ISSN 2079 – 6900

ЖУРНАЛ СРЕДНЕВОЛЖСКОГО МАТЕМАТИЧЕСКОГО ОБЩЕСТВА

Том 14, № 4

СВМО

2012

Средневолжское математическое общество

Национальный исследовательский
Мордовский государственный университет
имени Н. П. Огарёва

Журнал Средневолжского математического общества

Том 14, № 4

Издается с декабря 1998 года
Выходит четыре раза в год

Саранск

2012

«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», Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Мордовский государственный университет имени Н. П. Огарёва».

Журнал Средневолжского математического общества. Том 14, № 4

Компьютерная верстка: Атряхин В. А.
Корректоры: Егорова Д. К., Пескова Е. Е.

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

Адрес редакции: 430000, г. Саранск, ул. Большевистская, 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 и на сайте Научной электронной библиотеки elibrary.ru

Содержание

Краткие сообщения

От редакции

В четвертом номере 14-го тома публикуются работы ведущих учёных и молодых исследователей, многие из которых являющихся постоянными участниками конференции «Дифференциальные уравнения и их приложения в математическом моделировании» с участием зарубежных ученых. Конференция проводится национальным исследовательским Мордовским государственным университетом им. Н.П. Огарёва и Средневолжским математическим обществом при поддержке РФФИ (грант № 12-01-06069 г). Все статьи имеют положительные рецензии, а сам журнал доступен по подписке через каталог «Почта России» и в сети Internet на сайте Elibrary.ru.

Редакция журнала искренне желает авторам крепкого здоровья и творческих успехов!

УДК УДК 517.938

Эквивалентность потоков Морса-Смейла с тремя неподвижными точками на 4-мерных многообразиях

© Е. В. Жужома[1], В. С. Медведев[2]

Аннотация. Статья посвящена вопросу топологической классификации потоков Морса-Смейла с тремя критическими точками на замкнутых 4-мерных многообразиях. Доказано, что если f_1^t, f_2^t – потоки Морса-Смейла, неблуждающее множество которых состоит из трех точек, на замкнутых четырехмерных многообразиях M_1^4, M_2^4 соответственно, то f_1^t, f_2^t топологически эквивалентны.

Ключевые слова: топологическая классификация, потоки Морса-Смейла, 4-мерные многообразия

Пусть f^t - поток Морса-Смейла (основные понятия и факты теории динамических систем см. в [1], [18]) на замкнутом n-мерном ($n \geq 3$) многообразии M^n. В [14] было доказано существование замкнутых n-многообразий (и исследование таких многообразий), допускающих функции Морса ровно с тремя критическими точками. В частности, было доказано, что размерность $n = \dim M^n$ многообразия может принимать только одно из следующих значений $n \in \{2, 4, 8, 16\}$. Из [14], [17] вытекает существование потоков Морса-Смейла ровно с тремя критическими точками на замкнутых многообразиях с указанными размерностями. Известно [14], что M^2 является проективной плоскостью. Потоки Морса-Смейла с тремя критическими точками на проективной плоскости топологически эквивалентны. Настоящая статья посвящена вопросу топологической классификации потоков Морса-Смейла с тремя критическими точками на замкнутых 4-мерных многообразиях. Основной результат содержится в следующей теореме.

Теорема 1.1. *Пусть f_1^t, f_2^t – потоки Морса-Смейла, неблуждающее множество которых состоит из трех точек, на замкнутых четырехмерных многообразиях M_1^4, M_2^4 соответственно. Тогда f_1^t, f_2^t топологически эквивалентны. В частности, многообразия M_1^4, M_2^4 гомеоморфны.*

Сперва рассмотрим в евклидовом пространстве $\mathbb{R}^n$ с координатами $(x_1, \ldots, x_n)$, векторное поле $\vec{V}_s$, которое задается системой дифференциальных уравнений

$$\dot{x}_1 = -x_1, \ldots, \dot{x}_k = -x_k, \quad \dot{x}_{k+1} = x_{k+1}, \ldots, \dot{x}_n = x_n. \tag{1.1}$$

Ясно, что начало координат $O = (0, \ldots, 0)$ является седлом поля $\vec{V}_s$ с k-мерной устойчивой сепаратрисой $W^s(O)$ и $(n-k)$-мерной неустойчивой сепаратрисой $W^u(O)$, где $W^s(O) = \{(x_1, \ldots, x_n) \,|\, x_{k+1} = 0, \ldots, x_n = 0\} \subset \mathbb{R}^n$, $W^u(O) = \{(x_1, \ldots, x_n) \,|\, x_{k+1} = 0, \ldots, x_n = 0\} \subset \mathbb{R}^n$. В [7] было показано, что функция $F(x_1, \ldots, x_n) = \sum_{i=1}^k x_i^2 \sum_{j=k+1}^n x_j^2$ является интегралом системы (1.1).

Из вида F следует, что для любого $c > 0$ гиперповерхность $F = c$ является $(n-1)$-мерным многообразием, которое мы обозначим через H_c^{n-1}. Это многообразие разбивает $\mathbb{R}^n$ на два открытых множества

$$\{\vec{x} = (x_1, \ldots, x_n) \,|\, F(\vec{x}) < c\} \stackrel{\text{def}}{=} U_0, \quad \{\vec{x} = (x_1, \ldots, x_n) \,|\, F(\vec{x}) > c\} \stackrel{\text{def}}{=} U_\infty.$$

[1] профессор, Нижегородский государственный педагогический университет, Нижний Новгород; zhuzhoma@mail.ru.

[2] старший научный сотрудник, НИИ ПМК при ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород; medvedev@unn.ac.ru.

Объединение $W^s(O)\cup W^u(O)$ является интегральной гиперповерхностью, определяемой равенством $F=0$. Поскольку $O\in W^s(O)\cup W^u(O)$, то $O\in U_0$. Таким образом, U_0 - инвариантная окрестность седла O, которую мы будем называть *специальной.*

Рассмотрим $(n-1)$-мерное многообразие $C^{n-1}_{1,k}(r)=\{(x_1,\dots,x_n)\mid \sum_{i=1}^k x_i^2=r^2\}$, $r>0$. Пересечение $C^{n-1}_{1,k}(r)\cap H^{n-1}_c$ есть множество точек, координаты которых удовлетворяют равенствам $x_1^2+\dots+x_k^2=r^2$, $r^2(x_{k+1}^2+\dots+x_n^2)=c$. Поэтому $C^{n-1}_{1,k}(r)\cap H^{n-1}_c$ естественным образом гомеоморфно прямому произведению сфер $S^{k-1}_{1,k}\times S^{n-k-1}_{k+1,n}$, где

$$S^{k-1}_{1,k}=\{(x_1,\dots,x_k,0,\dots,0)\mid \sum_{i=1}^k x_i^2=r^2\}\subset\mathbb{R}^k_{1,k},$$

$$S^{n-k-1}_{k+1,n}=\{(0,\dots,0,x_{k+1},\dots,x_n)\mid \sum_{j=k+1}^n x_j^2=\frac{c}{r^2}\}\subset\mathbb{R}^{n-k}_{k+1,n}.$$

Согласно [7], каждая траектория векторного поля $\vec{V}_s$, принадлежащая H^{n-1}_c, пересекает $C^{n-1}_{1,k}(r)\cap H^{n-1}_c$ ровно один раз, причем квази-трансверсально[3]. Поэтому H^{n-1}_c диффеоморфно $S^{k-1}_{1,k}\times S^{n-k-1}_{k+1,n}\times\mathbb{R}$.

Обозначим через $clos\ N$ топологическое замыкание множества N.

Л е м м а 1.1. *Пересечение $(clos\ U_0)\cap C^{n-1}_{1,k}$ гомеоморфно прямому произведению*

$$S^{k-1}_{1,k}\times D^{n-k}_{k+1,n},\ \ \text{где}\ D^{n-k}_{k+1,n}=\{(x_1,\dots,x_n)\mid x_{k+1}^2+\dots+x_n^2\le\frac{c}{r^2}\}$$

диффеоморфно $(n-k)$-мерному замкнутому шару. Более того, $(clos\ U_0)\cap C^{n-1}_{1,k}$ разбивает $clos\ U_0$ на две компоненты, и векторное поле $\vec{V}_s$ на множестве $(clos\ U_0)\cap C^{n-1}_{1,k}$ направлено внутрь компоненты, в которой лежит седло O.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Первая часть утверждения следует из уравнений, задающих $C^{n-1}_{1,k}$ и H^{n-1}_c. Для доказательства второй части утверждения заметим, что $C^{n-1}_{1,k}$ разбивает $\mathbb{R}^n$ на две компоненты, причем, в силу (1.1), векторное поле $\vec{V}_s$ на $C^{n-1}_{1,k}$ направлено внутрь компоненты, в которой лежит седло O. Отсюда вытекает требуемое утверждение. □

Аналогично многообразию $C^{n-1}_{1,k}(r)$ рассмотрим $(n-1)$-мерное многообразие

$$C^{n-1}_{k+1,n}\left(\frac{\sqrt{ec}}{r}\right)=\{(x_1,\dots,x_n)\mid \sum_{j=k+1}^n x_i^2=\frac{ec}{r^2}\}.$$

Пересечение $C^{n-1}_{k+1,k}\left(\frac{\sqrt{ec}}{r}\right)\cap H^{n-1}_c$ есть множество точек, координаты которых удовлетворяют равенствам $x_1^2+\dots+x_k^2=\frac{r^2}{e}$, $r^2(x_{k+1}^2+\dots+x_n^2)=\frac{ec}{r^2}$. Поэтому $C^{n-1}_{k+1,n}\left(\frac{\sqrt{ec}}{r}\right)\cap H^{n-1}_c$ естественным образом гомеоморфно прямому произведению сфер $S^{k-1}_{1,k}\left(\frac{r}{\sqrt{e}}\right)\times S^{n-k-1}_{k+1,n}(\frac{\sqrt{ec}}{r})$, где

$$S^{k-1}_{1,k}\left(\frac{r}{\sqrt{e}}\right)=\{(x_1,\dots,x_k,0,\dots,0)\mid \sum_{i=1}^k x_i^2=\frac{r^2}{e}\}\subset\mathbb{R}^k_{1,k},$$

$$S^{n-k-1}_{k+1,n}\left(\frac{\sqrt{ec}}{r}\right)=\{(0,\dots,0,x_{k+1},\dots,x_n)\mid \sum_{j=k+1}^n x_j^2=\frac{ec}{r^2}\}\subset\mathbb{R}^{n-k}_{k+1,n}.$$

[3] Это означает, что касательные пространства соответствующих объектов пересекаются только в нуле.

