu^2) X(-\mu)}{|\lambda^+(\mu)|^2} \left[Q_1 - \mu - d - \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{\tau X(-\tau) a(\tau)}{\tau + \mu} \exp\left(-\frac{d}{\eta}\right) d\tau \right] \exp\left(-\frac{d}{\mu}\right), \quad \mu > 0. \quad (2.35)$$

Решение (2.35) ищем в виде ряда по степеням λ

$$a(\mu) = \sum_{k=0}^{+\infty} \lambda^k a_k(\mu), \quad \lambda = -\frac{1}{2\sqrt{\pi}}. \quad (2.36)$$

Подставляя (2.36) в (2.35) и приравнявая коэффициенты при одинаковых степенях λ , находим

$$a_0(\tau) = h(\tau)[Q_1 - \tau - D/2], \quad \tau > 0, \quad (2.37)$$

$$a_1(\tau) = h(\tau) \int_0^{+\infty} \frac{g(\eta)[Q_1 - \eta - D/2] d\eta}{\eta + \tau}, \quad \tau > 0, \quad (2.38)$$

$$a_2(\tau) = h(\tau) \int_0^{+\infty} \frac{g(\eta) d\eta}{\eta + \tau} \int_0^{+\infty} \frac{g(\mu)[Q_1 - \mu - D/2] d\mu}{\mu + \eta}, \quad \tau > 0, \quad (2.39)$$

$$h(\tau) = \frac{X(-\tau)}{|\lambda^+(\tau)|^2} \exp(-\tau^2 - \frac{D}{2\tau}), \quad g(\tau) = \frac{\tau X^2(-\tau)}{|\lambda^+(\tau)|^2} \exp(-\tau^2 - \frac{D}{\tau}). \quad (2.40)$$

Подставляя (2.36)-(2.39) в (2.33), находим

$$A_0 = -\frac{D^2}{4} + 2Q_2 + DQ_1 + \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k I_k, \quad (2.41)$$

$$I_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} g(\tau)[Q_1 - \tau - D/2] d\tau,$$

$$I_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} g(\tau) d\tau \int_0^{+\infty} \frac{g(\eta)[Q_1 - \eta - D/2] d\eta}{\eta + \tau},$$

$$I_2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} g(\tau) d\tau \int_0^{+\infty} \frac{g(\eta) d\eta}{\eta + \tau} \int_0^{+\infty} \frac{g(\mu)[Q_1 - \mu - D/2] d\mu}{\mu + \eta}.$$

Таким образом, неизвестные параметры A_0 , A_1 и функция $a(\eta)$, входящие в (2.6) найдены и функция распределения молекул газа по координатам и скоростям построена.

3. Вычисление макропараметров газа в канале

С учетом построенной функции распределения вычислим скорость газа в канале $q'_z(x')$ и величину потока массы J'_M в направлении оси Oz' , приходящуюся на единицу ширины канала. Исходя из статистического смысла функции распределения и учитывая (2.1), находим

$$\begin{aligned} q'_z(x') &= \frac{1}{n} \int v_z f(\mathbf{r}', \mathbf{v}) d^3 \mathbf{v} = \\ &= \pi^{-3/2} \left(\frac{2k_B T}{m} \right)^{1/2} \int \exp(-C^2) C_z [1 + C_z G_n Z(x, C_x)] d^3 \mathbf{C} = \left(\frac{2k_B T}{m} \right)^{1/2} q_z(x) \frac{1}{p} \frac{dp}{dz}. \end{aligned}$$

Здесь

$$q_z(x) = \pi^{-3/2} \int \exp(-C^2) C_z^2 Z(x, C_x) d^3 \mathbf{C} \quad (3.1)$$

есть безразмерная массовая скорость газа. Подставляя (2.6) в (3.1), после интегрирования получаем

$$\begin{aligned}
 q_z(x) &= \frac{1}{2} \left[x^2 - \frac{D^2}{4} + DQ_1 + 2Q_2 + 1 + \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k [I_k + J_k(x)] \right], \\
 J_0(x) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \gamma(x, \tau) [Q_1 - \tau - D/2] d\tau, \\
 J_1(x) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \gamma(x, \tau) d\tau \int_0^{+\infty} \frac{g(\eta) [Q_1 - \eta - D/2] d\eta}{\eta + \tau}, \\
 J_2(x) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \gamma(x, \tau) d\tau \int_0^{+\infty} \frac{g(\eta) d\eta}{\eta + \tau} \int_0^{+\infty} \frac{g(\mu) [Q_1 - \mu - D/2] d\mu}{\mu + \eta}, \\
 \gamma(x, \tau) &= \frac{X(-\tau)}{[\lambda^+(\tau)]^2} \exp(-\tau^2) \left[\exp\left(\frac{x - D/2}{\tau}\right) + \exp\left(-\frac{x + D/2}{\tau}\right) \right].
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

Величину потока массы J'_M в направлении оси Oz' , приходящуюся на единицу ширины канала, вычислим согласно [8]

$$J_M = -\frac{2}{D^2} \int_{-D/2}^{D/2} q(x) dx. \tag{3.3}$$

Подставляя (3.2) в (3.3) и выполняя интегрирование, получаем

$$\begin{aligned}
 J_M &= \frac{D}{6} - Q_1 - \frac{1}{D} \left[2Q_2 + 1 + \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k I_k \right] - \frac{2}{D^2} \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k K_k, \\
 K_0 &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \zeta(\tau) [Q_1 - \tau - D/2] d\tau, \\
 K_1 &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \zeta(\tau) d\tau \int_0^{+\infty} \frac{g(\eta) [Q_1 - \eta - D/2] d\eta}{\eta + \tau}, \\
 K_2 &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \zeta(\tau) d\tau \int_0^{+\infty} \frac{g(\eta) d\eta}{\eta + \tau} \int_0^{+\infty} \frac{g(\mu) [Q_1 - \mu - D/2] d\mu}{\mu + \eta}, \\
 \zeta(\tau) &= \frac{\tau X(-\tau)}{[\lambda^+(\tau)]^2} \exp(-\tau^2) \left[1 - \exp\left(-\frac{D}{\tau}\right) \right].
 \end{aligned} \tag{3.4}$$

Как показывают проведенные расчеты, значения J_M , полученные на основе (3.3), отличаются от аналогичных значений, полученных в [9] численными методами в рамках БГК модели кинетического уравнения Больцмана, не превышает 0.08% для всего диапазона значений D .

4. Заключение

Итак, в работе на примере задачи о течении Пуазейля представлен аналитический метод решения краевой задачи для неоднородного интегродифференциального уравнения для случая пространственно ограниченных областей. Общее решение исходного неоднородного интегродифференциального уравнения найдено в пространстве обобщенных функций. Подстановка граничных условий в общее решение приводит к системе двух связанных сингулярных интегральных уравнений с ядром типа Коши, которые после преобразования сводятся к краевой задаче Римана на действительной положительной полуоси. Коэффициенты в разложении решения задачи по собственным векторам дискретного спектра находятся из условия разрешимости построенной краевой задачи. Использование формул Сохоцкого-Племеля для нахождения коэффициентов в разложении решения задачи по собственным векторам непрерывного спектра приводит к интегральному уравнению Фредгольма второго рода, решение которого ищется в виде степенного ряда. С использованием построенного решения вычислен расход газа, приходящийся на единицу ширины канала, и построен профиль массовой скорости газа.

Полученные в работе результаты могут быть использованы для решения широкого круга задач динамики разреженного газа и физики плазмы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Физическая кинетика. – М.: Наука, 1979. – 528 с.
2. Черчиньяни К. Математические методы в кинетической теории газов. – М.: Мир, 1973. – 245 с.
3. Шарипов Ф.М., Селезнев В.Д. Движение разреженных газов в каналах и микроканалах. Екатеринбург. УрО РАН. 2008. 230 с.
4. Латышев А.В., Юшканов А.А. Аналитические решения граничных задач для кинетических уравнений. – М.: МГОУ. 2004. – 286 с.
5. Латышев А.В., Юшканов А.А. Задача Пуазейля для эллипсоидально-статистического уравнения и почти зеркальных граничных условий. // Журнал технической физики. – 1998. – Т. 68. – №11. – С. 27 - 31.
6. Латышев А.В., Попов В.Н., Юшканов А.А. Неоднородные кинетические задачи. Метод сингулярных интегральных уравнений: Монография. – Архангельск: Поморский университет. 2004. – 266 с.
7. Loyalka S.K. The Q_n and F_n integrals for the BGK model // Transport theory and statistical physics. – 1975. – V. 4. – P. 55-65.
8. Loyalka S.K., Hickey K.A. Plane Poiseuille flow near continuum regimes for a rigid spheres // Physica A. – 1989. V. 160. – № 3. – P. 395-408.
9. C.E. Sievert, R.D.M. Garcia and P. Granjean. A Concise and Accurate Solutions for Poiseuille Flow in a Plane Channel // Journal of Mathematical Physics. – 1980. – V. 21. – P. 2760-2763.

Analytic solution of the Poiseuille Flow problem

© V. N. Popov, ⁴ I. V. Testova, ⁵ A. A. Yushkanov ⁶

Abstract. Within the kinetic approach limit, in the isothermal approximation the analytical (in the form of Neumann's series) solution of the problem on flow of the rarefied gas in the flat channel with the infinite walls, caused by a pressure gradient parallel to walls (Poiseuille Flow) it is constructed. As the basic equation the BGK model of the Boltzmann's kinetic equation is used. As a boundary condition the model of diffusion reflections is used. In view of the constructed distribution function the flow of gases mass in a direction of a gradient of the pressure, falling unit width of the channel and the structure of mass speed of gas in the channel are constructed. Comparison with the similar results received Numerical method is leads.

Key Words: flow of the gas in the channel, Poiseuille Flow, Boltzmann's kinetic equation, the model kinetic equations, exact analytical solutions.

⁴Head of Mathematics Chair, Northern Arctic federal university, Arkhangelsk; popov.vasily@pomorsu.ru.

⁵The senior teacher of computer science Chair, Pomor state university after M.V. Lomonosov, Arkhangelsk; testovairina@mail.ru.

⁶Professor of Theoretical Physics Chair, Moscow state regional university, Moscow; yushkanov@inbox.ru.

УДК 517.9

О свойствах решений задач моделирования каталитических процессов с переменным реакционным объемом

© Е. В. Степашина¹, А. И. Байтимерова², С. А. Мустафина³

Аннотация. В работе получена математическая модель химического процесса в РИС на двудольном графе. На основе теории графов показано существование решения кинетической модели процесса димеризации α -метилстирола.

Ключевые слова: дифференциальные уравнения на графах, двудольные графы реакций.

1. Двудольные графы реакций

В химической кинетике для описания реакций оказывается удобной геометрическая трактовка схемы реакций. Если реакция протекает в m стадий, в которых участвует n веществ $A_1, \dots, A_n$, то схема реакций имеет вид

$$\sum_{k=1}^n \alpha_{ik} A_k \rightarrow \sum_{k=1}^n \beta_{ik} A_k, \quad i = \overline{1, m}, \quad (1.1)$$

где α_{ik}, β_{ik} – стехиометрические коэффициенты. Если C_k – концентрация вещества A_k ($k = \overline{1, n}$), то закон изменения во времени функций $C_1(t), \dots, C_n(t)$ записывают в виде дифференциальных уравнений

$$\frac{dC_k}{dt} = \sum_{i=1}^m \gamma_{ik} \omega_i, \quad \gamma_{ik} = \beta_{ik} - \alpha_{ik}, \quad k = \overline{1, n}. \quad (1.2)$$

Здесь ω_i – скорость i -й реакции. Обычно считается

$$\omega_i = k_i \prod_{k=1}^n C_k^{\alpha_{ik}}, \quad i = \overline{1, m}, \quad (1.3)$$

где k_i – константа скорости реакции.

В схеме (1.1) участвуют два конечных множества: множество $A = \{A_1, \dots, A_n\}$ – веществ, и множество $B = \{b_1, \dots, b_m\}$ – самих реакций. Тот факт, что α_{ik} единиц вещества A_k вступает в реакцию b_i , обозначим стрелкой, идущей от вершины A_k к вершине b_i с весовым коэффициентом α_{ik} . Аналогично с помощью стрелок, идущих от вершины b_i к вершине A_k , будем отображать, что β_{ik} единиц вещества A_k является продуктом реакции b_i . В результате получаем конечный ориентированный двудольный граф Γ . Каждой вершине A_k поставим в соответствие функцию концентрации $C_k(t)$, вершине b_i – функцию скорости $\omega_i(t, C)$. Тогда кинетическая модель (1.2) представляется системой дифференциальных уравнений на графе Γ [1]:

¹Аспирант кафедры математического моделирования, Стерлитамакская государственная педагогическая академия, г. Стерлитамак; zhenja05@rambler.ru.

²Старший преподаватель кафедры математического моделирования, Стерлитамакская государственная педагогическая академия, г. Стерлитамак; alb-bai@rambler.ru.

³Заведующая кафедрой математического моделирования, Стерлитамакская государственная педагогическая академия, г. Стерлитамак; mustafina_SA@rambler.ru

$$\frac{dC_k}{dt} = \sum_{i=1}^m \gamma_{ik} \omega_i(t, C), \quad k = \overline{1, n}. \quad (1.4)$$

При этом функции $\omega_i(t, C)$ непрерывны по t и C ($t \geq 0$) и непрерывно дифференцируемы по C , причем

$$\omega_i(t, C) \geq 0 \quad \text{при} \quad t \geq 0, C_k \geq 0, \quad k = \overline{1, n}. \quad (1.5)$$

2. Свойства решений уравнений на графах

Основываясь на свойствах из теории двудольных графов, сформулируем и обоснуем некоторые утверждения для полученной системы (1.4).

A -вершину A_k графа Γ будем называть непосредственно предшествующей B -вершине b_i , если $\alpha_{ik} > 0$. Аналогично вершина b_i называется непосредственно предшествующей вершине A_k , если $\beta_{ik} > 0$.

Функция $\omega_i(t, C)$ подчинена вершине A_k , если $\omega_i(t, C) = 0$ при $C_k = 0$. Таким образом, все функции $\omega_i(t, C)$ подчинены всем A -вершинам непосредственно предшествующим вершине b_i .