Обозначим через f_τ сдвиг вдоль траекторий векторного поля $\vec{V}_s$ на время τ. Поскольку $f_1(C_{1,k}^{n-1}(r)\cap H_c^{n-1}) = f_1(S_{1,k}^{k-1}\times S_{k+1,n}^{n-k-1})$, то из (1.1) следует, что

$$f_1(C_{1,k}^{n-1}(r)\cap H_c^{n-1}) = S_{1,k}^{k-1}\left(\frac{r}{\sqrt{e}}\right)\times S_{k+1,n}^{n-k-1}\left(\frac{\sqrt{ec}}{r}\right) = C_{k+1,n}^{n-1}\left(\frac{\sqrt{ec}}{r}\right)\cap H_c^{n-1}. \tag{1.2}$$

Обозначим через $H_c^{n-1}(0\le\tau\le 1)$ объединение отрезков траекторий поля $\vec{V}_s$, начинающихся на $S_{1,k}^{k-1}\times S_{k+1,n}^{n-k-1}$ и оканчивающихся на $S_{1,k}^{k-1}\left(\frac{r}{\sqrt{e}}\right)\times S_{k+1,n}^{n-k-1}\left(\frac{\sqrt{ec}}{r}\right)$. Другими словами,

$$H_c^{n-1}(0\le\tau\le 1) = \bigcup_{0\le\tau\le 1} f_\tau(S_{1,k}^{k-1}\times S_{k+1,n}^{n-k-1}).$$

Согласно (1.2), $H_c^{n-1}(0\le\tau\le 1)$ есть часть $(n-1)$-мерного многообразия H_c^{n-1}, состоящая из единичных по времени отрезков траекторий векторного поля $\vec{V}_s$.

Аналогично доказывается следующее утверждение. Пересечение $(clos\ U_0)\cap C_{k+1,n}^{n-1}\left(\frac{\sqrt{ec}}{r}\right)$ гомеоморфно прямому произведению

$$D_{1,k}^{k}\left(\frac{r}{\sqrt{e}}\right)\times S_{k+1,n}^{n-k-1}\left(\frac{\sqrt{ec}}{r}\right),\ \text{ где }\ D_{1,k}^{k}\left(\frac{r}{\sqrt{e}}\right) = \{(x_1,\dots,x_n)\,|\,x_1^2+\dots+x_k^2\le\frac{r^2}{e}\}$$

диффеоморфно k-мерному замкнутому шару. Более того, $(clos\ U_0)\cap C_{k+1,n}^{n-1}\left(\frac{\sqrt{ec}}{r}\right)$ разбивает $clos\ U_0$ на две компоненты, и векторное поле $\vec{V}_s$ на $(clos\ U_0)\cap C_{k+1,n}^{n-1}\left(\frac{\sqrt{ec}}{r}\right)$ направлено наружу компоненты, в которой лежит седло O. Как следствие получаем результат, который мы для ссылок сформулируем в виде леммы.

Лемма 1.2. *$(n-1)$-мерные подмногообразия*

$$(clos\ U_0)\cap C_{1,k}^{n-1}(r),\quad H_c^{n-1}(0\le\tau\le 1),\quad (clos\ U_0)\cap C_{k+1,n}^{n-1}\left(\frac{\sqrt{ec}}{r}\right)$$

ограничивают открытую область $W_0\subset U_0$, содержащую седло O.

Доказательство теоремы основано на следующих двух леммах (определения дикого вложения и заузленности см. в монографиях [8], [13]).

Лемма 1.3. *Пусть M_*^4 - компактное 4-мерное многообразие, граница которого состоит из двух 3-мерных сфер S_1^3, S_2^3, $\partial M_*^4 = S_1^3\cup S_2^3$. Предположим, что на M_*^4 задано векторное поле $\vec{V}$ со следующими свойствами: 1) $\vec{V}$ имеет ровно одно состояние равновесие s_*, которое является гиперболическим седлом типа $(2,2)$; 2) $\vec{V}$ трансверсально границе ∂M_*^4 и направлено внутрь M_*^4 на S_1^3 и наружу M_*^4 на S_2^3; 3) каждая траектория поля $\vec{V}$, не принадлежащая сепаратрисам $W^s(s_*)$, $W^u(s_*)$ седла s_*, пересекает обе сферы S_1^3, S_2^3; 4) устойчивая сепаратриса $W^s(s_*)$ и неустойчивая сепаратриса $W^u(s_*)$ седла s пересекают соответственно сферы S_1^3 и S_2^3 вдоль замкнутых кривых $W^s(s_*)\cap S_1^3$ и $W^u(s_*)\cap S_2^3$. Тогда каждая кривая $W^s(s_*)\cap S_1^3$ и $W^u(s_*)\cap S_2^3$ не заузлена соответственно в S_1^3 и S_2^3.*

Доказательство. Обозначим кривые $W^s(s_*)\cap S_1^3$ и $W^u(s_*)\cap S_2^3$ через C_1 и C_2 соответственно. Эти кривые на сепаратрисах $W^s(s_*)$, $W^u(s_*)$ ограничивают замкнутые двумерные диски D_1, D_2 соответственно. Так как сферы S_1^3, S_2^3 трансверсальны векторному полю, то седло s лежит внутри каждого диска D_1, D_2. Из того, что в потоках Морса-Смейла отсутствуют петли сепаратрис следует, что D_1, D_2 пересекаются ровно в одной точке $s_* = D_1 \cap D_2$.

Предположим противное, и рассмотрим для определенности случай, когда кривая C_1 образует нетривиальный узел в S^3_1 (случай, когда C_2 образует нетривиальный узел в S^3_2 рассматривается аналогично). Согласно расширенной версии теоремы Гробмана-Хартмана, существует окрестность U множества $D_1 \cup D_2$, в которой поток топологически эквивалентен линейному потоку, определяемому линейной частью векторного поля $\vec{V}$ в точке s_*. В силу предложения 2.15 [9], линейные гиперболические векторные поля топологически сопряжены тогда и только тогда, когда они имеют одинаковый тип состояния равновесия. Поэтому поле $\vec{V}$ в U топологически сопряжено векторному полю $\vec{V}_s$, которое определяется системой дифференциальных уравнений (1.1) при $n = k = 2$. В частности, U гомеоморфна достаточно большой части специальной окрестности U_0, содержащей седло O. Не уменьшая общности, можно считать, что U гомеоморфна окрестности $W_0 \subset U_0$ (в обозначениях леммы 1.2.).

По условию леммы (свойство 3), все положительные траектории, начинающиеся в $S^3_1 - C_1$, достигают $S^3_2 - C_2$ при неограниченном увеличении времени, и обратно, все отрицательные траектории, начинающиеся в $S^3_2 - C_2$, достигают $S^3_1 - C_1$ при неограниченном уменьшении времени. Обозначим через $\xi : S^3_1 - C_1 \to S^3_2 - C_2$ отображение Пуанкаре, индуцируемое полем $\vec{V}$. Из классических теорем теории дифференциальных уравнений следует, что ξ - диффеоморфизм. Таким образом, C_1 и C_2 - два узла с гомеоморфными дополнениями. В силу [15], нетривиальность узла C_1 влечет нетривиальность узла C_2.

Рассмотрим полноторий $P_1 \subset U \cap S^3_1$, являющийся трубчатой окрестностью кривой C_1 в S^3_1. Поскольку C_1 - гладкая кривая, то такая окрестность существует. Из эквивалентности поля $\vec{V}$ в окрестности U с полем $\vec{V}_s$ вытекает, что $\xi(P_1 - C_1)$ совместно с C_2 образуют трубчатую окрестность (обозначим ее через P_2) кривой C_2. Уменьшив, если необходимо, полнотории P_1 и P_2, можно считать, что P_1, P_2 принадлежат границе окрестности U. Поскольку U гомеоморфна окрестности $W_0 \subset U_0$, то границы полноторий P_1, P_2 соединены отрезками траекторий векторного поля $\vec{V}$, причем ограничение $\xi|\partial P_1 : \partial P_1 \to \partial P_2$ переводит меридиан полнотория P_1 в параллель полнотория P_2, а параллель P_1 - в меридиан P_2.

Покажем, что сфера S^3_2 гомеоморфна многообразию, которое получается после перестройки сферы S^3_1 вдоль узла C_1. Действительно, удалим из S^3_1 полноторий P_1 и вклеим вместо него полноторий P_2 с помощью гомеоморфизма $\xi|\partial P_1 : \partial P_1 \to \partial P_2$. Поскольку приклеивающий гомеоморфизм $\xi|\partial P_1$ является продолжением гомеоморфизма $\xi|S^3_1 \setminus P_1 : S^3_1 \setminus P_1 \to S^3_2 \setminus P_2$, то отображение $\xi_* : (S^3_1 \setminus P_1) \cup_\xi P_2 \to S^3_2$, которое совпадает с ξ на $S^3_1 \setminus P_1$ и суть тождественное на P_2, является корректно определенным гомеоморфизмом.

Таким образом, сфера S^3_2 получается в результате перестройки сферы S^3_1 вдоль узла C_1 с помощью нетривиального гомеоморфизма $\xi|\partial P_1 : \partial P_1 \to \partial P_2$. Так как C_1 - нетривиальный узел, то в результате такой перестройки всегда получается многообразие, отличное от 3-сферы [15] (см. также [16]). Полученное противоречие доказывает лемму. $\square$

Напомним, что в 1977 году Пикстон построил простейший градиентноподобный диффеоморфизм Морса-Смейла на трехмерной сфере с неблуждающим множеством, состоящем из четырех неподвижных точек. Основная особенность примера состояла в наличии седла, у которого топологическое замыкание двумерной сепаратрисы образовывало дико вложенную двумерную сферу (отметим, что из [11] вытекает, что на 3-многообразиях не существует диффеоморфизмов Морса-Смейла, неблуждающее множество которых состоит из трех точек). Аналогичные примеры были построены в [2] - [5], [6], [10], [12], где рассматривались также вопросы классификации. Простейших градиентных потоков Морса-Смейла на трехмерных замкнутых многообразиях с подобными сепаратрисами не существует.

Лемма 1.4. *Пусть на замкнутом многообразии M^n, $n \geq 4$, задан поток Морса-Смейла f^t без периодических траекторий и ровно с тремя состояниями равновесия (два узла и седло). Тогда топологические замыкания неустойчивого и устойчивого многообразий седла являются локально плоскими вложенными $\frac{n}{2}$-сферами.*

Доказательство. Обозначим через α, ω и σ источник, сток и седло потока f^t соответственно. Так как потоки Морса-Смейла не имеют сепаратрисных петель, то неустойчивое $W^u(\sigma)$ и устойчивое $W^s(\sigma)$ многообразия седла σ пересекаются только в одной точке σ. Поскольку других седел, кроме σ, нет, то $W^u(\sigma)$ и $W^s(\sigma)$ не имеют гетероклинических пересечений.

Известно, что если инвариантное многообразие седла не имеет гетероклинических пересечений, то его топологическое замыкание содержит ровно один узел и гомеоморфно сфере, размерность которой равна размерности инвариантного многообразия. Поэтому оба топологических замыкания $clos\ W^u(\sigma) \stackrel{\text{def}}{=} S_\omega$, $clos\ W^s(\sigma) \stackrel{\text{def}}{=} S_\alpha$ суть топологически вложенные 2-сферы. Докажем, что S_ω является ручно вложенной сферой. Так как инвариантные многообразия седел являются гладко вложенными подмногообразиями, то единственной точкой дикого вложения сферы S_ω может быть только точка ω. Так как ω - гиперболический узел, то существует гладко вложенная 3-сфера S, окружающая $B \subset M^4$ с точкой ω и трансверсальная потоку. Поэтому $W^u(\sigma)$ пересекает S по замкнутой простой кривой, скажем C. Из леммы 1.3. вытекает, что C не заузлена в S. Обозначим через K пересечение S_ω с B. Поскольку S трансверсальна потоку, то K гомеоморфно топологической надстройке над C. Из незаузленности C следует, что K есть локально плоский во всех точках диск.

Доказательство того, что S_α локально плоская (во всех точках) аналогичное. □

Пусть теперь f_1^t, f_2^t – потоки Морса-Смейла, неблуждающее множество которых состоит из трех точек, на замкнутых четырехмерных многообразиях M_1^4, M_2^4 соответственно. Окружим узлы этих потоков 3-мерными сферами, которые ограничивают в M_1^4, M_2^4 4-мерные шары B_α^1, B_ω^1 и B_α^2, B_ω^2 соответственно. Существуют сохраняющие ориентацию гомеоморфизмы $h_\alpha : B_\alpha^1 \to B_\alpha^2$, $h_\omega : B_\omega^1 \to B_\omega^2$ переводящие интегральные кривые потока f_1^t в интегральные кривые потока f_2^t. Из лемм 1.3., 1.4. вытекает, что гомеоморфизмы h_α и h_ω можно продолжить до гомеоморфизма $M_1^4 \setminus (B_\alpha^1 \cup B_\omega^1) \to M_2^4 \setminus (B_\alpha^2 \cup B_\omega^2)$, переводящего траектории потока f_1^t в траектории потока f_2^t. Следовательно, f_1^t, f_2^t топологически эквивалентны. В частности, многообразия M_1^4, M_2^4 гомеоморфны.

Благодарности. Авторы благодарят участников семинара В.З. Гринеса за плодотворные обсуждения.

Работа выполнена в рамках гранта Правительства Российской Федерации для государственной поддержки научных исследований, проводимых под руководством ведущих ученых в российских образовательных учреждениях высшего профессионального образования, договор № 11.G34.31.0039, а также в рамках грантов РФФИ № 11-01-12056 офи-м, 12-01-00672-а.

Список литературы

1. Аносов Д. В., “Исходные понятия”, *Итоги науки и техники. Современные проблемы математики. Фундаментальные направления. Динамические системы - 1 (под ред. Д. В. Аносова)*, 1985, 156–178.

2. Бонатти Х., Гринес В.З., Медведев В.С., Пеку Е., “О топологической классификации градиентноподобных диффеоморфизмов без гетероклинических кривых на трехмерных многообразиях.”, *Доклады РАН*, **377** (2001), 151–155.

3. Бонатти Х., Гринес В.З., Медведев В.С., Пеку Е., “О диффеоморфизмах Морса-Смейла без гетероклинических пересечений на трехмерных многообразиях.”, *Труды МИАН*, **236** (2002), 66–78.

4. Бонатти Х., Гринес В.З., Починка О.В., “Классификация диффеоморфизмов Морса-Смейла с конечным множеством гетероклинических орбит на 3-многообразиях.”, *Труды МИАН*, **250** (2005), 5–53.

5. Гринес В.З., Жужома Е.В., Медведев В.С., “О диффеоморфизмах Морса-Смейла с четырьмя периодическими точками на замкнутых ориентируемых многообразиях.”, *Матем. Заметки*, **74** (2003), 369–386.

6. Гринес В.З., Жужома Е.В., Медведев В.С., Починка О.В., “Глобальные аттрактор и репеллер диффеоморфизмов Морса-Смейла.”, *Труды МИАН*, **271** (2010), 1–23.

7. Жужома Е.В., Медведев В.С., “Градиентные потоки с дико вложенными замыканиями сепаратрис.”, *Труды МИАН*, **270** (2010), 138–146.

8. Келдыш Л.В., *Топологические вложения в евклидово пространство*, Наука, М, 1966.

9. Палис Ж., Ди Мелу В., *Геометрическая Теория Динамических Систем. Введение*, Мир, М, 1986.

10. Bonatti Ch., Grines V. Knots as topological invariant for gradient-like diffeomorphisms of the sphere S^3, *Journal of Dyn. and Control Syst.*, **6** (2000), 579–602.

11. Bonatti Ch., Grines V., Medvedev V., Pecou E., “Three-dimensional manifolds admitting Morse-Smale diffeomorphisms without heteroclinic curves.”, *Topology and Appl.*, **117** (2002), 335–344.

12. Bonatti Ch., Grines V., Medvedev V., Pecou E., “Topological classification of gradient-like diffeomorphisms on 3-manifolds.”, *Topology*, **43** (2004), 369–391.

13. Daverman R.J., Venema G.A., *Embeddings in Manifolds*, **106**, GSM, Amer. Math. Soc., Providence, 2009.

14. Eells J., Kuiper N., “Manifolds which are like projective planes.”, *Publ. Math. IHES*, **14** (1962), 5–46.

15. Gordon C. McA., Luecke J., “Knots are determinned by their complements.”, *J. Amer. Math. Soc.*, **2** (1989), 371–415.

16. Kronheimer P., Mrowka T., “Witten’s conjecture and property P.”, *Geometry and Topology*, **8** (2004), 295–310.

17. Smale S., "Morse inequalities for a dynamical system.", *Bull. Amer. Math. Soc.*, **66** (1960), 43–49.

18. Smale S., "Differentiable dynamical systems", *Bull. Amer. Math. Soc.*, **73** (1967), 747–817 [Руский перевод: Успехи мат. наук. – 1970. Т. 25. – С. 113–185].

Equivalence of Morse-Smale flows on 4-manifolds

© **E.V. Zhuzhoma**[4], **V.S. Medvedev**[5]

Abstract. The paper concerns to the question of a topological classification of Morse-Smale flows with three critical points on closed 4-manifolds. One proves that if f_1^t, f_2^t are Morse-Smale flows with the non-wandering set consisting of three points on closed 4-manifolds M_1^4, M_2^4 respectively, then f_1^t, f_2^t are topologically equivalent.

Key Words: Topological classification, Morse-Smale flows, 4-manifolds

[4] Professor of Mathematics Chair, Nizhny Novgorod State Pedagogical University, Nizhny Novgorod; zhuzhoma@mail.ru.

[5] Senior Staff Scientist, Institute of Applied Mathematics and Cybernetics, Nizhny Novgorod; medvedev@unn.ac.ru.