Уравнения (1.4) будем рассматривать при неотрицательных начальных значениях искомых функций

$$C_k(0) = C_k^0 \geq 0, \quad k = \overline{1, n}. \quad (2.1)$$

Т е о р е м а 2.1. Если $C_k^0 > 0$, $g_k(t) \geq 0$ ($k = \overline{1, n}$), то гладкое решение задачи (1.4), (2.1) положительно:

$$C_k(t) > 0 \quad (t \geq 0; k = \overline{1, n}) \quad (2.2)$$

на интервале, где это решение существует.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Докажем методом от противного. Предположим, что решение существует на интервале $[0, T]$ и утверждение (2.2) не имеет места. Тогда компонента $C_k(t)$ обращается в нуль при некотором k . Пусть $t_0 \in (0, T)$ – наименьшее t , при котором $C_k(t) = 0$, так что

$$C_s(t) > 0 \quad (0 \leq t < t_0; s = \overline{1, n}), \quad C_k(t_0) = 0.$$

Выделим в системе (1.4) уравнение с номером k и перепишем его в виде

$$\frac{dC_k}{dt} = a_k(t)C_k + b_k(t), \quad (2.3)$$

где обозначено

$$a_k(t) = \frac{1}{C_k} \sum_i \gamma_{ik} \omega_i(t, C); \quad (2.4)$$

$$b_k(t) = \sum_i \gamma_{ik} \omega_i(t, C), \quad (2.5)$$

причем суммирование в (2.4) проводится по всем i , для которых $\gamma_{ik} < 0$, а в (2.5) по всем i , для которых $\gamma_{ik} \geq 0$. Функция $a_k(t)$ непрерывна и ограничена в интервале $[0, T]$.

Действительно, из $\gamma_{ik} < 0$ вытекает $\alpha_{ik} > 0$ и, следовательно, ω_i подчинена вершине A_k , т.е.

$$\omega_i(t, C(t)) = \varphi_{ik}(t)C_k(t) \quad (2.6)$$

в каждом из слагаемом (2.4). Далее, в интервале $[0, t_0]$, очевидно, $b_k(t) \geq 0$. Из (2.3) имеем

$$C_k(t) = C_k(0) \exp \int_0^t a_k(s) ds + \int_0^t b_k(s) \exp \int_s^t a_k(\tau) d\tau ds \quad (2.7)$$

и, следовательно, $C_k(t_0) > 0$, что противоречит предположению. Теорема доказана.

С л е д с т в и е 2.1. Если $C_k^0 \geq 0$ $k = \overline{1, n}$, то гладкое решение задачи (1.4), (2.1) неотрицательно: $C_k(t) \geq 0$ ($t \geq 0; k = \overline{1, n}$) на интервале, где это решение существует.

Для дальнейших исследований свойств решения введем в рассмотрение линейные формы

$$L_i(\lambda) = \sum_{k=1}^n \gamma_{ik} \lambda_k \quad i = \overline{1, m},$$

связанные с графом Γ : $\gamma_{ik} = \beta_{ik} - \alpha_{ik}$.

Л е м м а 2.1. Пусть $C(t)$ — решение задачи (1.4), (2.1). Тогда если $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ является решением системы неравенств

$$L_i(\lambda) \leq 0 \quad i = \overline{1, m}, \quad (2.8)$$

то функция

$$\vartheta(t) = \sum_{k=1}^n \lambda_k C_k(t) \quad (2.9)$$

является невозрастающей функцией t .

Д о к а з а т е л ь с т в о. Из (2.9), (1.4), (2.8) следует

$$\frac{d\vartheta}{dt} = \sum_{k=1}^n \lambda_k \frac{dC_k}{dt} = \sum_{i=1}^m L_i(\lambda) \omega_i(t, C) \leq 0,$$

так как $\omega_i(t, C) \geq 0$ ввиду $C_k \geq 0$ ($i = \overline{1, m}, k = \overline{1, n}$).

Очевидно, если вместо (2.8) $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ удовлетворяет неравенствам противоположного смысла ($L_i(\lambda) \geq 0$), то функция (2.9) будет неубывающей функцией t . Если $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ является решением системы уравнений

$$L_i(\lambda) = 0, \quad i = \overline{1, m}, \quad (2.10)$$

то $\vartheta(t) = \text{const}$.

Т е о р е м а 2.2. (Априорная оценка.) Пусть существует неотрицательное решение системы неравенств (2.8):

$$\lambda_k \geq 0, \quad k = \overline{1, n},$$

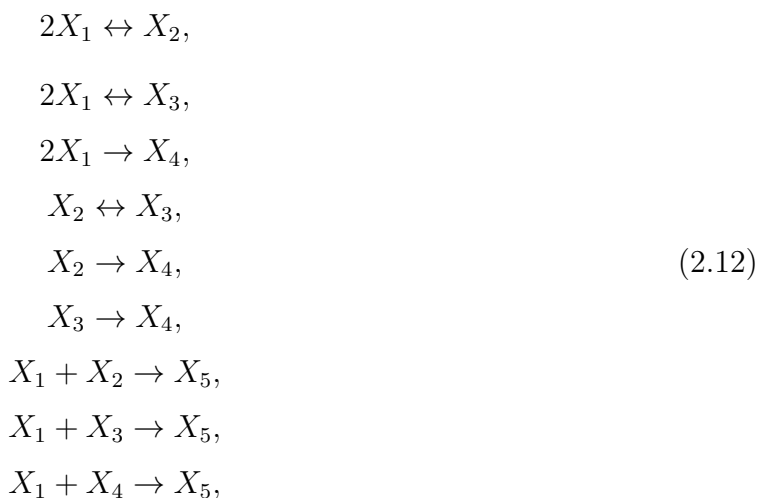
причем $\lambda_l \geq 1$. Пусть $C(t)$ – решение системы (1.4), (2.1). Тогда имеет место оценка

$$0 \leq C_l(t) \leq \sum_{k=1}^n \lambda_k C_k^0. \quad (2.11)$$

Т е о р е м а 2.3. (Теорема существования.) Если существует положительное решение: $\lambda_k > 0$ ($k = \overline{1, n}$) системы неравенств (2.8) (или уравнений (2.9)), то решение задачи (1.4), (2.1) с произвольными неотрицательными начальными данными существует на полуоси $t > 0$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Умножив положительное решение системы (2.8) на достаточно большую константу, всегда можно получить решение, удовлетворяющее условиям $\lambda_k \geq 1$, $k = \overline{1, n}$. Тогда для любого l ($l = \overline{1, n}$) имеет место оценка (2.11). Таким образом решение существует во всей области $t > 0$. Теорема доказана.

П р и м е р 2.1. Совокупность химических превращений, описывающих реакцию димеризации α -метилстирола представляется следующей схемой стадий



где X_1 – α -метилстирол, X_2 – α -димер, X_3 – β -димер, X_4 – циклический димер, X_5 – тримеры.

Согласно закону действующих масс кинетические уравнения, соответствующие схеме химических превращений, для процесса димеризации α -метилстирола (2.12) можно выразить уравнениями:

$$\begin{aligned} \omega_1(C, T) &= k_1(T)C_1^2 - k_{10}(T)C_2, \\ \omega_2(C, T) &= k_2(T)C_1^2 - k_{11}(T)C_3, \\ \omega_3(C, T) &= k_3(T)C_1^2, \\ \omega_4(C, T) &= k_4(T)C_2 - k_{12}(T)C_3, \\ \omega_5(C, T) &= k_5(T)C_2, \\ \omega_6(C, T) &= k_6(T)C_3, \\ \omega_7(C, T) &= k_7(T)C_1C_2, \\ \omega_8(C, T) &= k_8(T)C_1C_3, \\ \omega_9(C, T) &= k_9(T)C_1C_4, \end{aligned} \quad (2.13)$$

где константы скоростей $k_s(T)$, $s = \overline{1, 12}$, зависят от температуры T , исходя из уравнения Аррениуса:

$$k_s(T) = k_s^0 \exp\left(-\frac{E_s}{RT}\right).$$

Кинетическая модель процесса димеризации α -метилстирола представляется системой:

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{F_i(x, T) - x_i F_n(x, T)}{N}, \quad \text{где} \quad F_i = \sum_{k=1}^9 \gamma_{ik} \varpi_k, \quad \varpi_k = \frac{\omega_k}{C_0}, \quad i = \overline{1, 5}; \quad (2.14)$$

$$\frac{dN}{dt} = F_n(x, T), \quad \text{где} \quad N = \frac{C}{C_0},$$

с начальными условиями:

$$x_i(0) = x_i^0, \quad i = \overline{1, 5}; \quad N(0) = 1. \quad (2.15)$$

Решение кинетической модели (1.2) существует (теорема 2.3.), в силу теоремы 2.1. переменная $N > 0$ на полуоси $t > 0$. Учитывая, что кинетическая модель (2.14) получена из (1.2) равносильными преобразованиями, можно сделать вывод, что решение кинетической модели (2.14) существует.

3. Математическая модель процесса в РИС на двудольном графе

Система (1.2) представляет кинетическую модель реакции. При составлении математического описания реактора идеального смешения (РИС) она дополняется уравнением теплового баланса:

$$C_p C_0 \frac{dT}{dt} = \sum_{j=1}^m Q_j \omega_j - \alpha S (T - T_0), \quad (3.1)$$

где C_p – мольная теплоемкость реакционной среды, Q_j – тепловой эффект j -й реакции, α – коэффициент теплоотдачи, S – удельная поверхность теплообмена, T – температура в реакторе в момент времени t , T_0 – температура хладагента.

Обозначим $u_i = C_i$, $i = \overline{1, n}$, $u_{n+1} = C_p(T - T_0)$, $\varpi_{m+1} = \frac{\alpha S}{C_0}(T - T_0)$.

Тогда уравнения (1.2), (3.1) примут вид:

$$\frac{du_k}{dt} = \sum_{i=1}^m \gamma_{ik} \varpi_i, \quad k = \overline{1, n}, \quad \frac{du_{n+1}}{dt} = \sum_{j=1}^m Q_j \varpi_j - \varpi_{m+1}. \quad (3.2)$$

Таким образом, к множеству $A = \{u_1, \dots, u_n, u_{n+1}\}$ добавляется вершина u_{n+1} , отвечающая за температуру, и к множеству $B = \{\varpi_1, \dots, \varpi_m, \varpi_{m+1}\}$ добавляется вершина ϖ_{m+1} , отвечающая за скорость изменения температуры.

Построим двудольный граф реакций для процесса димеризации α -метилстирола в РИС. Система (2.14) дополняется уравнением теплового баланса:

$$C_p \frac{dT}{dt} = \sum_{j=1}^9 Q_j \varpi_j + \frac{\alpha S}{C_0} (T_0 - T). \quad (3.3)$$

Обозначим $u_k = C_k$, $u_{n+1} = -C_p(T_0 - T)$, $\omega_{m+1} = -\frac{\alpha S}{C_0}(T_0 - T)$. Тогда математическая модель процесса примет вид:

$$\frac{du_k}{dt} = \sum_{i=1}^9 \gamma_{ik} \varpi_i, \quad k = \overline{1, 5}, \quad \frac{du_6}{dt} = \sum_{j=1}^9 Q_j \varpi_j - \varpi_{10}. \quad (3.4)$$

Основная идея описания схемы реакций с помощью двудольных графов состоит в том, чтобы связать свойства решений системы (1.4) с геометрическими свойствами графа. Многие важные свойства решений прямой задачи химической кинетики определяются только геометрией графа и не зависят от частного вида функций уравнений модели.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Вольперт А.И., Худяев С.И. Анализ в классах разрывных функций и уравнения математической физики. – М.: Наука, 1975. – 394 с.

The problem of modelling catalytic processes with varying reaction volume and the properties of solutions

© E. V. Stepashina⁴, A. I. Baitimerova⁵, S. A. Mustafina⁶

Abstract. In this paper, the mathematical model of chemical process for IMR bipartite graph is developed. The existence of solutions of a kinetic model of the process dimerization α -methylstyrene is proved based on the theory Graphs.

Key Words: differential equations on graphs, bipartite graphs reactions.

⁴Postgraduate student of mathematical modelling, Sterlitamak State Pedagogical Academy, Sterlitamak; zhenja05@rambler.ru.

⁵Lecturer of mathematical modelling, Sterlitamak State Pedagogical Academy, Sterlitamak; albai@rambler.ru.

⁶Head of mathematical modelling chair, Sterlitamak State Pedagogical Academy, Sterlitamak; mustafina_SA@rambler.ru

УДК 517.956.225

Частные решения уравнения Пуассона с правой частью специального вида

© А. О. Сыромясов¹

Аннотация. В работе рассматривается уравнение Пуассона, правая часть которого имеет вид $|\vec{x}|^\alpha x_j \dots x_k$. Предложен алгоритм поиска частных решений этого уравнения.

Ключевые слова: уравнения в частных производных, уравнение Пуассона, аналитическое решение.

1. Введение

Несмотря на интенсивное развитие численных методов, разработка процедур аналитического решения дифференциальных уравнений по-прежнему является актуальной задачей. Во-первых, во многих случаях исследовать поведение решения проще, если оно представлено в аналитическом виде. Во-вторых, известные аналитические решения могут служить «пробным камнем» при построении новых численных методов.

В приложениях часто встречается уравнение Пуассона. Одна из трудностей, возникающих при исследовании подобного рода задач, – подбор частного решения этого уравнения.

Так, медленное течение вязкой жидкости описывается уравнениями Стокса [1]:

$$\eta \Delta \vec{u} = \nabla p, \quad \nabla \cdot \vec{u} = 0.$$

Здесь η , $\vec{u}$, p – вязкость, скорость течения и давление в жидкости. Если изучается обтекание жидкостью одной частицы, то переменные в уравнениях Стокса разделяются с помощью сферической замены. При математическом моделировании течения относительно совокупности частиц случаи, когда переход к криволинейным координатам приводит к разделению переменных, единичны. Кроме того, если заданный на бесконечности поток имеет сложную структуру, преобразование независимых переменных проблематично даже при обтекании одиночной частицы. В [2] частное решение уравнений Стокса построено в декартовых координатах. Поскольку давление p – гармоническая функция, его можно разложить по мультиполям, т.е. частным производным от $1/|\vec{x}|$. Тогда компоненты u_i вектора скорости удовлетворяют уравнению Пуассона, в правой части которого находится линейная комбинация мультиполей.

Иногда давление в жидкости не удовлетворяет уравнению Лапласа и указанного алгоритма для решения задачи об обтекании частиц недостаточно. Например, так обстоит дело, если вязкость η является переменной величиной. В этом случае и p , и u_i являются линейными комбинациями решений уравнений

$$\Delta f = F(\vec{x}), \tag{1.1}$$

где правая часть имеет вид обобщенного монома:

$$F(\vec{x}) = |\vec{x}|^\alpha x_{j_1} \dots x_{j_n}. \tag{1.2}$$

¹Доцент кафедры математики и теоретической механики, Мордовский государственный университет имени Н. П. Огарева, г. Саранск; syall@yandex.ru.

Здесь и далее предполагается, что вектор $\vec{x}$ имеет декартовы координаты x_i , $i = \overline{1, 3}$. И количество множителей-координат n , и степень α могут быть произвольными, причем α не обязано быть целым или положительным.

Целью данной работы является построение частных решений уравнения (1.1) с правой частью вида (1.2).

2. Представление решения в виде обобщенного полинома

Найдем частное решение (1.1), исходя из свойств правой части уравнения. Функция (1.2) симметрична по индексам $j_1, \dots, j_n$. Кроме того, поскольку координата $x_k \sim |\vec{x}|$, то $F(\vec{x})$ имеет порядок $|\vec{x}|^{\alpha+n}$. Поэтому будем искать функцию f , удовлетворяющую (1.1) и следующим дополнительным условиям:

Симметрия. f симметрична по индексам $j_1, \dots, j_n$. Если f включает в себя несколько слагаемых, то симметричным должно быть каждое из них.

Однородность. Если f включает несколько слагаемых, то они все имеют одинаковый порядок по $|\vec{x}|$.

Повышение степени. Взятие производной понижает степень выражения относительно переменной, по которой производится дифференцирование. Поэтому порядок f по $|\vec{x}|$ равен $\alpha + n + 2$.

Перечисленным условиям удовлетворяет, например, функция вида (1.2), если заменить $|\vec{x}|^\alpha$ на $|\vec{x}|^{\alpha+2}$. Но она не является решением уравнения (1.1). Учитывая соотношения

$$\frac{\partial x_i}{\partial x_s} = \delta_{is}, \quad \frac{\partial |\vec{x}|}{\partial x_s} = \frac{x_s}{|\vec{x}|}, \quad \Delta f = \frac{\partial}{\partial x_s} \frac{\partial}{\partial x_s} f,$$

нетрудно показать, что

$$\Delta(|\vec{x}|^\beta x_{i_1} \dots x_{i_m}) = \beta(\beta + 2m + 1)|\vec{x}|^{\beta-2} x_{i_1} \dots x_{i_m} + 2|\vec{x}|^\beta \delta_{(i_1 i_2} x_{i_3} \dots x_{i_m}). \quad (2.1)$$

Здесь и далее δ_{is} – символ Кронекера, равный 1, если $i = s$, и 0 – в противном случае. По повторяющимся индексам производится суммирование в пределах от 1 до 3, а по индексам, взятым в скобки, – симметризация выражения (без деления на количество слагаемых). Например, $x_{(i)}x_{(j)} = x_i x_j + x_j x_i$.

Таким образом, лапласиан функции (1.2) есть сумма выражений того же вида. Поэтому и решение (1.1) будем искать в виде обобщенного полинома:

$$f(\vec{x}) = \sum_{0 \leq k \leq n/2} A_k |\vec{x}|^{\alpha+2+2k} \delta_{(j_1 j_2} \dots \delta_{j_{2k-1} j_{2k}} x_{j_{2k+1}} \dots x_{j_n}), \quad A_k = \text{const} \quad (2.2)$$

Такая f удовлетворяет всем трем условиям, наложенным выше. Остается подобрать такие коэффициенты A_k , чтобы для указанной функции выполнялось и уравнение (1.1).

Подстановка (2.1) в формулу (2.2) дает

$$\Delta f = A_0(\alpha + 2)(\alpha + 2n + 3)|\vec{x}|^\alpha x_{j_1} \dots x_{j_n} + \dots,$$

многоточием обозначены слагаемые, содержащие хотя бы один символ Кронекера. Отсюда

$$A_0 = \frac{1}{(\alpha + 2)(\alpha + 2n + 3)} \quad (2.3)$$

Из (2.1) следует, что при вычислении Δf каждое выражение вида

$$A_k |\vec{x}|^{\alpha+2+2k} \delta_{(j_1 j_2 \dots j_{2k-1} j_{2k})} x_{j_{2k+1}} \dots x_{j_n} \quad (2.4)$$

дает два слагаемых, которые далее обозначены через $\Delta_I(k)$ и $\Delta_{II}(k)$. В первом из них степень $|\vec{x}|$ понижается с $\alpha + 2 + 2k$ до $\alpha + 2k$, но количество множителей-координат остается прежним. Во втором степень $|\vec{x}|$ сохраняется, но на 2 снижается число множителей вида x_i . Индексы «потерянных» координат замещаются умножением на δ_{is} . Таким образом, $\Delta_{II}(k)$ содержит $|\vec{x}|$ в такой же степени и имеет столько же множителей вида x_i , сколько $\Delta_I(k+1)$. Значит, A_k и A_{k+1} должны быть такими, чтобы эти выражения взаимно уничтожались. Выясним, сколько однотипных слагаемых содержит каждое из них.

До применения оператора Δ функция (2.4) содержала

$$\frac{1}{k!} C_n^{n-2k, 2, \dots, 2} = \frac{n!}{k!(n-2k)!2^k}$$

слагаемых. Это объясняется тем, что из индексов $j_1, \dots, j_n$ только $n - 2k$ приходятся на долю координат вектора $\vec{x}$ (и множители вида x_i можно менять местами). Оставшиеся $2k$ индексов распределены между k символами Кронекера; полиномиальный коэффициент необходимо поделить на $k!$, поскольку эти символы также можно менять местами. В выражении $\Delta_{II}(k)$ на один множитель вида δ_{is} больше, чем в (2.4). Два индекса для него надо выбрать из тех $n - 2k$, что ранее относились к множителям вида x_i . Таким образом, количество слагаемых в $\Delta_{II}(k)$ составляет

$$C_{n-2k}^2 \cdot \frac{1}{k!} C_n^{n-2k, 2, \dots, 2} = \frac{n!}{k!(n-2k-2)!2^{k+1}}.$$

Из (2.1) вытекает, что каждое из этих слагаемых надо умножить на 2.

С другой стороны, для получения $\Delta_I(k)$ надо в (2.4) понизить степень $|\vec{x}|$, не вводя новых символов Кронекера. Поэтому выражение $\Delta_I(k+1)$ содержит столько же слагаемых, сколько и выражение вида (2.4) с заменой k на $k+1$, т.е.

$$\frac{1}{(k+1)!} C_n^{n-2k-2, 2, \dots, 2} = \frac{n!}{(k+1)!(n-2k-2)!2^{k+1}}.$$

Согласно (2.1), каждое из них надо умножить на $\beta(\beta + 2m + 1)$, где $\beta = \alpha + 2 + 2(k+1)$ и $m = n - 2(k+1)$. Отсюда

$$2A_k \frac{n!}{k!(n-2k-2)!2^{k+1}} + (\alpha + 2k + 4)(\alpha + 2n - 2k + 1)A_{k+1} \frac{n!}{(k+1)!(n-2k-2)!2^{k+1}} = 0,$$

или, окончательно,

$$A_{k+1} = -\frac{2(k+1)}{(\alpha + 2k + 4)(\alpha + 2n - 2k + 1)} A_k, \quad 0 \leq k < n/2. \quad (2.5)$$

Сумма (2.2) коэффициенты которой определены равенствами (2.3) и (2.5), доставляет искомое частное решение уравнения (1.1) с правой частью (1.2). Полученные равенства были проверены при произвольных α и $n = \overline{0, 6}$.

3. Случай целых отрицательных степеней $|\vec{x}|$

Построенное выше решение может оказаться неприменимым, если α – целое отрицательное число: в этом случае знаменатели дробей (2.3) и (2.5) могут обратиться в нуль.

Рассмотрим, например, уравнения

$$\Delta f_2(\vec{x}) = \frac{1}{|\vec{x}|^2}, \quad \Delta f_3(\vec{x}) = \frac{1}{|\vec{x}|^3}.$$

Поскольку для них $\alpha = -2$ и $\alpha = -3$, соответственно, то коэффициент A_0 не определен. Однако переход к сферическим координатам позволяет найти частные решения, которые (как и правые части уравнений) зависят только от $|\vec{x}|$:

$$f_2(\vec{x}) = \ln |\vec{x}|, \quad f_3(\vec{x}) = \frac{\ln |\vec{x}|}{|\vec{x}|}.$$

Поэтому логично предположить, что если одно из выражений

$$\alpha + 2, \alpha + 2n + 3, \alpha + 2k + 4, \alpha + 2n - 2k + 1 \quad (3.1)$$

обращается в нуль, то разложение (2.2) должно быть дополнено слагаемыми вида

$$|\vec{x}|^\beta x_{i_1} \dots x_{i_m} \ln |\vec{x}|. \quad (3.2)$$

Отметим, что при $0 \leq k < n/2$ никакие два из выражений (3.1) не могут быть равны нулю одновременно.

Аналогично рассуждениям предыдущего пункта, предварительно вычислим

$$\begin{aligned} \Delta \left(|\vec{x}|^\beta x_{i_1} \dots x_{i_m} \ln |\vec{x}| \right) &= (2\beta + 2m + 1) |\vec{x}|^{\beta-2} x_{i_1} \dots x_{i_m} + \\ &+ \left(\beta(\beta + 2m + 1) |\vec{x}|^{\beta-2} x_{i_1} \dots x_{i_m} + 2 |\vec{x}|^\beta \delta_{(i_1 i_2} x_{i_3} \dots x_{i_m)} \right) \ln |\vec{x}| \end{aligned} \quad (3.3)$$

Следовательно, применение оператора Лапласа к функции (3.2) дает сумму выражений той же структуры. Поэтому, если какое-либо выражение (3.1) обращается в нуль, частное решение задачи (1.1), (1.2) может быть представлено суммой

$$f(\vec{x}) = \sum_{0 \leq k \leq n/2} \left(A_k + B_k \ln |\vec{x}| \right) |\vec{x}|^{\alpha+2+2k} \delta_{(j_1 j_2} \dots \delta_{j_{2k-1} j_{2k}} x_{j_{2k+1}} \dots x_{j_n}), \quad A_k, B_k = \text{const.} \quad (3.4)$$

Такая функция f удовлетворяет поставленному выше условию симметрии, а если не учитывать множитель $\ln |\vec{x}|$, то и двум остальным условиям. Величины A_k и B_k должны быть такими, чтобы эта функция удовлетворяла (1.1) с правой частью (1.2).

Пользуясь (2.1) и (3.3), можно попытаться получить для A_k и B_k рекуррентные соотношения, аналогичные (2.3) и (2.5) и пригодные для любых α и n . Однако это сопряжено с громоздкими комбинаторными вычислениями. Проще в каждом конкретном случае пользоваться методом неопределенных коэффициентов, подставляя (1.2) и (3.4) в (1.1). Для ускорения вычислений можно пользоваться следующим соображением. Если $\alpha + 2 \neq 0$ и $\alpha + 2n + 3 \neq 0$, то A_0 определяется формулой (2.3), а $B_0 = 0$. Аналогично, A_{k+1} можно выражать через A_k по формуле (2.5) до тех пор, пока она применима; соответствующие B_{k+1} равны нулю. Слагаемые, содержащие $\ln |\vec{x}|$, появляются лишь с того момента, как в (2.3) и (2.5) возникает деление на нуль.

Пример 3.1. Рассмотрим уравнение

$$\Delta f = \frac{x_{i_1}x_{i_2}x_{i_3}x_{i_4}}{|\vec{x}|^4}. \quad (3.5)$$

Для него $\alpha = -4$ и $n = 4$, поэтому коэффициент $A_0 = -1/14$ находится из (2.3). Поскольку $\alpha + 2k + 4 = 0$ уже при $k = 0$, то рекуррентное соотношение (2.5) неприменимо. Значит, частное решение (3.5) надо искать в виде

$$\begin{aligned} f = & \frac{1}{14}x_{i_1}x_{i_2}x_{i_3}x_{i_4}|\vec{x}|^{-2} + (A_1 + B_1 \ln |\vec{x}|)(\delta_{i_1i_2}x_3x_4 + \delta_{i_1i_3}x_2x_4 + \delta_{i_1i_4}x_2x_3 + \\ & + \delta_{i_2i_3}x_1x_4 + \delta_{i_2i_4}x_1x_3 + \delta_{i_3i_4}x_1x_2)|\vec{x}|^0 + (A_2 + B_2 \ln |\vec{x}|)(\delta_{i_1i_2}\delta_{i_3i_4} + \\ & + \delta_{i_1i_3}\delta_{i_2i_4} + \delta_{i_1i_4}\delta_{i_2i_3}). \end{aligned} \quad (3.6)$$

Здесь развернуты все слагаемые, симметризованные по индексам i_1, i_2, i_3, i_4 . Вычислив Δf , получим (выражения вновь свернуты для краткости записи):

$$\begin{aligned} \Delta f = & \frac{x_{i_1}x_{i_2}x_{i_3}x_{i_4}}{|\vec{x}|^4} + \left(5B_1 - \frac{1}{7}\right)\frac{1}{|\vec{x}|^2}\delta_{(i_1i_2}x_{i_3}x_{i_4)} + \\ & + (4A_1 + 6A_2 + 5B_2)\delta_{(i_1i_2}\delta_{i_3i_4)} + (4B_1 + 6B_2)\delta_{(i_1i_2}\delta_{i_3i_4)} \ln |\vec{x}|. \end{aligned}$$

Сравнивая полученное выражение с правой частью (3.5), получим систему линейных уравнений, имеющую решение $B_1 = 1/35$, $B_2 = -2/105$, $2A_1 + 3A_2 = 1/21$. Подставив эти коэффициенты в (3.6), найдем частное решение в виде

$$f = \frac{1}{14}\frac{x_{i_1}x_{i_2}x_{i_3}x_{i_4}}{|\vec{x}|^2} + \left(A_1 + \frac{1}{35} \ln |\vec{x}|\right)\delta_{(i_1i_2}x_{i_3}x_{i_4)} + \left(\frac{1}{3}\left(\frac{1}{21} - 2A_1\right) - \frac{2}{105} \ln |\vec{x}|\right)|\vec{x}|^2\delta_{(i_1i_2}\delta_{i_3i_4)}$$

Таким образом, существует целое семейство функций вида (3.4), удовлетворяющих (3.5).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Хаппель Дж. Гидродинамика при малых числах Рейнольдса / Дж. Хаппель, Г. Бреннер. – М. : Мир, 1976. – 632 с.
2. Мартынов С.И. Гидрологическое взаимодействие частиц / С.И. Мартынов // Известия РАН. Механика жидкости и газа. – 1998. – N 2. – С. 112–119.