УДК 517.9

Вычислительные аспекты оценки управляющих параметров модели системной динамики

© С. И. Спивак[1], И. Р. Салахов[2], О. Г. Кантор[3]

Аннотация. Разработанный программный комплекс методов математического моделирования и численных алгоритмов, позволяет, проведя серию численных экспериментов, определить параметры уравнений системной динамики, добиваясь необходимого значения управляемого параметра.

Ключевые слова: дифференциальные уравнения, метод Рунге-Кутты, метод Симпсона, модели системной динамики, оценка параметров модели.

Математическое моделирование экономических процессов и последовательное установление логических связей для обеспечения возможности наблюдения, контроля и управления ими, является наиболее эффективным средством для решения различных проблем. Существующие математические методы и модели могут позволить решать задачи большей размерности и учитывать широкий перечень показателей и факторов влияния, а время решения задач значительно сокращается с применением компьютеров. Среди них задачи оптимизации, прогнозирования, задачи принятия решения и другие.

Математическая модель реального объекта, процесса или системы представляется в виде системы функционалов. Ее построение заключается в определении связей между теми или иными процессами и явлениями, создании математического аппарата, позволяющего выразить количественно и качественно связь между теми или иными процессами и явлениями, между интересующими специалиста физическими величинами, и факторами, влияющими на конечный результат. Такая связь зачастую выражается системами дифференциальных уравнений, параметры которых делятся на неуправляемые и управляющие. Исследователей же интересовала проблема обеспечения некоего значения неуправляемого параметра за счет вариации управляющих. Результаты решения поставленной задачи должны показать, корректны ли значения управляющих параметров, согласно их реальным объектам, необходимые для достижения требуемого значения неуправляемого параметра. Если они таковыми не являются, то перед исследователями стоит нереальная задача.

Одним из методов изучения сложных систем с нелинейными обратными связями является системная динамика, на основе которой была построена модель. Она разработан в середине XX века профессором Массачусетского технологического института Дж. Форрестером – одним из крупнейших специалистов в области теории управления [1]. В моделях системной динамики используются переменные двух типов: системные уровни и темпы. Системные уровни полностью описывают состояние системы в произвольный момент времени.

Цель настоящей работы – решение обратной задачи определения параметров уравнений системной динамики.

Поставленная задача разрешалась на примере модели, которая была определена с помощью методов эконометрического и математического моделирования, описывающей изменение численности населения с учетом влияния определенных факторов.

[1] Заведующий кафедрой математического моделирования, Башкирский государственный университет, г. Уфа; s.spivak@bashnet.ru.

[2] Аспирант, Башкирский государственный университет, г. Уфа; salah-off@mail.ru.

[3] Старший научный сотрудник, ИСЭИ УНЦ РАН, г. Уфа; o_kantor@mail.ru.

Начальное приближение параметров модели осуществлялось путем перехода от дифференциальных уравнений системы к интегральным по формуле Симпсона, один из коэффициентов полагался неизвестным, после чего интегрируя обе части уравнения, правая часть заменялась приближенным выражением, рассчитанными по методу Симпсона. Из полученного соотношения определялся неизвестный параметр. Применив комплекс численных алгоритмов, модель была откорректирована с учетом достижения необходимой точности описания [2],[3].

$$\begin{gathered}\frac{dN}{dt} = 8,139 \cdot 10^{-22} N^{0,05} S^2 - 64,1 \cdot N^{0,03} S^{0,3} \\ \frac{dD}{dt} = 560 \cdot D^{0,35} - 9900 \cdot I \\ \frac{dI}{dt} = 0,131 \cdot I^{-0,4} - 0,0072 \cdot S^{0,092}\end{gathered} \tag{1.1}$$

Где неизвестными параметрами модели являются:

- N - численность населения РФ, чел.;
- D - душевые доходы за год, руб./чел. в год;
- I - индекс потребительских цен, %.

При прогнозировании изменения численности населения, ставится следующая задача. Какими должны быть управляющие параметры D и I системы, чтобы обеспечить необходимую численность в будущем году, сохраняя адекватность описания исходных данных.

В соответствии с поставленной задачей были сформулированы следующие принципы оптимальности. Для нахождения оптимального решения необходимо провести ряд численных экспериментов и выявить из множества подходящих моделей, удовлетворяющие поставленным условиям.

$$\begin{gathered}|N(t) - N_{exp}(t)| \le \delta_1; \\ |D(t) - D_{exp}(t)| \le \delta_2; \\ |I(t) - I_{exp}(t)| \le \delta_3,\end{gathered} \tag{1.2}$$

Все параметры системы укладываются в заданный коридор значений относительно экспериментальных данных.

$$\overline{A_N} \le 10\%; \quad \overline{A_D} \le 10\%; \quad \overline{A_I} \le 10\%; \tag{1.3}$$

По всем трем уравнениям средняя ошибка аппроксимации не превышает 10%.

$$|N(t) - N_{exp}(t + \Delta)| \le \varepsilon N(t), \tag{1.4}$$

Обеспечивается необходимое изменение прогнозного значения численности населения N и составляет $\varepsilon = 0.001$ от фактического значения в последний период времени.

Для организации вычислительного эксперимента был реализован в среде Delphi программный комплекс методов математического моделирования и численных алгоритмов, в состав которого входят:

1. Решение прямой задачи численным интегрированием системы дифференциальных уравнений методом Рунге-Кутты.

2. Выбор начальных приближений параметров модели путем перехода от дифференциальных уравнений системы к интегральным по формуле Симпсона.

3. Определение диапазонов вариации коэффициентов уравнений, при которых выполняются условия адекватного описания.

4. Поиск параметров модели путем анализа критериев оптимальности.

Для оптимизации планируемого эксперимента необходимо выявить диапазоны вариации коэффициентов уравнений, при которых выполняются условия адекватного описания. Перебрав пары линейных коэффициентов каждого уравнения, зафиксировав при этом остальные, получена область значений, при которых модель остается приемлемой.

Получено, что коэффициенты первого уравнения изменяются в диапазонах [5; 9] и [58; 62,5], второго уравнения [325; 820] и [0; 19200]. Вариация всех диапазонов каждого коэффициента займет большое количество времени, поэтому затраты значительно сократятся, если двигаться внутри области, разбив ее по блокам, при этом показатели степеней остаются постоянными.

Был организован численный алгоритм поиска максимального и минимального значения управляющих параметров D и I (схема 1), при которых выполняются поставленные условия.

Рисунок **1.1**

Алгоритм поиска максимального и минимального значения управляющих параметров.

При анализе полученных результатов эксперимента, получено, что для обеспечения роста численности населения от 0 до 0,1 % необходимо увеличить душевые доходы от 1,4% до 27%, или же увеличить индекс потребительских цен от 5,4% до 7.3%. При этом средняя ошибка аппроксимации не превышает 10% по каждому параметру системы.

Список литературы

1. Махов С. А., “Математическое моделирование мировой динамики и устойчивого развития на примере модели Форрестера”, *Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН*, **6** (2005), 24.

2. Спивак С. И., Кантор О. Г., Салахов И. Р., “Оценка параметров моделей системной динамики”, *Журнал Средневолжского математического общества*, **13**:3 (2011).

3. Спивак С. И., Кантор О. Г., Салахов И. Р., “Моделирование численности населения Российской Федерации методом системной динамики”, *Статистика. Моделирование. Оптимизация.*, 2011, 339.

Calculating aspects of estimates of control parameters system dynamics models

© **S. I. Spivak**[4], **I. R. Salakhov**[5], **O. G. Kantor**[6]

Abstract. In this paper we propose an approach to constructing models of system dynamics, based on the use of econometric modeling methods, approximate and numerical methods of integration, and series of numerical experiments which would allow the researcher to carry out a phased process of adjusting the model in terms of an adequate description of experimental data.

Key Words: differential equations, Runge-Kutta method, Simpson's rule, system dynamics models, estimation of model parameters.

[4] Head of the Department of Mathematical Modelling, Bashkir State University, Ufa; s.spivak@bashnet.ru.

[5] Postgraduate, Bashkir State University, Ufa; salah-off@mail.ru.

[6] Senior Research Scientist, Institute for Social and Economic Research, Ufa; o_kantor@mail.ru.

В Средневолжском математическом обществе

УДК 544.47

Построение двусторонних оценок решения прямой задачи химической кинетики

© В. А. Вайтиев[1], С. А. Мустафина[2]

Аннотация. На основе методов интервального анализа получены границы решения прямой задачи химической кинетики, обусловленного интервальным представлением кинетических параметров.

Ключевые слова: кинетические параметры, интервальный анализ.

1. Введение

Точность решения прямой задачи химической кинетики зависит от точности кинетических параметров, входящих в описание математической модели исследуемого процесса. Как правило, кинетические параметры (константа скорости, энергия активации) определяются экспериментально либо при решении обратной задачи. Это означает, что данные параметры содержат погрешность, величина которой может достигать более 20%. Поэтому при решении прямой задачи целесообразно задавать кинетические параметры не числами, а интервалами. Отсюда возникает задача построения гарантированных оценок приближенных решений, а также разработка алгоритмов и комплекса программ, позволяющих проводить анализ чувствительности решения.

2. Построение алгоритма анализа чувствительности решения прямой задачи к погрешности кинетических параметров

Основная идея заключается в анализе частных производных решения по параметрам. Этот подход во многом пересекается со стандартным анализом чувствительности, и для его реализации используется аппарат интервального анализа.