Particular solutions of Poisson equation with special right-hand side

© A. O. Syromyasov²

Abstract. The paper deals with Poisson equation with right-hand side $|\vec{x}|^\alpha x_j \dots x_k$. The algorithm obtaining particular solutions of such equations is discussed.

Key Words: PDE, Poisson equation, analytical solution.

²Associate professor of Mathematics and Theoretical Mechanics Chair, Mordovian Ogaryov State University, Saransk; syal1@yandex.ru.

УДК 517.95

О разрешимости аналога третьей краевой задачи с граничным оператором дробного порядка

© Б. Х. Турметов¹, Б. Т. Торебек²

Аннотация. В работе исследуются вопросы разрешимости аналога третьей краевой задачи с граничным оператором дробного порядка.

Ключевые слова: оператор дробного дифференцирование, краевая задача, гармоническая функция.

1. Введение

Пусть $\Omega = \{x \in R^n : |x| < 1\}$ - n -мерный единичный шар, $n \geq 2$, $\partial\Omega = \{|x| = 1\}$ - единичная сфера. Пусть далее, функция $u(x)$ - гармоническая в шаре Ω , m - натуральное число, $r = |x|$, $\theta = \frac{x}{|x|}$, $0 < \alpha < 1$.

Рассмотрим оператор

$$D^\alpha[f](t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{d}{dt} \int_0^t (t-s)^{-\alpha} f(s) ds,$$

где $\Gamma(\alpha)$ - гамма-функция Эйлера. Оператор D^α - называется оператором дифференцирования порядка α в смысле Римана-Лиувилля (см. [1]).

Введем обозначения

$$B[u](x) = B^{\alpha_1}[u](x) = r^{\alpha_1} D^{\alpha_1}[u](x),$$

$$B^m[u](x) = B^{\alpha_1}[B^{\alpha_2} \dots B^{\alpha_m}[u](x)] = B^{\alpha_m}[B^{\alpha_{m-1}} \dots B^{\alpha_1}[u](x)], 0 < \alpha_j < 1, j = 1, 2, \dots, m.$$

Отметим, что аналогичные операторы с производными целого порядка в классе гармонических функций рассматривались в работах [2, 3], а в более общем случае для полигармонических функций в работе [4].

2. Свойства оператора B^m

Л е м м а 2.1. Пусть $0 < \alpha < 1$ и $H_k(x)$ - однородный гармонический полином степени k , при $k = 0, 1, \dots$. Тогда справедливо равенство $B[H_k](x) = \frac{\Gamma(k+1)}{\Gamma(k+1-\alpha)} H_k(x)$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Пусть $H_k(x)$ - однородный гармонический полином степени k и $k = 0, 1, \dots$. Тогда, используя связь гамма и бета функций Эйлера $B(\alpha, \beta) = \frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha+\beta)}$, и, в соответствии с определением оператора $B = B^\alpha[u](x) = r^\alpha D^\alpha[u](x)$, запишем

$$B[H_k](x) = \frac{r^\alpha}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{d}{dr} \int_0^r (r-\tau)^{-\alpha} H_k(\tau\theta) d\tau = \frac{r^\alpha H_k(\theta)}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{d}{dr} \int_0^r (r-\tau)^{-\alpha} \tau^k d\tau =$$

¹Профессор кафедры математики, Международный казахско-турецкий университет имени Х. А. Ясави, г. Туркестан, Казахстан; turmetovbh@mail.ru.

²Магистр-преподаватель кафедры математики, Международный казахско-турецкий университет имени Х. А. Ясави, г. Туркестан, Казахстан; turebekb85@mail.ru.

$$\begin{aligned}
&= \frac{r^\alpha H_k(\theta)}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{d}{dr} \left\{ r^{k+1-\alpha} \int_0^1 (1-\xi)^{-\alpha} \xi^k d\xi \right\} = \frac{r^k H_k(\theta) \Gamma(1-\alpha) \Gamma(k+1)}{\Gamma(1-\alpha) \Gamma(k+2-\alpha)} (k+1-\alpha) = \\
&= \frac{\Gamma(k+1)}{\Gamma(k+1-\alpha)} H_k(x).
\end{aligned}$$

Лемма доказана.

С л е д с т в и е 2.1. Пусть $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_m)$, $0 < \alpha_j < 1$ и $H_k(x)$ - однородный гармонический полином степени k . Тогда справедливо равенство

$$B^m[H_k](x) = \gamma_{k,m} H_k(x), \quad (2.1)$$

где обозначено

$$\gamma_{k,m} = \frac{\Gamma^m(k+1)}{\Gamma(k+1-\alpha_1) \cdots \Gamma(k+1-\alpha_m)}$$

Следствие доказывается последовательным применением леммы 2.1.

Т е о р е м а 2.1. Пусть $u(x)$ - гармоническая в шаре Ω функция, тогда функция $B^m[u](x)$ также является гармоническим в шаре Ω .

Д о к а з а т е л ь с т в о. Пусть $u(x)$ - гармоническая функция в шаре Ω . Тогда известно (см. [5]), что функция $u(x)$ представляется в виде

$$u(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{i=1}^{h_k} u_k^{(i)} H_k^{(i)}(x), \quad (2.2)$$

где $\{H_k^{(i)}(x), i = 1, \dots, h_k\}$ - полная система однородных гармонических полиномов, а $u_k^{(i)}$ - коэффициенты разложения (2.2). Известно, что $h_k = (1 + 2k/(n-2))C_{k+n-3}^{n-3} \sim 2k^{n-2}/(n-2)!$, $k \rightarrow \infty$. Более того, ряд (2.2) сходится абсолютно и равномерно по x при $|x| \leq \rho < 1$ и, значит, $\forall \rho < 1, \exists C_\rho, \forall x, |x| \leq \rho, |u_k^{(i)} H_k^{(i)}(x)| \leq C_\rho$. Применяя формально оператор B^m к ряду (2.2) и учитывая равенство (2.1), получим

$$B^m[u](x) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{i=1}^{h_k} \frac{\Gamma^m(k+1)}{\Gamma(k+1-\alpha_1) \cdots \Gamma(k+1-\alpha_m)} u_k^{(i)} H_k^{(i)}(x). \quad (2.3)$$

В силу асимптотической оценки [6, с.366] $\frac{\Gamma(k+1)}{\Gamma(k+1-\alpha_j)} \sim k^{\alpha_j}$ при $k \rightarrow \infty$, $0 < \alpha_j < 1$, $j = 1, \dots, m$ получаем $\gamma_{k,m} \sim k^{\alpha_1 + \dots + \alpha_m}$ когда $k \rightarrow \infty$ и значит $\lim_{k \rightarrow \infty} \sqrt[k]{h_k \gamma_{k,m}} = 1$. Поэтому, при $|x| \leq r\rho$ и $r < 1$

$$\sum_{k=0}^{\infty} \sum_{i=1}^{h_k} \gamma_{k,m} |u_k^{(i)} H_k^{(i)}(x)| \leq C_\rho \sum_{k=0}^{\infty} \gamma_{k,m} h_k r^k < \infty$$

и значит ряд (2.3) сходится абсолютно и равномерно по x при $|x| \leq r\rho < 1$, и его сумма представляет собой гармоническую функцию. В силу произвольности $\rho < 1$ функция $B^m[u](x)$ определена во всем шаре Ω .

Теорема доказана.

Л е м м а 2.2. Пусть $H_k(x)$ - однородный гармонический полином степени k при $k = 0, 1, \dots$, $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_m)$, $0 < \alpha_j < 1$. Тогда справедливо равенство

$$\frac{1}{\gamma_{k,m}} H_k(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha_1) \dots \Gamma(\alpha_m)} \int_0^1 ds_1 \int_0^1 ds_2 \dots \int_0^1 (1-s)^{\alpha-1} s^{-\alpha} H_k(sx) ds_m, \quad (2.4)$$

где $(1-s)^{\alpha-1} = (1-s_1)^{\alpha_1-1} \dots (1-s_m)^{\alpha_m-1}$, $s^{-\alpha} = s_1^{-\alpha_1} \dots s_m^{-\alpha_m}$, $sx = (s_1 \dots s_m x_1, \dots, s_1 \dots s_m x_n)$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Если $s = s_1 \dots s_m$, то в силу однородности полинома $H_k(x)$ имеем $H_k(sx) = s^k H_k(x)$, где $s^k = s_1^k s_2^k \dots s_m^k$ и, значит,

$$\begin{aligned} \int_0^1 ds_1 \int_0^1 ds_2 \dots \int_0^1 (1-s)^{\alpha-1} s^{-\alpha} H_k(sx) ds_m &= \int_0^1 ds_1 \int_0^1 ds_2 \dots \int_0^1 (1-s)^{\alpha-1} s^{k-\alpha} ds_m H_k(x) = \\ &= \int_0^1 (1-s_1)^{\alpha_1-1} s_1^{k-\alpha_1} ds_1 \dots \int_0^1 (1-s_m)^{\alpha_m-1} s_m^{k-\alpha_m} ds_m H_k(x) = H_k(x) \prod_{j=1}^m \frac{\Gamma(\alpha_j) \Gamma(k+1-\alpha_j)}{\Gamma(k+1)}. \end{aligned}$$

Отсюда следует, что

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Gamma(\alpha_1) \dots \Gamma(\alpha_m)} \int_0^1 ds_1 \int_0^1 ds_2 \dots \int_0^1 (1-s)^{\alpha-1} s^{-\alpha} H_k(sx) ds_m &= \\ &= H_k(x) \prod_{j=1}^m \frac{\Gamma(k+1-\alpha_j)}{\Gamma(k+1)} = \frac{1}{\gamma_{k,m}} H_k(x) \end{aligned}$$

и, значит, равенство (2.4) доказано.

Т е о р е м а 2.2. Пусть функция $u(x)$ - гармоническая в шаре Ω , $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_m)$, $0 < \alpha_j < 1$. Тогда в обозначениях леммы 2.2 для любого $x \in \Omega$ справедливо равенство

$$u(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha_1) \dots \Gamma(\alpha_m)} \int_0^1 ds_1 \int_0^1 ds_2 \dots \int_0^1 (1-s)^{\alpha-1} s^{-\alpha} B^m[u](sx) ds_m. \quad (2.5)$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Представим гармоническую в шаре Ω функцию $u(x)$ в виде ряда

$$u(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{i=1}^{h_k} u_k^{(i)} H_k^{(i)}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{i=1}^{h_k} \frac{1}{\gamma_{k,m}} \gamma_{k,m} u_k^{(i)} H_k^{(i)}(x). \quad (2.6)$$

Далее, учитывая равенства (2.1), (2.3) и равномерную сходимость ряда (2.4) по x при $|x| \leq \rho < 1$ (поэтому для этих $x \in \Omega$ суммирование по x и интегрирование по $s_1, \dots, s_m$ можно поменять местами) его можно привести к виду

$$u(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{i=1}^{h_k} \gamma_{k,m} u_k^{(i)} \frac{1}{\gamma_{k,m}} H_k^{(i)}(x) =$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{i=1}^{h_k} \frac{u_k^{(i)}}{\Gamma(\alpha_1) \dots \Gamma(\alpha_m)} \int_0^1 ds_1 \int_0^1 ds_2 \dots \int_0^1 (1-s)^{\alpha-1} s^{-\alpha} \gamma_{k,m} H_k^{(i)}(sx) ds_m = \\
&= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{i=1}^{h_k} \frac{u_k^{(i)}}{\Gamma(\alpha_1) \dots \Gamma(\alpha_m)} \int_0^1 ds_1 \int_0^1 ds_2 \dots \int_0^1 (1-s)^{\alpha-1} s^{-\alpha} B^m[H_k^{(i)}](sx) ds_m = \\
&= \frac{1}{\Gamma(\alpha_1) \dots \Gamma(\alpha_m)} \int_0^1 ds_1 \int_0^1 ds_2 \dots \int_0^1 (1-s)^{\alpha-1} s^{-\alpha} B^m \left[\sum_{k=0}^{\infty} \sum_{i=1}^{h_k} u_k^{(i)} H_k^{(i)} \right] (sx) ds_m = \\
&= \frac{1}{\Gamma(\alpha_1) \dots \Gamma(\alpha_m)} \int_0^1 ds_1 \int_0^1 ds_2 \dots \int_0^1 (1-s)^{\alpha-1} s^{-\alpha} B^m[u](sx) ds_m.
\end{aligned}$$

Теорема доказана.

Теорема 2.2, а точнее равенство (2.5) позволяет определить следующий оператор

$$B^{-m}[u](x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha_1) \dots \Gamma(\alpha_m)} \int_0^1 ds_1 \int_0^1 ds_2 \dots \int_0^1 (1-s)^{\alpha-1} s^{-\alpha} u(sx) ds_m, \quad (2.7)$$

где $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_m)$, $0 < \alpha_j < 1$, $(1-s)^{\alpha-1} = (1-s_1)^{\alpha_1-1} \dots (1-s_m)^{\alpha_m-1}$, $s^{-\alpha} = s_1^{-\alpha_1} \dots s_m^{-\alpha_m}$, $sx = (s_1 \dots s_m x_1, \dots, s_1 \dots s_m x_n)$.