Рассмотрим систему

$$x_i' = f_i(t, x, k), \quad i = 1, ..., n, \quad t \in (0, l), \tag{2.1}$$

$$x(0) = x_0,$$

где $x_0 \in \mathbb{R}^n$ - вектор начальных значений, $x_0 \in \mathbf{x}_0$; $k \in \mathbb{R}^n$ - вектор параметров, $k \in \mathbf{k}$; $x \in \mathbb{R}^n$ - вектор начальных значений, $x \in \mathbf{x}$; причем далее будем считать, что x есть функция от t, k, x_0: $x = x(t, k, x_0)$.

[1] Аспирант кафедры математического моделирования, Стерлитамакская государственная педагогическая академия, г. Стерлитамак; vladimirvaytiev@yandex.ru.

[2] Заведущий кафедрой математического моделирования, Стерлитамакская государственная педагогическая академия, г. Стерлитамак.

Будем искать решение системы (2.1) в виде $x = (x_1, ..., x_n)^T \in \mathbf{x}$, где $x_i = [x_i] = \{x_i \in \mathbb{R} | \underline{x}_i \le x_i \le \overline{x}_i\}$, $\underline{x}_i$, $\overline{x}_i$ - нижние и верхние границы компонентов вектора неизвестных соответственно. Аналогичное представление характерно для вектора параметров $k = (k_1, ..., k_m)^T \in \mathbf{k}$.

В работе [1] представлены определения и теоремы, позволяющие построить алгоритм интервального решения. Приведем данные формулировки для задач химической кинетики.

Определение 2.1. *Минимальное по ширине двустороннее решение x задачи* (2.1) *будем называть оптимальным.*

Оценим $\overline{x}^{(i)}$ - верхнюю границу $\mathbf{x}(t)$ по i-й координате $\overline{x}^{(i)} \ge x_i$. Для оценки $\overline{x}^{(i)}$ рассмотрим систему ОДУ

$$\widetilde{x}' = f(t, \widetilde{x}, \widetilde{k}), \quad \widetilde{k} \in \widetilde{\mathbf{k}}, \tag{2.2}$$
$$\widetilde{x}(0) = \widetilde{x}_0 \in \widetilde{\mathbf{x}}_0.$$

Здесь

$$\widetilde{\mathbf{k}}_j = \begin{cases} \overline{k}_j, & \text{если} \quad \mathbf{x}^k_{ij}(t) \le 0, \\ \underline{k}_j, & \text{если} \quad \mathbf{x}^k_{ij}(t) \ge 0, \\ \mathbf{k}_j, & \text{если} \quad \mathbf{x}^k_{ij}(t) \ni 0, \end{cases} \tag{2.3}$$

и

$$\widetilde{\mathbf{x}}_0 = \begin{cases} \overline{x}_{0j}, & \text{если} \quad \mathbf{x}^0_{ij}(t) \le 0, \\ \underline{x}_{0j}, & \text{если} \quad \mathbf{x}^0_{ij}(t) \ge 0, \\ \mathbf{x}_0, & \text{если} \quad \mathbf{x}^0_{ij}(t) \ni 0, \end{cases} \tag{2.4}$$

где $\mathbf{x}^k_{ij}(t)$ - интервальное расширение $\partial x_i / \partial k_j$ и $\mathbf{x}^0_{ij}(t)$ - интервальное расширение $\partial x_i / \partial x_0 j$.

Интервальные функции $x^k_{ij}(t)$ и $x^0_{ij}(t)$ можно определить, одновременно решая систему (2.1) и системы ОДУ

$$x^{k\,\prime}_{ij} = \sum_{l=1}^{n} \frac{\partial f_i}{\partial x_l}(t, x, k) x^k_{lj} + \frac{\partial f_i}{\partial x_{k_j}}(t, x, k), \tag{2.5}$$

$$x^k_{ij}(0) = 0, \quad i = 1, ..., n, \quad j = 1, ..., m,$$

$$x^{0\,\prime}_{ij} = \sum_{l=1}^{n} \frac{\partial f_i}{\partial x_{x_l}}(t, x, k) x^0_{lj}, \tag{2.6}$$

$$x^0_{ij}(0) = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, ..., n,$$

где δ_{ij} - символ Кронекера.

Теорема 2.1. *Пусть*

$$0 \notin \frac{\partial f_i}{\partial x_{k_j}}(0, \boldsymbol{x}^0, \boldsymbol{k}), \tag{2.7}$$

$$0 \notin \frac{\partial f_i}{\partial x_{x_k}}(0, \boldsymbol{x}^0, \boldsymbol{k}), \tag{2.8}$$

где $i, k = 0, ..., n$, $j = 1, ..., m$. Тогда существует $t_0 > 0$ такое, что

$$0 \notin \boldsymbol{x}^k_{ij}(t), \quad 0 \notin \boldsymbol{x}^0_{ij}(t).$$

Таким образом, до момента $t_0 > 0$ можно построить оптимальные границы множества решений системы ОДУ.

В случае, если интервалы $\mathbf{x}_{ij}^k(t)$ и $\mathbf{x}_{ij}^0(t)$ содержат в себе 0, то система (2.2) содержит интервальные параметры и решается, к примеру, следующим двусторонним методом.

Пусть существуют вещественные функции [2] $G^l(t, y_1, ..., y_n, z_1, ..., z_n)$, $l = 1, 2$, такие что при $\underline{y} \leq \overline{y}$ и $\underline{z} \leq z$ выполнены следующие неравенства

$$G_i^l(t, \underline{y}, \overline{z}) \leq G_i^l(t, \overline{y}^{[\underline{y}_i]}, \underline{z}), \quad l = 1, 2, \quad i = 1, ..., n,$$

где $y^{[z_i]} = (y_1, ..., y_{i-1}, z, y_{i+1}, ..., y_n)$. Кроме того, выполнены неравенства

$$G_i^1(x, x) < f_i(x, k) < G_i^2(x, x).$$

Т е о р е м а 2.2. *Пусть вектор-функции $\underline{x}, \overline{x} \in \mathbb{R}^n$ удовлетворяют соотношениям*

$$\begin{aligned} \underline{x'} &\leq G^1(t, \underline{x}, \overline{x}), \\ \overline{x'} &\geq G^2(t, \overline{x}, \underline{x}), \\ \underline{x}(0) &\leq \underline{x}_0, \\ \overline{x}(0) &\geq \overline{x}_0. \end{aligned} \tag{2.9}$$

Тогда любое решение x системы (2.1) с начальным условием $\underline{x}_0 \leq x(0) \leq \overline{x}_0$ удовлетворяет оценкам

$$\underline{x}_t \leq x(t) \leq \overline{x}_t.$$

Заметим, что при этом $G_1(t, \underline{x}, \overline{x} \leq \inf f(t, x, k), \quad G_2(t, \overline{x}, \underline{x} \geq \sup f(t, x, k)$, и в качестве G можно взять границы монотонного по включению интервального расширения функции f.

О п р е д е л е н и е 2.2. *Функция f называется изотонной, если выполняется условие $x \leq y \Rightarrow f(x) \leq f(y)$, и антитонной, если $x \leq y \Rightarrow f(x) \geq f(y)$. Функция называется монотонной, если она изотонная или монотонная.*

Пусть функция $f(x, y)$ изотонная по x и антитонная по y, тогда интервальное расширение $f(x, y)$ имеет вид

$$\underline{f}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = f(\underline{x}, \overline{y}), \quad \overline{f}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = f(\overline{x}, \underline{y}).$$

Систему (2.9) можно перезаписать таким образом:

$$\begin{aligned} \underline{x'}_i &\leq \underline{f}_i(t, \mathbf{x}^{[\underline{x}_i]}, \mathbf{k}), \\ \overline{x'}_i &\geq \overline{f}_i(t, \mathbf{x}^{[\overline{x}_i]}, \mathbf{k}), \\ \underline{x}(0) &\leq \underline{x}_0, \\ \overline{x}(0) &\geq \overline{x}_0. \end{aligned} \tag{2.10}$$

Решение построенной системы дает в общем случае более широкое, чем оптимальное, двустороннее решение.

В случае возможности представления системы (2.10) в виде

$$\begin{aligned} \underline{x'} &= f(t, \underline{x}, k^1), \\ \overline{x'} &= f(t, \overline{x}, k^2), \end{aligned} \tag{2.11}$$

$$\underline{x}(0) = \underline{x}_0,$$
$$\overline{x}(0) = \overline{x}_0,$$

где $k^i \in \mathbf{k}$; $\underline{x}$ и $\overline{x}$ являются некоторыми частными решениями исходной системы и, следовательно, они оптимальны.

Л е м м а 2.1. *Пусть выполнены следующие условия:*

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \neq 0, \quad i \neq j, \quad i, j = 1, ..., n, \tag{2.12}$$

$$sign \frac{\partial f_i}{\partial k_j} = const, \quad j : wid(\boldsymbol{k}_j) \neq 0, \quad \forall k \subseteq \boldsymbol{k}, \quad \forall x \subseteq \boldsymbol{x}. \tag{2.13}$$

Тогда система (2.10) *имеет вид* (2.11)*.*

3. Решение прямой задачи на примере реакции олигомеризации α-метилстирола

Рассмотрим этапы решения прямой задачи химической кинетики на примере реакции олигомеризации α-метилстирола. Введем следующие обозначения: A_1 - α-метилстирол, A_2 - 4-метил-2,4-дифенилпентен-1, A_3 - 4-метил-2,4-дифенилпентен-2, A_4 - 1,1,3-триметил-3-фенилиндан, A_5 - триммеры.

Реакция олигомеризации α-метилстирола привлекает внимание исследователей тем, что продукты реакции являются ценным нефтехимическим сырьем. Насыщенный циклический димер - 1,1,3-триметил-3-фенилиндан представляет интерес в качестве смазочного или изоляционного материала, стойкого к радиолизу теплоносителя, реактивного топлива. Фенилиндан применяют в качестве пластификатора оргстекла и сцинтилляционных счетчиков ядерных излучений. Линейные ненасыщенные димеры - 4-метил-2,4-дифенилпентен-1 и 4-метил-2,4-дифенилпентен-2 используются как растворители для лаков, диэлектрические жидкости, основа смазочных масел, материалы для получения фрикционных жидкостей, пластификаторы каучуков.

Совокупность химических превращений, описывающих реакцию олигомеризации α-метилстирола, с учетом введенных выше обозначений представляется следующей схемой стадий [3]:

$$2A_1 \leftrightarrow A_2, \quad A_2 \to A_4, \quad A_1 + A_3 \to A_5, \tag{3.1}$$
$$2A_1 \leftrightarrow A_3, \quad A_3 \to A_4, \quad A_1 + A_4 \to A_5,$$
$$2A_1 \to A_4, \quad A_1 + A_2 \to A_5, \quad A_2 \leftrightarrow A_3.$$

Согласно закону действующих масс кинетические уравнения, соответствующие схеме химических превращений (2.13), можно выразить уравнениями:

$$\omega_1 = k_1 x_1^2 - k_{10} x_2, \quad \omega_4 = k_4 x_2, \quad \omega_7 = k_7 x_1 x_3, \tag{3.2}$$
$$\omega_2 = k_2 x_1^2 - k_{11} x_3, \quad \omega_5 = k_5 x_3, \quad \omega_8 = k_8 x_1 x_4,$$
$$\omega_3 = k_3 x_1^2, \quad \omega_6 = k_6 x_2 x_1, \quad \omega_9 = k_9 x_2 - k_{12} x_3,$$

где $\omega_i(t, x, k)$ - скорость i-й стадии (моль/л/ч), $i = 1, ..., 9$; $t \in (0, 5)$ - время реакции (ч); $x = (x_1, ..., x_5)^T$ - вектор концентраций компонентов (мольные доли); $k = (k_1, ..., k_{12})^T$ - вектор параметров - кинетических констант скоростей j-й реакции, причем

$k_j = k_j^0 \exp(-E_j/(RT))$, $j = 1, ..., 12$, энергии активации E_j (Дж/моль) и универсальная газовая постоянная R (Дж/мольК) - константы, $T = T(t)$ - температура (К).

Экспериментальные данные получены в термостатируемом лабораторном реакторе с мешалкой периодического действия. Такой реактор достаточно корректно может быть описан в приближении идеального смешения. При разработке математического описания данного реактора учитывается изменение числа молей (или реакционного объема) в ходе протекания химических реакций. Это отражается матрицей стехиометрических коэффициентов.

Тогда уравнения материального баланса процесса олигомеризации α-метилстирола имеют вид [4]:

$$\frac{d(Nx_i)}{dt} = F_i, \tag{3.3}$$

$$F_i = \sum_{j=1}^{9} \nu_{ij}\omega_j$$

с начальными условиями $t = 0$: $x_i = x_i^0$. Здесь N - относительное изменение числа молей реакционной среды, ν_{ij} - стехиометрические коэффициенты веществ, участвующих в реакции. Систему уравнений (3.2) замыкает условие нормировки по компонентам жидкой фазы

$$\sum_{i=1}^{5} x_i = 1.$$

Продифференцировав уравнение (3.2), получим

$$\frac{d(Nx_i)}{dt} = N\frac{dx_i}{dt} + x_i\frac{dN}{dt}. \tag{3.4}$$

Отсюда, учитывая условие нормировки и выражая dx_i/dt из (3.3), получим кинетическую моделью сложной (многостадийной) реакции, учитывающей изменение числа молей в ходе ее проведения

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{F_i - x_iF_n}{N} = f_i(t, x, k), \tag{3.5}$$

$$\frac{dN}{dt} = F_n = f_N(t, x, k),$$

$$x_i(0) = x_i^0, \quad i = 1, ..., 5,$$

$$x_N(0) = x_N^0 = 1.$$

Правые части уравнения (3.2) с учетом матрицы стехиометрических коэффициентов следующие:

$$F_1 = -2\omega_1 - 2\omega_2 - 2\omega_3 - \omega_6 - \omega_7 - \omega_8, \tag{3.6}$$

$$F_2 = \omega_1 - \omega_4 - \omega_6 - \omega_9,$$

$$F_3 = \omega_2 - \omega_5 - \omega_7 + \omega_9,$$

$$F_4 = \omega_3 + \omega_4 + \omega_5 - \omega_8,$$

$$F_5 = \omega_6 + \omega_7 + \omega_8,$$

$$F_N = -\omega_1 - \omega_2 - \omega_3 - \omega_6 - \omega_7 - \omega_8.$$

При решении прямой задачи интервальным методом были использованы численные значения кинетических констант, определенные при решении обратной кинетической задачи на базе математического описания процесса олигомеризации α-метилстирола и экспериментальных данных, полученных в термостатируемом лабораторном реакторе с мешалкой периодического действия при температуре $80\,^\circ$C и $10\,\%$-ной концентрации катализатора.

k_1	k_2	k_3	k_4	k_5	k_6	k_7	k_8	k_9	k_{10}	k_{11}	k_{12}
1,222	0,095	0,212	0,066	0,010	0,368	0,024	0,861	0,105	1E-5	0,000	0,114

Таблица 1: Численные значения кинетических констант

Для системы уравнений, описывающей кинетическую модель реакции олигомеризации α-метилстирола, как и для большинства уравнений химической кинетики, выполняются условия (2.12). Условия (2.13), как правило, наоборот не выполняются, что подтверждается в том числе и в нашем случае. Следовательно, решая систему (3.5), приведенную к виду системы (2.10), неравенства в которой заменяются частным случаем равенств, обыкновенным двусторонним методом, не удается получить оптимальное решение. Двустороннее решение получается шире истинного. Значительного уменьшения ширины решения при использовании обыкновенного двустороннего метода можно добиться за счет введения дифференциального уравнения, учитывающего дополнительную информацию о протекании химической реакции. Однако выполняются условия теоремы 2.1., согласно которой существует такой момент времени $t_0 > 0$, до которого возможно построить оптимальные границы множества решений системы обыкновенных дифференциальных уравнений.

На рис. (3.1) - (3.3) представлено графическое решение прямой кинетической задачи для реакции олигомеризации α-метилстирола. В качестве кинетических констант подобраны интервалы, содержащие 10 %-процентную погрешность от экспериментальных значений.

Предложенный метод интервального анализа чувствительности при 10 %-процентной погрешности от экспериментальных значений позволяет построить оптимальные границы интервального решения до момента времени $t_0 = 0,4$ (ч).

Анализ результатов, полученных при изменении величины погрешности кинетических параметров в диапазоне от 5 % до 10 %, позволяет сделать вывод, что погрешность экспериментальных данных не изменяет динамику кривых, при этом выход основных продуктов чувствителен к погрешности не более, чем на 15% - 30%. Кроме того, при увеличении погрешности в кинетических параметрах уменьшается временной интервал, на котором возможно построение оптимальных границ множества решений прямой задачи предложенным методом.

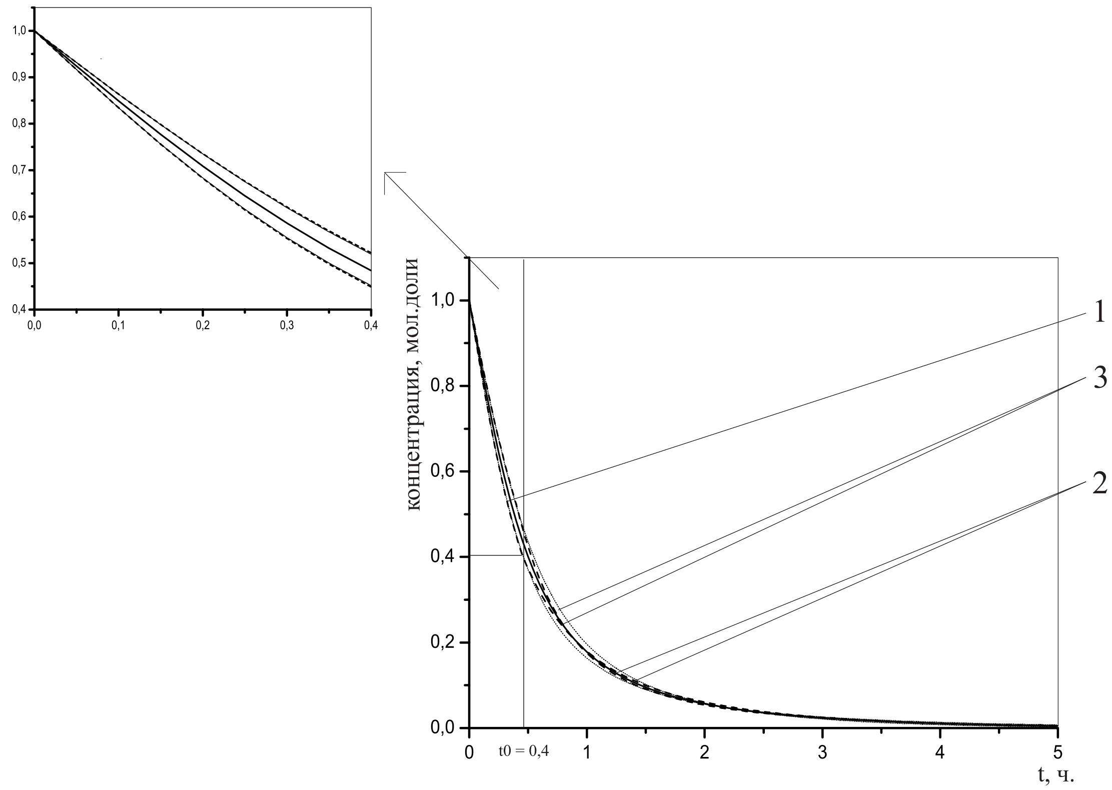


Рисунок **3.1**

Изменение концентрации продукта α-метилстирола (в мольных долях): 1 - точное решение, 2 - двустороннее решение, 3 - решение, полученное методом интервального анализа чувствительности