Т е о р е м а 2.3. Если функция $u(x)$ - гармоническая в шаре Ω , тогда функция $B^{-m}[u](x)$ также является гармонической в шаре Ω .

Д о к а з а т е л ь с т в о. Непосредственным подсчетом находим, что в шаре Ω верно равенство

$$\Delta(B^{-m}[u](x)) = \frac{1}{\Gamma(\alpha_1) \dots \Gamma(\alpha_m)} \int_0^1 ds_1 \int_0^1 ds_2 \dots \int_0^1 (1-s)^{\alpha-1} s^{2-\alpha} \Delta u(sx) ds_m = 0, \quad x \in \Omega$$

Следовательно, функция $B^{-m}[u](x)$ - гармоническая в шаре Ω .

Теорема доказана.

Основное свойство оператора $B^{-m}[u](x)$ сформулировано в следующем утверждении.

Т е о р е м а 2.4. Если функция $u(x)$ - гармоническая в шаре Ω , то справедливы равенства $B^{-m}[B^m[u]](x) = u(x)$, $B^m[B^{-m}[u]](x) = u(x)$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Докажем первое равенство теоремы. Применим к функции $B^m[u](x)$ оператор B^{-m} . По определению оператора $B^{-m}[u](x)$ (2.7) и в соответствии с теоремой 2.2 будем иметь $B^{-m}[B^m[u]](x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha_1) \dots \Gamma(\alpha_m)} \int_0^1 ds_1 \int_0^1 ds_2 \dots \int_0^1 (1-s)^{\alpha-1} s^{-\alpha} B^m[u](sx) ds_m = u(x)$. Для доказательства второго равенства теоремы применим оператор $B = B^{\alpha_1}[u](x) = r^{\alpha_1} D^{\alpha_1}[u](x)$ к функции $B^{-m}[u](x)$. Будем иметь

$$B[B^{-m}[u]](x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha_1) \dots \Gamma(\alpha_m)} B \left[\int_0^1 ds_1 \int_0^1 ds_2 \dots \int_0^1 (1-s)^{\alpha-1} s^{-\alpha} u(sx) ds_m \right] =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{r^{\alpha_1}}{\Gamma(1-\alpha_1)\Gamma(\alpha_1)\cdots\Gamma(\alpha_m)} \frac{d}{dr} \int_0^r (r-\tau)^{-\alpha_1} \left[\int_0^1 ds_1 \int_0^1 ds_2 \cdots \int_0^1 (1-s)^{\alpha-1} s^{-\alpha} u(s\tau\theta) ds_m \right] d\tau = \\
&= \frac{1}{\Gamma(\alpha_1)\cdots\Gamma(\alpha_m)} \int_0^1 ds_1 \int_0^1 ds_2 \cdots \int_0^1 (1-s)^{\alpha-1} s^{-\alpha} \frac{r^{\alpha_1}}{\Gamma(1-\alpha_1)} \frac{d}{dr} \int_0^r (r-\tau)^{-\alpha_1} u(s\tau\theta) d\tau ds_m.
\end{aligned}$$

Далее, нетрудно убедиться в следующих равенствах

$$\begin{aligned}
&\frac{r^{\alpha_1}}{\Gamma(1-\alpha_1)} \frac{d}{dr} \int_0^r (r-\tau)^{-\alpha_1} u(s\tau\theta) d\tau \underset{s\tau=t}{=} \frac{r^{\alpha_1}}{\Gamma(1-\alpha_1)} \frac{d}{dr} \int_0^{rs} (r-t/s)^{-\alpha_1} u(t\theta) \frac{d\tau}{s} = \\
&= \frac{r^{\alpha_1} s^{\alpha_1-1}}{\Gamma(1-\alpha_1)} \frac{d}{dr} \int_0^{sr} (sr-t)^{-\alpha_1} u(t\theta) dt = \frac{(sr)^{\alpha_1}}{\Gamma(1-\alpha_1)} \frac{d}{d(sr)} \int_0^{sr} (sr-t)^{-\alpha_1} u(t\theta) dt = B[u](sx),
\end{aligned}$$

где учтено, что $\theta = \frac{x}{|x|} = \frac{sx}{|sx|}$.

Поэтому будем иметь

$$B[B^{-m}[u]](x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha_1)\cdots\Gamma(\alpha_m)} \int_0^1 ds_1 \int_0^1 ds_2 \cdots \int_0^1 (1-s)^{\alpha-1} s^{-\alpha} B[u](sx) ds_m.$$

Следовательно, вспоминая определение оператора $B^m[u](x) = B^{\alpha_m}[\cdots B^{\alpha_1}[u]](x)$, можно записать

$$B^m[B^{-m}[u]](x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha_1)\cdots\Gamma(\alpha_m)} \int_0^1 ds_1 \int_0^1 ds_2 \cdots \int_0^1 (1-s)^{\alpha-1} s^{-\alpha} B^m[u](sx) ds_m = u(x).$$

Второе равенство теоремы доказано.

Таким образом, из утверждения теоремы 2.4 следует, что операторы B^m и B^{-m} являются взаимно обратными на гармонических в шаре Ω функциях.

3. Постановка и решение основной краевой задачи.

Теперь перейдем к постановке и решению основной краевой задачи, включающей значение оператора B^m на границе.

Задача А. Найти гармоническую в шаре Ω функцию $u(x) \in C^2(\Omega) \cap C(\overline{\Omega})$, для которой функция $B^m[u](x)$ непрерывна в $\overline{\Omega}$ и удовлетворяет на сфере равенству

$$B^m[u](x) + au(x) = f(x), x \in \partial\Omega, \quad (3.1)$$

где a - действительное число.

Заметим, что аналогичные задачи для операторов целого порядка рассматривались в работах [2, 3, 4], а для операторов дробного порядка в работах [7, 8].

Пусть $v(x)$ - классическое решение задачи Дирихле

$$\begin{cases} \Delta v(x) = 0, x \in \Omega \\ v(x) = f(x), x \in \partial\Omega. \end{cases} \quad (3.2)$$

Приведем теорему единственности решения задачи А. Справедливо следующее утверждение.

Т е о р е м а 3.1. Пусть $a \in R$ и $f(x) \in C(\partial\Omega)$.

Тогда

- 1) если $a \geq 0$ или $a < 0$ и $a \neq \gamma_{k,m}, k = 0, 1, \dots$, то решение задачи А единственно;
- 2) если $a < 0$ и для некоторого $l \in N$, $a = -\gamma_{l,m}$, то решение задачи А единственно с точностью до однородного гармонического полинома $H_l(x)$ степени l .

Д о к а з а т е л ь с т в о. Предположим, что при $f(x) \equiv 0$ решение задачи А существует и пусть это $u(x)$. Обозначим $v(x) = B^m[u](x) + au(x)$.

Тогда в силу теоремы 2.1 функция $B^m[u](x)$ гармоническая в Ω , и поэтому $v(x)$ является решением задачи Дирихле (3.2) с граничным значением $f(x) \equiv 0$. В силу единственности решения задачи Дирихле $v(x) \equiv 0, x \in \overline{\Omega}$.

Следовательно, $B^m[u](x) + au(x) \equiv 0, x \in \overline{\Omega}$.

Разложим функцию $u(x)$ в ряд в виде (2). Тогда

$$\sum_{k=0}^{\infty} \sum_{i=1}^{h_k} [\gamma_{k,m} + a] u_k^{(i)} H_k^{(i)}(x) = 0.$$

Отсюда либо $\gamma_{k,m} + a = 0$, либо $u_k^{(i)} = 0$ для всех $k = 0, 1, \dots, i = 1, 2, \dots, h_k$.

Если $a \geq 0$ или $a < 0$ и $a \neq \gamma_{k,m}$, то очевидно, что $u_k^{(i)} = 0$.

Следовательно, в этом случае $u(x) = 0, x \in \Omega$.

Тогда по непрерывности $u(x) \equiv 0, x \in \overline{\Omega}$.

Если $a < 0$ и для некоторого $l \in N$, $a = -\gamma_{l,m}$, то $u_l^{(i)} \neq 0, i = 1, \dots, h_l$.

Тогда функция вида $u(x) = \sum_{i=0}^{h_l} u_l^{(i)} H_l^{(i)}(x) \equiv H_l(x)$ будет решением однородной задачи А.

Теорема доказана.

Теперь перейдем к изучению существования решения задачи А. Рассмотрим случай когда $a = 0$. Справедливо следующее утверждение.

Т е о р е м а 3.2. Пусть $a = 0$ и $f(x) \in C(\partial\Omega)$.

Тогда решение задачи А существует, единственно и представляется в виде

$$u(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha_1) \dots \Gamma(\alpha_m)} \int_0^1 ds_1 \int_0^1 ds_2 \dots \int_0^1 (1-s)^{\alpha-1} s^{-\alpha} v(sx) ds_m, \quad (3.3)$$

где $v(x)$ - решение задачи Дирихле (3.2).

Д о к а з а т е л ь с т в о. Пусть решение задачи А существует. Обозначим его $u(x)$. Применим к функции $u(x)$ оператор B^m и обозначим $B^m[u](x) = v(x)$. Ясно, что $v(x) \in C(\partial\Omega)$. Поскольку $u(x)$ - гармоническая функция в Ω , то в силу утверждения теоремы 2.1 функция $v(x)$ - тоже гармоническая в шаре Ω и $v(x)|_{\partial\Omega} = B^m[u(x)]|_{\partial\Omega} = f(x)$. Таким образом, функция $v(x)$ является решением задачи Дирихле (3.2). Причем, если $f(x) \in C(\partial\Omega)$, то решение этой задачи существует, единственно и $v(x) \in C(\overline{\Omega})$. Применим к равенству $B^m[u](x) = v(x)$ оператор B^{-m} из (2.7). Поскольку интеграл вида $\int_0^1 (1-\tau)^{\alpha-1} \tau^{-\alpha} v(\tau x) d\tau$ при $\alpha \in (0, 1)$ имеет слабые особенности при $\tau = 0$ и $\tau = 1$, то он является непрерывной функцией по $x \in \overline{\Omega}$ при непрерывной функции $v(x) \in C(\overline{\Omega})$. Значит, оператор B^{-m} применим к функциям из $C(\overline{\Omega})$. В силу первого равенства из теоремы 2.4 получим (3.3).

Пусть наоборот, функция $v(x)$ является решением задачи Дирихле (3.2) при $f(x) \in C(\partial\Omega)$. Ясно что $v(x) \in C(\overline{\Omega})$. Рассмотрим функцию $u(x) = B^{-m}[v](x)$. В силу второго

равенства из теоремы 2.4 будем иметь $B^m[u](x) = B^m[B^{-m}[v](x)] = v(x)$. Значит, функция $u(x)$ гармоническая в Ω и $B^m[u]|_{\partial\Omega} = v|_{\partial\Omega} = f(x)$.

Теорема доказана.

С л е д с т в и е 3.1. Пусть $a = 0$ и $f(x) \in C(\partial\Omega)$. Тогда решение задачи А можно представить в виде

$$u(x) = \int_{\partial\Omega} P_m(x, y) f(y) ds_y, \quad (3.4)$$

где функция $P_m(x, y)$ определяется равенством

$$P_m(x, y) = \frac{1}{\omega_n} \frac{1}{\Gamma(\alpha_1) \dots \Gamma(\alpha_m)} \int_0^1 ds_1 \int_0^1 ds_2 \int_0^1 (1-s)^{\alpha-1} s^{-\alpha} \frac{1-|sx|^2}{|sx-y|^n} ds_m. \quad (3.5)$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. В силу утверждения теоремы 3.2 решения задачи А представляется в виде (3.3).

Далее, представляя решение задачи Дирихле (3.2) в виде интеграла Пуассона

$$v(x) = \frac{1}{\omega_n} \int_{\partial\Omega} \frac{1-|x|^2}{|x-y|^n} f(y) ds_y$$

и меняя местами порядок интегрирования в (3.3) получаем равенство (3.4).

В дальнейшем символом C будем обозначать положительное постоянное, значение которой нас не интересует.

Л е м м а 3.1. Если $x, y \in \partial\Omega$, то справедливо равенство

$$|P_m(x, y)| \leq C |x-y|^{-(n-1-\alpha_1-\alpha_2-\dots-\alpha_m)}. \quad (3.6)$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Очевидно, что для ядра Пуассона $P(sx, y) = \frac{1}{\omega_n} \frac{1-|x|^2}{|x-y|^n}$ справедлива оценка

$$0 < P(x, y) \leq C |x-y|^{-(n-1)}.$$

Пусть $q = (x, y)$ и $f(s) = |sx-y|^2 = 1-2sq+s^2$, $x, y \in \partial\Omega$, $s = s_1 \dots s_{m-1} s_m$.

Если $q = 0$, то $f(s) = 1+s^2 \geq 1$, а если $q < 0$, то $-q > 0$ и $f(s) = 1-2sq+s^2 \geq 1+s^2 \geq 1$.

Следовательно, при $q \leq 0$ ядро $P_m(x, y)$ - ограничено.

Пусть $q > 0$. Рассмотрим интеграл

$$I = \frac{1}{\Gamma(\alpha_1) \dots \Gamma(\alpha_m)} \int_0^1 (1-s_m)^{\alpha_m-1} s_m^{-\alpha_m} |sx-y|^{-(n-1)} ds_m.$$

Представим этот интеграл в виде

$$I = \int_0^\varepsilon + \int_\varepsilon^1 = I_1 + I_2,$$

где ε - фиксированное число из $(0, 1)$. Оценим I_1 . Так как $0 \leq s_m \leq \varepsilon$, то

$$|sx - y| = |y - sx| \geq |y| - s|x| = 1 - s_1 \dots s_m \geq 1 - s_m \geq 1 - \varepsilon.$$

Отсюда

$$|sx - y|^{-(n-1)} \leq (1 - \varepsilon)^{-(n-1)} = C.$$

Тогда очевидно, что $I_1 \leq C$. Заметим, что в дальнейшем можно считать, что $s_j \geq \varepsilon$ при всех $j = 1, 2, \dots, m$.

Для оценки интеграла I_2 найдем экстремумы функции $f(s_m) = 1 - 2\tilde{s}qs_m + \tilde{s}^2 s_m^2$, $\tilde{s} = s_1 s_2 \dots s_{m-1}$ на отрезке $[\varepsilon, 1]$.

Вычислим производную $f'(s_m)$ и приравняем к нулю

$$f'(s_m) = 2s_m \tilde{s}^2 - 2\tilde{s}q = 0.$$

Тогда $s_m^* = \frac{q}{\tilde{s}}$. Следовательно, точками минимума функции $f(s)$ могут быть $s_m^1 = \varepsilon$, $s_m^2 = 1$, $s_m^3 = \frac{q}{\tilde{s}}$.

Вычислим значения функции $f(s_m)$ в этих точках:

$$f(\varepsilon) = 1 - 2\tilde{s}q\varepsilon + \tilde{s}^2 \varepsilon^2, f(1) = 1 - 2\tilde{s}q + \tilde{s}^2, f\left(\frac{q}{\tilde{s}}\right) = 1 - 2q^2 + q^2 = (1 - q)^2.$$

Так как при $\tilde{s} = q$ $f(1) = f\left(\frac{q}{\tilde{s}}\right)$ и при $\varepsilon = 1$ имеет место равенство $f(\varepsilon) = f(1)$, то экстремум функции $f(s_m)$ достаточно изучить в точке $s_m^2 = 1$.

Тогда

$$f(1) = 1 - 2\tilde{s}q + \tilde{s}^2 = |\tilde{s}x - y|^2.$$

Следовательно, в этом случае

$$\begin{aligned} I_2 &\leq |\tilde{s}x - y|^{-(n-1)} \int_{\varepsilon}^1 (1 - s_m)^{\alpha_m - 1} s_m^{-\alpha_m} ds_m \leq \\ &\leq C |\tilde{s}x - y|^{-(n-1)} \int_{\varepsilon}^1 (1 - s_m)^{\alpha_m - 1} ds_m = C |\tilde{s}x - y|^{-(n-1)} (1 - \varepsilon)^{\alpha_m}. \end{aligned}$$

Далее, так как

$$1 - \varepsilon = |y| - \varepsilon|x| \leq |y - \varepsilon x| = |\varepsilon x - y| \leq |x - y|,$$

то для I_2 имеем оценку

$$I_2 \leq C |\tilde{s}x - y|^{-(n-1)} |x - y|^{\alpha_m}.$$

Если проделаем эту процедуру вычисления по всем $s_j, j = \overline{1, m}$, то окончательно получаем оценку

$$0 < P_m(x, y) \leq C |x - y|^{-(n-1-\alpha_1-\alpha_2-\dots-\alpha_m)}.$$

Лемма доказана.

Теперь сформулируем основное утверждение.

Т е о р е м а 3.3. Пусть $a \in R, a \neq 0$ и $f(x) \in C(\partial\Omega)$.

Тогда

1) если $a > 0$ или $a < 0$ и $a \neq -\gamma_{k,m}, k = 0, 1, \dots$, то решение задачи А существует и единственно.

2) если $a < 0$ и для некоторого $l \in N_0$, $a = -\gamma_{l,m}$, то для существования решения задачи А необходимо и достаточно выполнения условия

$$\int_{\partial\Omega} f(x) H_l(x) ds_x = 0, \quad (3.7)$$

где $H_l(x)$ - однородный гармонический полином степени l , l такое, что $\gamma_{l,m} = -a$.

Если решение задачи существует, то оно единственно с точностью до однородного гармонического полинома степени l .

Доказательство. Решение задачи А будем искать в виде

$$u(x) = \int_{\partial\Omega} P_m(x, y) \mu(y) ds_y, \quad (3.8)$$

где $P_m(x, y)$ определяется равенством (3.5), а $\mu(x)$ - неизвестная функция.

Если $\mu(x) \in C(\partial\Omega)$, то в силу утверждения теоремы 3.1 $u(x)$ гармоническая функция и $B^m[u](x)|_{\partial\Omega} = \mu(x)$.

Поэтому подставляя функцию (3.8) в граничное условие (3.1) получаем интегральное уравнения относительно $\mu(x)$

$$\mu(x) + \int_{\partial\Omega} K(x, y) \mu(y) ds_y = f(x), x \in \partial\Omega, \quad (3.9)$$

где $K(x, y) = aP_m(x, y)$.

В силу оценки (3.6) $K(x, y)$ обладает свойствами полярного ядра и поэтому интегральному уравнению (3.9) можно применить альтернативу Фредгольма.

По теореме Фредгольма при $a > 0$ или $a < 0$ и $a \neq -\gamma_{k,m}$ в силу теоремы о единственности решение задачи существует при любом $f(x) \in C(\partial\Omega)$.

Если $a < 0$ и для некоторого l выполняется равенство $a = -\gamma_{l,m}$, то однородная задача А и следовательно и однородное интегральное уравнения соответствующее уравнению (3.8) имеет ненулевое решение вида $H_l(x)$ - однородный гармонический полином степени l .

Далее, так как для всех $x, y \in \partial\Omega$ имеет место равенство

$$\frac{1 - |sx|^2}{|sx - y|^n} = \frac{1 - s^2|y|^2}{|sy - x|^n},$$

то ядро $K(x, y) = K(y, x) = K^*(x, y)$ - симметрично.

Поэтому, при тех же значение a сопряженное однородное интегральное уравнение имеет ненулевое решение вида $H_l(x)$.

Следовательно, для разрешимости интегрального уравнения (3.8) необходимо и достаточно выполнение условия (3.7).

Теорема доказана.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Самко С.Г., Кильбас А.А., Маричев О.И. Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения. – Минск. Наука и Техника. – 1987. – 688с.

2. Баврин И.И. Операторы для гармонических функций и их приложения. //Дифференциальные уравнения. – 1985. – т.21. –№1. – С.9-15.
3. Карачик В.В., Турметов Б.Х. Об одной задаче для гармонического уравнения. //Изв. АН Уз ССР сер. Физ.-мат. наук, – 1990, – №4, – С.17-21.
4. Карачик В.В. Об одной задаче для полигармонического уравнения в шаре. //Сиб. мат. журнал, – 1991. – Т.32, –№5, – С.51-58.
5. Стейн И., Вейс Г. Введение в гармонический анализ на евклидовых пространствах. – М: «Мир», – 1974, – 333с.
6. Бари Н.К. Тригонометрические ряды. – М.: Физматгиз, 1961.
7. Турметов Б.Х. Об одной краевой задаче для гармонического уравнения //Дифференциальные уравнения, – Минск, – 1996. – Т.32, – №8, – С.1089-1092.
8. Турметов Б.Х. О гладкости решения одной краевой задачи с граничным оператором дробного порядка //Математические труды, – 2004. – Т.7, – №1, – Новосибирск, Изд-во Института математики, – С.189-199.

An analogue of the third boundary value problem with boundary operator of fractional order

© B. Kh. Turmetov³, B. T. Torebek⁴

Abstract. The article deals with the solvability of an analogue of the third boundary problem with boundary operator of fractional order.

Key Words: operator of fractional differentiation, boundary value problem, harmonic function.

³Professor of Mathematics Chair, International Kazakh-Turkish University after H.A. Yassawi, Turkestan, Kazakhstan; turmetovbh@mail.ru.

⁴Master-teacher of Mathematics Chair, International Kazakh-Turkish University after H. A. Yassawi, Turkestan, Kazakhstan; turebekb85@mail.ru.

УДК 541.127:519.688

Анализ алгоритмов решения задач химической кинетики с использованием GPGPU

© А. А. Юнусов¹, И. М. Губайдуллин², М. Р. Файзуллин³

Аннотация. В работе представлены результаты использования технологии ATI Stream для видеокарт персональных компьютеров при поиске значений кинетических констант сложных химических реакций. Номинальная производительность видеокарт по сравнению с центральными процессорами позволяет значительно ускорить и улучшить итоговые результаты расчётов.

Ключевые слова: параллельные алгоритмы, математическое моделирование, химическая кинетика, обратные задачи, системы обыкновенных дифференциальных уравнений, константы скоростей элементарных реакций, метод Рунге-Кутты.

1. Введение

Построение математической модели химической реакции является сложной задачей нахождения неизвестных кинетических констант и энергий активаций отдельных стадий реакции. Кинетические константы входят в математическое описание кинетики химического процесса, представляющее собой систему нелинейных дифференциальных уравнений первого порядка. Поиск неизвестных констант при наличии многостадийной схемы реакции, кинетических зависимостей и экспериментальных данных называется решением обратной задачи химической кинетики.

Если обозначить числом N количество стадий, а K количество неизвестных кинетических констант, то при использовании стандартной кинетической зависимости, построенной по принципу закона действующих масс, число K будет равно N , в случае, когда мы имеем только необратимые реакции, и K будет равно $2N$ при обратимости всех входящих в реакцию стадий. Таким образом, под решением обратной задачи будем понимать поиск точки (набор кинетических констант) в K -мерном пространстве, в которой достигается минимум между расчетными и экспериментальными данными.

В качестве примера рассматривалась реакция гидроалюминирования олефинов алкилаланами катализируемой Cp_2ZrCl_2 ([1]). Данная реакция имеет шесть стадий, необратимых среди них нет. Следовательно, количество кинетических констант равно 6. Для данной задачи решить систему дифференциальных уравнений аналитическим способом не представляется возможным ([2]), и значит, для минимизации исходного функционала необходимо использовать численные методы оптимизации ([4]).

Ввиду большой размерности задачи и возможности попадания функционала в локальные минимумы на гиперповерхности невязки данная задача требует значительных вычислительных мощностей. Рассматриваемая система не является жесткой, и возможно использование стандартных численных методов решения дифференциальных уравнений, таких как Рунге-Кутта с фиксированным или переменным шагом интегрирования.

¹Студент четвёртого курса кафедры математического моделирования, Башкирский государственный университет, г. Уфа; mc.yunusov@gmail.com.

²Старший научный сотрудник лаборатории математической химии, Институт нефтехимии и катализа РАН, г. Уфа; irekmars@mail.ru.

³Аспирант, Институт нефтехимии и катализа РАН, г. Уфа; fayzullin@gmail.com.

В качестве аппаратной части было решено использовать графические чипы (GPGPU) современных видеокарт персональных компьютеров. Недавно появившиеся технологии nVidia CUDA и ATI Stream позволяют задействовать вычислительные мощности видеочипов не только для расчета трассировки лучей в 3D-сценах и отрисовки миллионов полигонов в секунду, но и для выполнения специализированных вычислительных задач. При этом, следует заметить, что мощности в указанных чипах на несколько порядков превышают соответствующие мощности центральных процессоров. Видеочип содержит в себе несколько сотен простых потоковых процессоров, каждый из которых может работать независимо от других. Таким образом, графические процессоры специализированы для высокопараллельных вычислений, что и было использовано в данной работе.

2. Математическое описание

Выпишем систему дифференциальных уравнений ([3]) для реакции гидроалюминирования катализируемой Cp_2ZrCl_2 .

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dx_1}{dt} = -w_1 + w_5; \\ \frac{dx_2}{dt} = -3w_1 - 2w_2 - 3w_4 - w_5 + w_6; \\ \frac{dx_3}{dt} = \frac{1}{2}w_1 - \frac{1}{2}w_2 - \frac{1}{2}w_3 + \frac{1}{2}w_4; \\ \frac{dx_4}{dt} = 2w_1 + w_2 + w_4 - w_6; \\ \frac{dx_5}{dt} = 2w_1 + w_2 + 2w_4; \\ \frac{dx_6}{dt} = w_2; \\ \frac{dx_7}{dt} = -2w_3; \\ \frac{dx_8}{dt} = w_3 - w_4 - w_5; \\ \frac{dx_9}{dt} = w_3 + w_5 - w_6; \\ \frac{dx_{10}}{dt} = w_4 + w_6; \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} w_1 = k_1 x_1 x_2^3 \\ w_2 = k_2 x_2^2 \sqrt{x_3} \\ w_3 = k_3 \sqrt{x_3} x_7^2 \\ w_4 = k_4 x_2^3 x_8 \\ w_5 = k_5 x_2 x_8 \\ w_6 = k_6 x_9 x_4 \end{array} \right. \quad (2.1)$$

где x_i - концентрации вещества X_i , w_i - скорость i -й стадии; $x_7(0) = 0.4507$, $x_2(0) = 0.5413$, $x_1(0) = 0.008$, $x_i(0) = 0, i \neq 1, 2, 7$.

X_1 - Cp_2ZrCl_2 , X_2 - $ClAlBu_2^i$, X_3 - $Cp_2ZrHCl \cdot HAlBu_2^i$, X_4 - Cl_2AlBu^i , X_5 - C_4H_8 , X_6 - Cp_2ZrH_2 , X_7 - CH_2CHR , X_8 - $Cp_2Zr(CH_2CH_2R)Cl$, X_9 - $Bu_2^i(CH_2CH_2)R$, X_{10} - $Bu^iClAl(CH_2CH_2)R$.