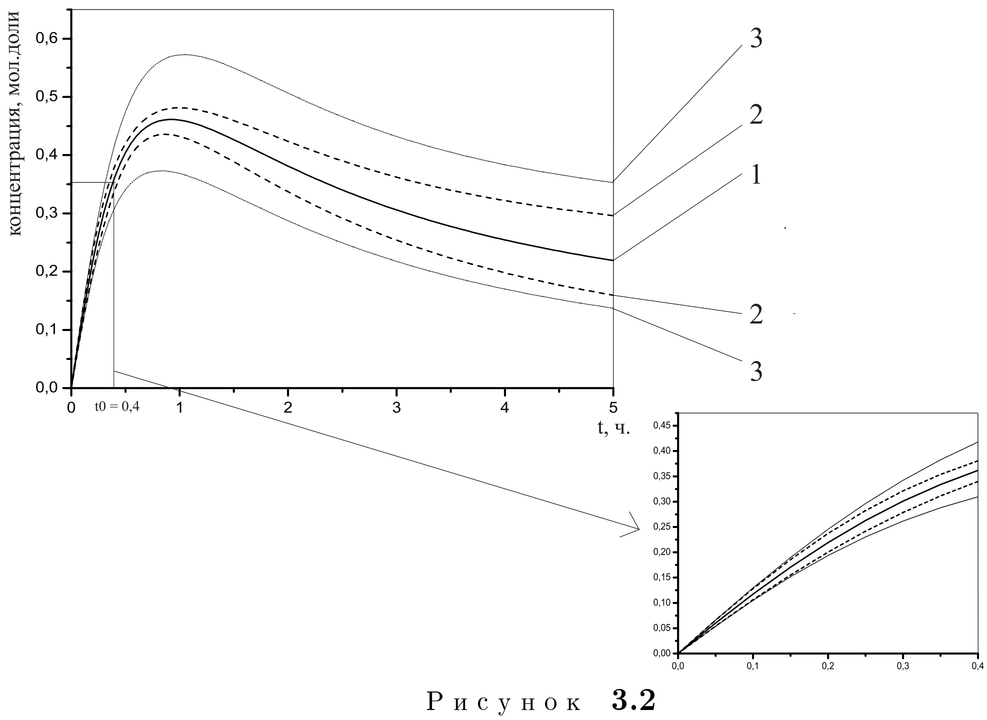
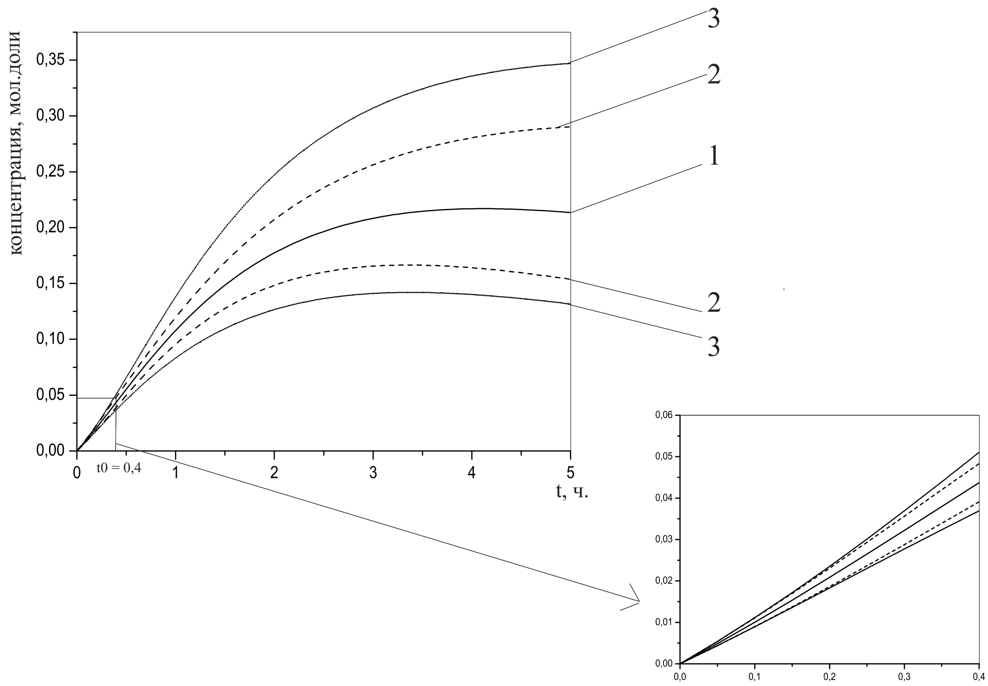


Рисунок **3.2**

Изменение концентрации продукта 4-метил-2,4-дифенилпентен-1 (в мольных долях): 1 - точное решение, 2 - двустороннее решение, 3 - решение, полученное методом интервального анализа чувствительности



Р и с у н о к **3.3**
Изменение концентрации продукта 4-метил-2,4-дифенилпентен-2 (в мольных долях): 1 - точное решение, 2 - двустороннее решение, 3 - решение, полученное методом интервального анализа чувствительности

Список литературы

1. Добронец Б. С., *Интервальная математика*, КГУ, Красноярск, 2004.
2. Курпель Н. С., Шувар Б. А., *Двусторонние неравенства и их приложения*, Наук.думка, Киев, 1980.
3. Байтимерова А. И., Мустафина С. А., Спивак С. И., “Поиск оптимального управления в каскаде реакторов для процессов с переменным реакционным объемом”, *Системы управления и информационные технологии*, 2008, № 2 (32).
4. Мустафина С. А., Байтимерова А. И., Степашина Е. В., “О свойствах решения задач моделирования каталитических процессов с переменным реакционным объемом”, *Труды Средневолжского математического общества*, **12**:3 (2010), 145–150.

Creation of bilateral estimates of the solution of a direct problem of chemical kinetics

© **V. A. Vaytiev**[3], **S. A. Mustafina**[4]

Abstract. On the basis of methods of interval analysis the limits of the solution of a direct problem of the chemical kinetics, caused by interval representation of kinetic parameters, are received.
Key Words: kinetic parameters, interval analysis.

[3] Graduate student of mathematical modeling, Sterlitamak State Pedagogical Academy, Sterlitamak; vaytievva@yandex.ru.
[4] Head of Mathematical Modelling Chair, Sterlitamak State Pedagogical Academy, Sterlitamak.

УДК 517.9

Редуктивный подход при моделировании сложных задач химической кинетики

© И. М. Губайдуллин[1], В. Б. Маничев[2], Л. Ф. Нурисламова[3]

Аннотация. В статье описан редуктивный подход, применяемый в Институте нефтехимии и катализа РАН, для установления механизмов протекания сложных химических реакций. Применение данного подхода описано на примере установления кинетики конкретных химических реакций. Работа выполняется при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 12-07-00324 и № 12-07-31029)

Ключевые слова: механизм реакции, реакция гидроалюминирования олефинов, редукция, задача Коши, жесткая задача.

1. Введение

Большинство химических реакций, например реакции металлокомплексного катализа, идущие с участием комплексов переходных металлов, а также реакции ингибированного окисления, относятся к разряду сложных процессов, характеризующихся наличием большого числа промежуточных стадий. Современные физико-химические методы не позволяют установить структуру всех интермедиатов, участвующих в сложных каталитических процессах и из-за трудности идентификации промежуточных продуктов, вследствие их малой концентрации и лабильности, химики-экспериментаторы предоставляют неполный объем информации, необходимый для однозначного построения математической модели реакции. Из-за этого возникает математическая неоднозначность решения обратных задач определения кинетических параметров. Поэтому для успешного построения модели необходимо проводить анализ не только одной кинетической модели исследуемой реакции, необходимо заботиться о системе частных моделей, каждая из которых передает наиболее важные черты для решения заданной задачи. Кроме того, необходимо проводить редукцию ошибочных данных и выбирать тот метод решения задачи, который позволяет за разумное время построить верную кинетическую модель сложной реакции.

2. Математическая постановка задач химической кинетики

В задачу построения кинетической модели химической реакции входит рассмотрение процесса как совокупности стадий (механизм реакции).

Нестационарная кинетическая модель, отвечающая заданной схеме превращений стадий реакции имеет вид:

$$\frac{dc}{dt} = S \cdot \omega(c), \tag{2.1}$$

[1] С.н.с лаборатории математической химии, Институт нефтехимии и катализа РАН, г. Уфа; IrekMars@mail.ru.

[2] Доцент кафедры РК6, Московский Государственный Технический Университет им. Н .Э. Баумана , г. Москва; Manichev@bmstu.ru

[3] Магистрант второго года обучения, Башкирский государственный университет, г. Уфа; Nurislamova_LF@mail.ru.