Обратная задача заключается в нахождении кинетических констант k_i , минимизирующих функционал

$$EE = \sum_j \sum_i |x_i(t_j) - x_i^e(t_j)| \quad (2.2)$$

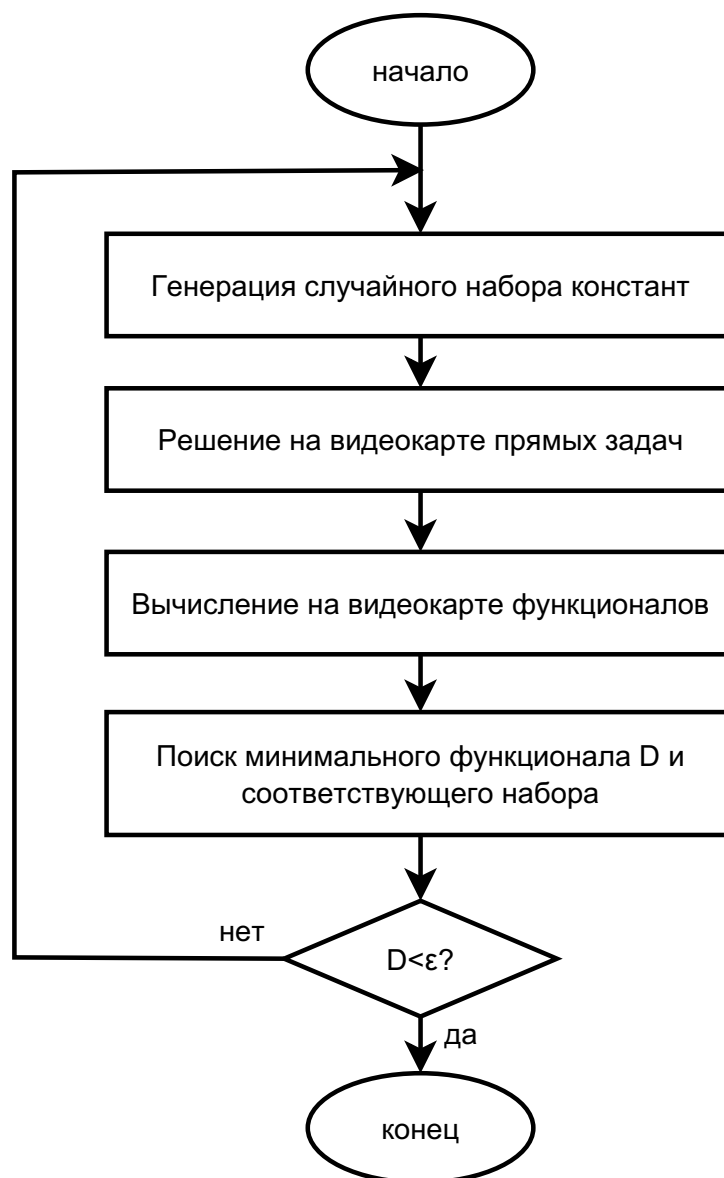
где t_j - моменты снятия натуральных экспериментальных данных, $x_i^e(t_j)$ - концентрация i -го вещества в момент времени t_j , полученная из опыта.

3. Методы решения

При использовании многопроцессорных систем или вычислительных кластеров часто применяют алгоритмы осуществляющие перебор возможных значений по мелкой сетке, либо используя различные стохастические методы. Подобные алгоритмы хорошо поддаются распараллеливанию и находят широкое применение в указанных аппаратных средствах.

Для указанной задачи поиска кинетических констант было рассмотрено несколько вариантов методов оптимизации: метод случайного поиска, генетический алгоритм со случайными отклонениями согласно распределению Коши, генетический алгоритм с мутацией в виде покоординатного спуска.

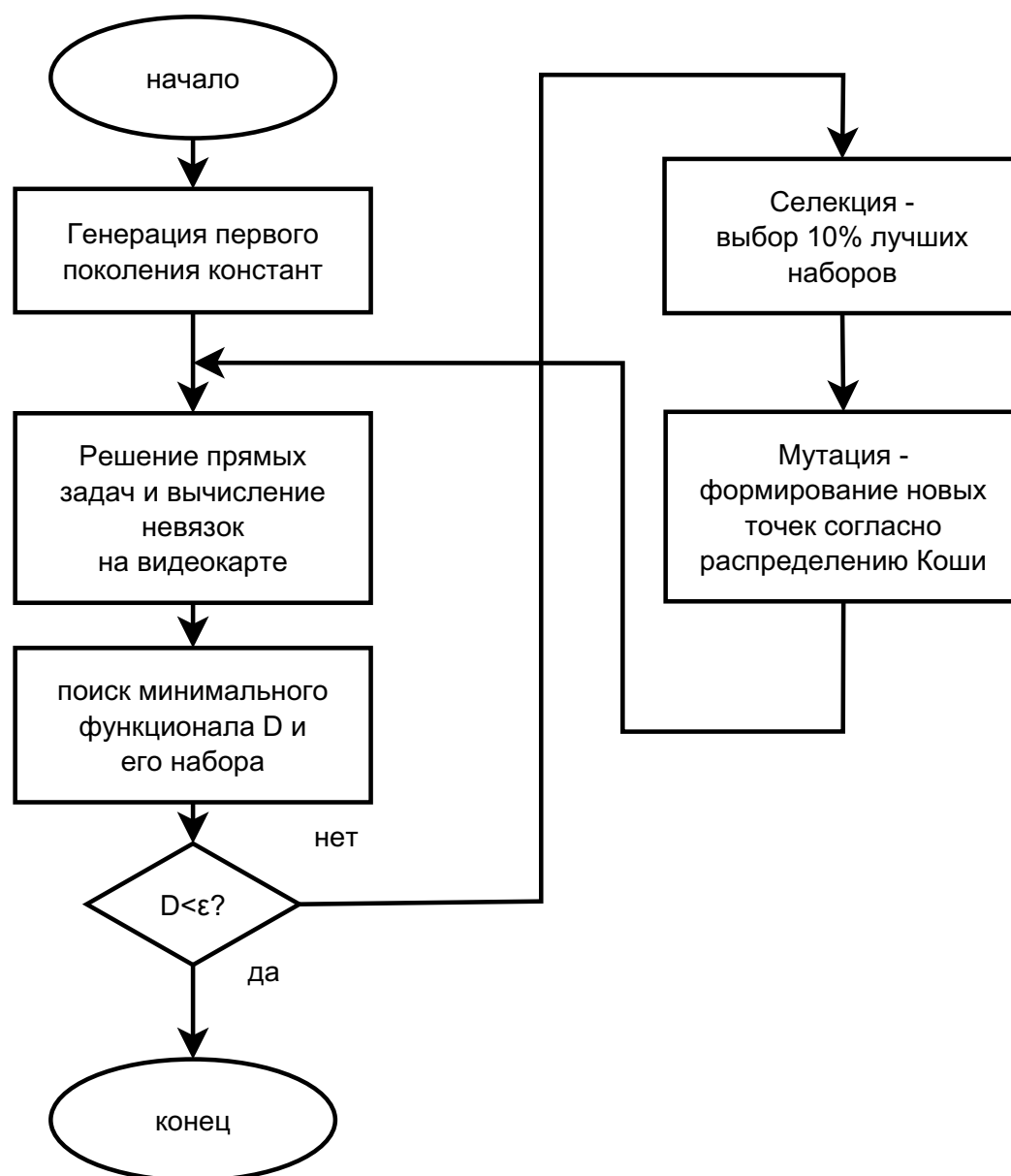
3.1. Метод случайного поиска



Р и с у н о к 3.1

Алгоритм метода случайного поиска

3.2. Генетический алгоритм со случайными отклонениями согласно распределению Коши:



Р и с у н о к 3.2

Алгоритм метода случайного поиска

3.3. Генетический алгоритм с мутацией в виде покоординатного спуска:

Отличие от предыдущего пункта заключается в добавлении промежуточного пункта **мутация**, находящегося после между этапами **селекции** и **формирования нового поколения**.

Данный метод, очень хорошо подходящий для решения обратных задач химической кинетики на суперкомпьютерах([5]), не подходит для видеокарт ввиду того, что процедура покоординатного спуска для разных наборов констант может происходить за разное время, а технология ATI Stream предполагает, что операции над потоками проводятся идентичные.

3.4. Краткое теоретическое сравнение методов

Первый из методов является наиболее простым и не подвержен проблеме попадания в локальный минимум, но основная причина его слабой пригодности является время работы ввиду большой размерности задачи.

Третий метод значительно быстрее первого и более сложен в алгоритмическом плане. В случае достаточно овражной гиперповерхности невязки возникает большая вероятность остановки процесса в одном из локальных минимумов.

Второй метод ввиду более простой логики и отсутствия множества условных операторов на этапе «мутации» является, на наш взгляд, лучшим вариантом и требует меньшее количество решений системы дифференциальных уравнений.

4. Условия вычислительного эксперимента

Вычислительный эксперимент проводился на следующем оборудовании:

GPU	ATI Radeon HD 4770
RAM	3Гбайт
CPU	AMD Phenom II X4 940 3ГГц

Прямая задача в эксперименте решалась методом Рунге-Кутты четвёртого порядка, практически приемливым шагом является $h = 0.0001$.

Генерация констант для первого поколения в генетическом алгоритме и генерация констант в алгоритме случайного поиска проводилась по формуле

$$k_i = rand() \% m + \frac{1}{rand() \% 100 + 1} \quad (4.1)$$

где $rand()$ - генератор случайных целых чисел, подчинённых равномерному распределению, $\%$ - операция взятия остатка от деления.

Размер популяции ввиду ограничений техники был взят 4000, таким образом элементарные шаги выполняются для 4000 наборов констант одновременно на видеокарте.

Распределение Коши было выбрано стандартным, потому что генерировались следующим образом

$$k_i^{new} = k_i^{old} + \operatorname{tg} \left(rand() \cdot \pi / RAND_MAX - \frac{\pi}{2} \right) \quad (4.2)$$

где $RAND_MAX$ - максимальное случайное число, которое может сгенерировать генератор случайных чисел.

5. Результаты и заключение

В работе были проанализированы два алгоритма решения обратных задач химической кинетики на GPGPU ATI. В дальнейшем планируется проведение вычислительного эксперимента на практически приемлемых значениях параметров алгоритмов для более точного их сравнения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Хилько А.В., Спивак С.И., Губайдуллин И.М., Парфенова Л.В. Индукционный период в реакциях гидроалюминирования олефинов алкилаланами. //Вестник Башкирского университета, серия “Химия”, 2008, Т. 13, №3(1), С 843-846.
2. Джонсон К. Численные методы в химии: Пер. с англ. – М. Мир. – 1983. - С.504
ОНТИ, 1935. – 336 с.
3. Яблонский Г.С., Спивак С.И. Математические модели химической кинетики. – М. Знание. – 1977. – С.5.
4. Полак Л.С., Гольденберг М.Я., Левицкий А.А. Вычислительные методы в химической кинетике. – М. Наука. – 1984. – С.135-136.
5. Линд Ю.Б.. Математическое моделирование обратных задач физической химии на основе параллельных вычислений. //Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. - Саранск.-2010.-179 с.

Analysis of algorithms for solving chemical kinetics problems using GPGPU

© A. A. Yunusov⁴, I. M. Gubaydullin⁵, M. R. Fayzullin⁶

Abstract. In the work presents results of using ATI Stream technology for videocards of PC to find values of kinetic constants of complex chemical reactions. Nominal performance graphics cards compared with the central processors can significantly accelerate and improve the outcome results of calculations.

Key Words: mathematical modelling, chemical kinetics, inverse problems, systems of ODE, speed constants of elemental reactions.

⁴Student, Bashkir State University, Ufa; mc.yunusov@gmail.com

⁵Chief researcher of laboratory of mathematical chemistry, Institute of Petrochemistry and Catalysis of RAS, Ufa; irekmars@mail.ru

⁶Graduate student, Institue of Petrochemistry and Catalysis of RAS, Ufa; fayzullin@gmail.com

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 517.9

Теоремы существования автоколебания

© В. В. Дикусар¹, Н. В. Зубов², С. В. Зубов³

Аннотация. В данной статье изучается поведение возмущенной системы при различных возможных возмущениях, или иначе сохраняется ли автоколебательный характер в системах дифференциальных уравнений. Изучается вопрос существования асимптотического автоколебания у систем дифференциальных уравнений.

Ключевые слова: Решение, расстояние, движение, множество, функция, ограничение.

Рассмотрим систему

$$\frac{dy_s}{dt} = f_s(y_1, \dots, y_{n+1}), \quad s = 1, \dots, n+1 \quad (1.1)$$

Пусть она имеет периодическое решение

$$y_s = \varphi_s(t), \quad s = 1, \dots, n+1 \quad (1.2)$$

периода 2π . Обозначим через M график этого периодического решения.

О п р е д е л е н и е 1.1. *Периодическое решение (1.2) называется периодическим автоколебанием системы (1.1), если решение (1.2) орбитально асимптотически устойчиво по Ляпунову: по любому $\varepsilon > 0$ можно указать $\delta > 0$ такое, что при $\rho(Y_0, M) < \delta$ будет $\rho(Y(t, Y_0), M) < \varepsilon$ при $t \geq 0$ и, кроме того, $\rho(Y(t, Y_0), M) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow +\infty$, где*

$$\rho(Y, M) = \inf_{\bar{Y} \in M} \|Y - \bar{Y}\|$$

является расстоянием от точки Y до множества M .

Будем изучать поведение возмущенной системы

$$\frac{dy_s}{dt} = f_s + g_s, \quad s = 1, \dots, n+1, \quad (1.3)$$

при различных возможных возмущениях $g_s = g_s(t, y_1, \dots, y_{n+1})$, $s = 1, \dots, n+1$, а именно, сохраняется ли автоколебательный характер в системах вида (1.3), иначе говоря, происходит ли затягивание движений этой системы в процесс автоколебания.

Это усложняется тем, что множество M , инвариантное для системы (1.1), уже не будет в общем случае инвариантным множеством для системы (1.3)

¹Профессор Вычислительного Центра им. А.А. Дородницына РАН, г. Москва; zubovnv@mail.ru

²Профессор Вычислительного Центра им. А.А. Дородницына РАН, г. Москва, zubovnv@mail.ru

³Доцент факультета ПМ-ПУ СПбГУ, Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург, a_v_zubov@mail.ru

О п р е д е л е н и е 1.2. Будем говорить, что система (1.3) имеет асимптотическое автоколебание M , если для любого $\varepsilon > 0$ и $t_0 \geq 0$ существует $\delta(t_0, \varepsilon) > 0$ такое, что при $\rho(Y_0, M) < \delta$ будет $\rho(Y(t, Y_0, t_0), M) < \varepsilon$ при $t \geq t_0 + T$ и, кроме того, $\rho(Y(t, Y_0, t_0), M) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow +\infty$, где

$$Y = Y(t, Y_0, t_0) \quad (1.4)$$

Т е о р е м а 1.1. Пусть 1) все решения (1.4), начинающиеся в некоторой окрестности множества M , ограничены;

2) существует функция $V(t, y_1, \dots, y_{n+1})$, обладающая свойствами $Y \equiv 0$ при $Y \in M$, $V > \alpha > 0$ при $\rho(Y, M) > \beta > 0$, $V \rightarrow 0$ равномерно относительно $t \geq 0$ при $\rho(Y, M) \rightarrow 0$;

3) полная производная функции V в силу системы (1.3) удовлетворяет условию $\frac{\partial V}{\partial t} + \sum_{s=1}^{n+1} (f_s + g_s) \frac{\partial V}{\partial y_s} = W + W_1$, где $W \equiv 0$ при $Y \in M$, $W < -\alpha < 0$ при $\rho(Y, M) > \beta > 0$, $W_1 \rightarrow 0$ при $t \rightarrow +\infty$ в некоторой ограниченной окрестности, содержащей ограниченное решение.

Тогда множество M является асимптотическим автоколебанием системы (1.3).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Андронов А. А., Витт А. А., Хайкин С. Э. Теория колебаний. М.: Наука, 1981.
2. Зубов В. И. Лекции по теории колебаний. М.: Наука, 1975.

The theorems of existing auto oscillation

© V. V. Dicusar ⁴, N. V. Zubov ⁵, S .V. Zubov ⁶

Abstract. In giving article is learning of behavior indignant system by different possible indignities, or differently is preserves auto oscillation character in systems of differential equations. Is learning the question of existing asymptotical auto oscillation on systems of differential equations.

Key Words: Solution, distance, motion, multitude, function, restriction.

⁴Professor of The computing center family A.A. Dorodnichina, Moscow, a_v_zubov@mail.ru

⁵Professor of The computing center family A.A. Dorodnichina, Moscow, zubovnv@mail.ru

⁶Associate professor of faculty Applied Mathematics - Process Control SPbGU, Saint-Petersburg State University, Saint-Petersburg; a_v_zubov@mail.ru

УДК 517.9

Несколько теорем о поведении семейств сильно сверхустойчивых матриц

© А. В. Зубов ¹, П. А. Зубов ², М. В. Стрекопытова ³

Аннотация. В данной статье предлагаются методы определения сильной сверхустойчивости у семейств нестационарных матриц, методы определения сверхустойчивости по расположению собственных чисел матрицы, а также условия обладания этим свойством у выпуклой комбинации матриц.

Ключевые слова: матрица, устойчивость, корень, норма, собственное число, полуплоскость.

О п р е д е л е н и е 1.3. Будем говорить, что матрица $A(t) \in C^{n \times n}$ обладает сильной сверхустойчивостью (если $A(t) \in R^{n \times n}$, то обладает устойчивостью по Важевскому), если её эрмитова составляющая является отрицательно определенной $H_1(t)$ в представлении

$$A(t) = (A(t) + A^*(t))/2 + (A(t) - A^*(t))/2 = H_1(t) + jH_2(t).$$

Из определения следует, что сильно сверхустойчивая матрица $A(t)$ и матрица $H_1(t)$ имеют собственные числа, локализованные в левой полуплоскости.

Т е о р е м а 1.2. Пусть матрицы $A_1(t), \dots, A_m(t)$ из $C^{n \times n}$ обладают сильной сверхустойчивостью, тогда их любая выпуклая комбинация

$$A(t) = \sum_{i=1}^m \alpha_i A_i(t), \quad \alpha_i \geq 0, \quad i = \overline{1, m}; \quad \sum_{i=1}^m \alpha_i = \alpha > 0$$

также обладает сильной сверхустойчивостью.

Доказательство основано на свойствах эрмитовых квадратичных форм и неравенств Гирша [2].

Т е о р е м а 1.3. Пусть матрица $A(t) \in C^{n \times n}$ обладает сильной сверхустойчивостью, а возмущение $\Delta \in C^{n \times n}$ фиксировано. Тогда семейство матриц $A(t) + \mu\Delta$, $\mu > 0$, является сильно сверхустойчивым, если

$$\mu < \left(\begin{matrix} \{l\}t \geq 0 \\ 1 \leq i \leq n \end{matrix} \right)$$

$$\{\min(\infty \mu_i(t))\} \|\delta\|,$$

где $\mu_i(t)$ - собственные числа матрицы $A(t) + A^*(t)$, $\|\Delta\|$ - спектральная норма.

Теорема 2 верна для $A(t) \in R^{n \times n}$ устойчивой по Важевскому и $\Delta \in R^{n \times n}$.

¹Доцент факультета ПМ-ПУ СПбГУ, Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург; a_v_zubov@mail.ru

²Ассистент факультета ПМ-ПУ СПбГУ, Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург; a_v_zubov@mail.ru

³Ассистент факультета ПМ-ПУ СПбГУ, Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург; a_v_zubov@mail.ru

З а м е ч а н и е 1.1. Для вещественной матрицы $A(t)$ из ее сверхустойчивости, т. е. когда $A(t)$ имеет отрицательное диагональное преобладание по строке, не следует, что матрица $A(t)$ имеет сильную сверхустойчивость. Обратно, из сильной сверхустойчивости, вообще говоря, не следует отрицательное диагональное преобладание (сверхустойчивость).

То же справедливо для нестационарных комплексных матриц, если рассматривать отрицательное диагональное преобладание по реальной части элементов на диагонали.

О п р е д е л е н и е 1.4. Для сильно сверхустойчивых матриц область локализации спектров $A(t)$ и $H_1(t)$ целиком находится в левой полуплоскости, т. к. квадратичная форма с матрицей $H_1(t)$ является отрицательно определенной, чего может не быть, если матрица сверхустойчива как для вещественного, так и для комплексного случаев.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дикусар В. В., Зеленков Г. А., Зубов Н. В. Методы анализа робастной устойчивости и неустойчивости. - М.: ВЦ РАН, 2007.
2. Маркус М., Минк Х. Обзор по теории матриц и матричных неравенств. - М.: Наука, 1972.
3. Поляк Б. Т., Щербаков П. С. Робастная устойчивость и управление. - М.: Наука, 2002.
4. Зеленков Г.А., Зубов Н.В., Черноглазов Д.Г., Неронов В.Ф. Оценка вещественного радиуса робастной устойчивости для семейства матриц, устойчивых по Важевскому. Труды Института системного анализа РАН "Динамика неоднородных систем"Выпуск 31(1). - М: ЛКИ, 2007, с. 162-167.

Several theorems about behavior family powerful above stability matrix

© A. V. Zubov⁴, P.A. Zubov⁵, M.V. Strechepitova⁶

Abstract. In giving article is propose methods of definition strong stability by family no stationary matrixs, methods of definition above stability on arrangement property numbers of matrix, and so also conditions of possessing this property at combination of matrixs.

Key Words: matrix, stability, root, quota, property number, flatness.

⁴Associate professor of faculty Applied Mathematics - Process Control SPbGU, Saint-Petersburg State University, Saint-Petersburg; a_v_zubov@mail.ru

⁵Assistant of faculty Applied Mathematics - Process Control SPbGU, Saint-Petersburg State University, Saint-Petersburg; a_v_zubov@mail.ru

⁶Assistant of faculty Applied Mathematics - Process Control SPbGU, Saint-Petersburg State University, Saint-Petersburg; a_v_zubov@mail.ru

Правила оформления рукописей для публикации в журнале «Журнал СВМО»

Обращаем Ваше внимание на то, что указанные ниже правила должны выполняться абсолютно точно. В случае, если правила оформления рукописи не будут выполнены, Ваша статья не будет опубликована.

Текст доклада должен быть набран в издательской системе $\TeX$ (или одном из ее клонов). Для верстки рукописи следует использовать преамбулу, которую можно получить на сайте <http://www.svmo.ru>.

Объем статьи не должен превышать 10 страниц. Текст статьи должен быть помещен в файл с именем <фамилия автора>.tex (который включается командой `\input` в преамбуле). Например,

`\input{voskresensky.tex}`

Содержание преамбулы **изменять нельзя**. Определение новых команд автором статьи **не допускается** для предупреждения конфликтов имен с командами, которые могли бы быть определены в статьях других авторов.

Внимание! Новые правила. Для оформления заголовка статьи на русском языке следует использовать команду `\headerRus`. Эта команда имеет следующие аргументы:

`\headerRus{УДК}{название статьи}{автор(ы)}{Автор1\footnote{Должность, место работы, город; e-mail.}, Автор2\footnote{Должность, место работы, город; e-mail.}}{Аннотация}{Ключевые слова}`

Для оформления заголовка статьи на английском языке следует использовать команду `\headerEn`. Эта команда имеет следующие аргументы:

`\headerEn{название статьи} {Автор1\footnote{Должность, место работы, город; e-mail.}, Автор2\footnote{Должность, место работы, город; e-mail.}}{Аннотация}{Ключевые слова}`

Если статья на английском языке, то для оформления заголовка статьи необходимо использовать команду `\headerFirstEn` с такими же параметрами, как для команды `\headerRus`.

Статья может содержать подзаголовки любой вложенности. Подзаголовки самого верхнего уровня вводятся при помощи команды `\sect` с одним параметром:

`\sect{Заголовок}`

Подзаголовки более низких уровней вводятся как обычно командами `\subsection`, `\subsubsection` и `\paragraph`.

Следует иметь в виду, что вне зависимости от уровня вложенности подзаголовков в Вашей статье, нумерация объектов (формул, теорем, лемм и т.д.) всегда будет двойной и будет подчинена подзаголовкам самого верхнего уровня.

Для оформления теорем, лемм, предложений, следствий, определений, замечаний и примеров следует использовать соответственно окружения **Th**, **Lemm**, **Prop**, **Cor**, **Defin**, **NB** и **Example**. Если в Вашей статье приводятся доказательства утверждений, их следует окружить командами `\proof` и `\proofend` (для получения строк 'Доказательство.' и 'Доказательство закончено.' соответственно).

Для обозначения пространств следует использовать команды `\R`, `\Rn`, `\C`, `\Z`, `\N` и т.д.

Для вставок букв φ и ε необходимо использовать команды `\phi`, `\epsilon` соответственно. Символы частных производных $\frac{\partial}{\partial x_i}$ и $\frac{\partial u}{\partial x_i}$ вставляются командами `\px{i}` и `\pxtog{u}{i}`.

Для вставок букв кириллицы в формулы следует использовать команды `\textrm`, `\textit`. Например, для вставок формул Γ_i , $\mathcal{D}_i$ в текст статьи необходимо набрать команды `\textrm{\Gamma}_i`, `\textit{\mathcal{D}}_i`.

Для нумерования формул и создания последующих ссылок на эти формулы необходимо использовать соответственно команды `\label{метка}` и `\eqref{метка}`, где в качестве метки нужно использовать строку следующего вида: 'Фамилия_АвтораНомер_Формулы'. Например, формулу (14) в статье Иванова нужно пометить `\label{ivanov14}`, теорему 5 из этой статьи — `\label{ivanovt5}` и т.п. (Для ссылок на теоремы, леммы и другие объекты, отличные от формул, нужно использовать команду `\ref{метка}`).

Для вставки в текст статьи рисунков необходимо пользоваться следующими командами:

а) вставка занумерованного рисунка без подписи и с указанием степени сжатости

`\insertpicture{метка}{имя_файла.eps}{степень_сжатия}`

где `степень_сжатия` число от 0 до 1.

б) вставка занумерованного рисунка с подписью

`\insertpicturewcap{метка}{имя_файла.eps}{подпись_под_рисунком}`

в) вставка занумерованного рисунка с подписью и с указанием степени сжатости

`\insertpicturecapscale{метка}{имя_файла.eps}{степень_сжатия}`
`{подпись_под_рисунком}`

г) вставка рисунка без номера под рисунком, но с подписью или нет

`\insertpicturenonum{имя_файла.eps}{степень_сжатия}`
`{подпись_под_рисунком}`

Все вставляемые картинки должны находиться в файлах в формате EPS (Encapsulated PostScript).

Внимание! Новые правила. Для оформления списка литературы на русском языке следует использовать окружение `thebibliography`.

Для оформления списка литературы на английском языке следует использовать окружение `thebibliographyEn`.

Сам список оформляется в виде последовательности команд `\bibitem`, имеющих один параметр:

`\bibitem{метка для ссылки на источник}`

Для приведенного выше примера в качестве метки для пункта 7 в списке литературы нужно использовать строку 'ivanovb7'. Для ссылок на элементы списка литературы необходимо использовать команду `\cite` или `\pgcite` (параметры см. в преамбуле).

Метки всех объектов статьи должны быть уникальными.

Компиляция журнала производится при помощи MiKTeX 2.2, дистрибутив которого можно получить на сайте <http://www.miktex.org>.

Алфавитный указатель

Анкилов А. В.	18	Миникаев Р. Ф.	86
Ахматсафина Э. Р.	43	Мифтахов Э. Н.	96
Ахметов И. В.	50	Моторина Д. Ю.	102
Ахтямов А. М.	37	Мустафина С. А.	122
Аюпова А. Р.	37	Насырова Л. И.	96
Байтимерова А. И.	122	Перегудова О. А.	28
Балаев А. В.	50,55	Попов В. Н.	111
Басыров И. Ф.	133	Решетников Ю. А.	18
Вельмисов П. А.	18	Сафуанова Н. М.	55
Губайдуллин И. М.	50,77,146	Степашина Е. В.	122
Дикусар В. В.	153	Стрекопытов С. А.	65
Дюба Е. С.	59	Стрекопытова М. В.	156
Зубов А. В.	156	Сыромясов А. О.	129
Зубова А. Ф.	65	Тестова И. В.	111
Зубов И. В.	65	Торребек Б. Т.	135
Зубов Н. В.	153	Треногин В. А.	8
Зубов П. А.	156	Турметов Б. Х.	135
Зубов С. В.	153	Файзуллин М. Р.	146
Ким-Тян Л. Р.	8	Юшканов А. А.	111
Логинов Б. В.	8	Юнусов А. А.	146
Мартыненко Ю. В.	71	Якупов З. Я.	86
Масков Д. Ф.	77		

Для заметок

Для заметок

Для заметок