где c – вектор концентраций реагентов, $\omega(c)$ – вектор скоростей реакции, входящих в данный механизм, S – матрица, составленная из стехиометрических коэффициентов отдельных стадий.

В рамках заданного класса кинетики $\omega(c)$ решаются прямая и обратная кинетические задачи. Для процессов изотермической равновесной химической кинетики в закрытых системах, которые рассматриваются в данной работе, прямая задача, описывающая изменение концентраций компонентов на основе заданной кинетической модели, согласно закону действующих масс представляет собой задачу Коши:

$$\frac{dx_i}{dt} = \sum_{j=1}^{N} S_{ij} \cdot \omega_j, i = \overline{1, M}; \tag{2.2}$$

$$\omega_j = k_j \prod_{i=1}^{M} (x_i)^{|\alpha_{ij}|} - k_{-j} \prod_{i=1}^{M} (x_i)^{\beta_{ij}}; \tag{2.3}$$

$$x_i(0) = x_i^0, \tag{2.4}$$

где x_i – концентрации веществ (мольные доли), участвующих в реакции; M – количество веществ; N – количество стадий; S_{ij} – стехиометрическая матрица; ω_j – скорость j-ой стадии (1/ч); k_j, k_{-j} – приведенные константы скорости прямой и обратной реакции (1/ч), соответственно; α_{ij} – отрицательные элементы S_{ij}, β_{ij} – положительные элементы S_{ij}.

Обратной задачей является восстановление на основе натурных экспериментальных данных вида кинетической модели и ее параметров. Математически данная задача представляет собой задачу минимизации функционала

$$F = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{K} ||x_{ij}^{P} - x_{ij}^{Э}||, \tag{2.5}$$

отражающего степень близости между экспериментальными и расчетными значениями наблюдаемых переменных (N - количество веществ, участвующих в реакции, K - количество точек эксперимента).

3. Редукция на уровне механизмов (на примере реакции гидроалюминирования олефинов с ДИБАХ)

Большинство задач, изучаемых в ИНК РАН, представляют собой сложный многостадийный процесс, где в схемы протекания реакций включают большое количество промежуточных веществ (радикалы и их комплексы), непосредственное экспериментальное изучение которых, как правило, затруднено, либо невозможно. Это приводит к значительным трудностям решения как прямых, так и обратных задач химической кинетики для данных реакций. Из-за ограниченного количества экспериментальных данных решение обратной задачи представляет собой всевозможный набор констант скоростей, которые с математической точки зрения адекватно описывают эксперимент.

Проблема редукции систем дифференциальных уравнений химической кинетики к системам меньшей размерности является одной из классических задач математического моделирования механизмов сложных химических реакций.

При исследовании реакций гидроалюминироавния олефинов (ГАО) экспериментаторам удалось произвести декомпозицию сложной общей схемы на более простые независимые реакции [1]. На начальном этапе изучения реакции ГАО удалось выделить частные реакции с алюминийорганическими соединениями и олефинами в виде итоговых уравнений. Далее велись работы по детализации этого механизма до элементарных стадий. В ходе вычислительных экспериментов, на основе анализа полученных констант, удалось выделить из механизма реакции стадии, которые являются значимыми при моделировании процесса. На основании второй детализации был выписан механизм протекания общей реакции ГАО алкилаланами, катализируемой Cp_2ZrCl_2 в присутствии ДИБАХ. В табл.1 представлены общая и детализированная схемы для реакции гидроалюминироавния олефинов с диизобутилалюминийхлоридом (ДИБАХ).

Таблица 2: Предложенные схемы химических превращений реакции гидроалюминирования олефинов с ДИБАХ

Общая схема реакции	Детализированные схемы
$X_9+X_{15}\leftrightarrow X_{11}+X_{18}$	***Итоговое уравнение***
$X_9+X_{18}\rightarrow X_{10}+X_{13}$	$X_2+2X_9\rightarrow X_8+X_{13}$
$X_9+X_{10}\rightarrow X_2+X_{11}+X_{13}$	***Первая детализация***
$2X_2\leftrightarrow X_1$	$X_1\leftrightarrow 2X_2$
$X_2+X_3\rightarrow X_4+X_5$	$X_2+X_9\rightarrow X_5+X_{10}$
$X_1+X_5\rightarrow X_2+X_8$	$X_9+X_{10}\rightarrow X_{11}+X_{12}$
$X_2+X_5\rightarrow X_8$	$X_{12}\rightarrow X_2+X_{13}$
$X_3+X_8\rightarrow X_4+2X_5$	$X_2+X_5\leftrightarrow X_8$
$X_4+X_5\rightarrow X_6+X_7$	***Вторая детализация***
$X_1+X_9\rightarrow X_8+X_{10}$	$X_1\leftrightarrow 2X_2$
$X_5+X_7\rightarrow X_2$	$X_2+X_9\rightarrow X_5+X_{10}$
$X_5+X_7\rightarrow X_2$	$X_1+X_9\rightarrow X_8+X_{10}$
$X_7+X_9\rightarrow X_{10}$	$X_9+X_{10}\rightarrow X_2+X_{11}+X_{13}$
$X_6+X_{11}\leftrightarrow X_9+X_{19}$	$X_2+X_5\rightarrow X_8$
$X_5+X_{15}\leftrightarrow X_{10}$	$X_1+X_5\rightarrow X_2+X_8$
$X_5+X_{10}\leftrightarrow X_2+X_9$	

Здесь приняты следующие обозначения: $X_1 = [Cp_2ZrH_2 \cdot ClAlBu_2]_2; X_2 = [Cp_2ZrH_2 \cdot ClAlBu_2]; X_3 = CH_2CHR; X_4 = Cp_2ZrCl(CH_2CH_2R); X5 = HAlBu_2$– ДИБАГ; $X_6 = Bu_2Al(CH_2CH_2R); X_7 = Cp_2ZrHCl; X_8 = [Cp_2ZrH_2 \cdot AlBu_2 \cdot ClAlBu_2]; X_9 = ClAlBu2$– ДИБАХ; $X_{10} = [Cp_2ZrHCl \cdot ClAlBu_2]; X_{11} = Cl_2AlBu; X_{12} = [Cp_2ZrHBu \cdot ClAlBu_2]; X_{13} = C_4H_8; X_{14} = AlBu_3$– ТИБА; $X_{15} = Cp_2ZrCl_2; X_{16} = [Cp_2ZrH_2 \cdot HAlBu_2 \cdot 2(ClAlBu_2)]; X_{17} = [Cp_2ZrH_2 \cdot AlBu_2 \cdot ClAlBu_2]; X_{18} = Cp_2ZrClBu; X_{19} = ClBuAl(CH_2CH_2R); X_{20} = Cp_2ZrHBu \cdot ClAlBu_2; Bu = C_4H_9; Cp = C_5H_5$.

Таким образом, часть констант для общей реакции ГАО с могут быть определены из систем дифференциальных уравнений для частных реакций по второй детализации, выписанных для реакций ГАО с алюминийорганическими соединениями (ДИБАХ, триизобутилалюминий (ТИБА), диизобутилалюминийгидрид (ДИБАГ)) и олефинами (табл.2)). При решении данных систем надо иметь в виду, константы k_1, k_{-1}, k_2, k_3 входящие в системы, должны быть одинаковыми в каждой из них. Данная редукция позволяет упро-

Таблица 3: Системы дифференциальных уравнений для частных реакций ГАО по второй детализации

ДИБАГ	$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = -k_1x_1 + k_{-1}x_2^2 - k_2x_1x_5, \\ \frac{dx_2}{dt} = 2k_1x_1 - 2k_{-1}x_2^2 + k2x_1x_5 - k_3x_2x_5, \\ \frac{dx_5}{dt} = -k_2x_1x_5 - k_3x_2x_5, \\ \frac{dx_8}{dt} = k_2x_1x_5 + k_3x_2x_5 \end{cases}$
ТИБА	$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = -k_1x_1 + k_{-1}x_2^2 - k_4x_1x_{14}, \\ \frac{dx_2}{dt} = 2k_1x_1 - 2k_{-1}x_2^2 - k_5x_2x_{14} + k_4x_1x_{14}, \\ \frac{dx_8}{dt} = k_5x_2x_{14} + k_4x_1x_{14}, \\ \frac{dx_{13}}{dt} = k_5x_2x_{14} + k_4x_1x_{14}, \\ \frac{dx_{14}}{dt} = -k_5x_2x_{14} - k_4x_1x_{14} \end{cases}$
ДИБАХ	$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = -k_1x_1 + k_{-1}x_2^2 - k_6x_1x_9 - k_2x_1x_5, \\ \frac{dx_2}{dt} = 2k_1x_1 - 2k_{-1}x_2^2 - k_7x_2x_9 + k_{-7}x_5x_{10} - k_3x_2x_5 + k_2x_1x_5, \\ \frac{dx_5}{dt} = k_7x_2x_9k_{-7}x_5x_{10} - k_3x_2x_5 - k_2x_1x_5, \\ \frac{dx_8}{dt} = k_6x_1x_9 + k_3x_2x_5 + k_2x_1x_5, \\ \frac{dx_9}{dt} = -k_7x_2x_9 + k_{-7}x_5x_{10} - k_6x_1x_9 - k_8x_9x_{10}, \\ \frac{dx_{10}}{dt} = k_7x_2x_9 - k_{-7}x_5x_{10} + k_6x_1x_9 - k_8x_9x_{10}, \\ \frac{dx_{11}}{dt} = k_8x_9x_{10}, \\ \frac{dx_{13}}{dt} = k_8x_9x_{10} \end{cases}$
Олефин	$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = -k_1x_1 + k_{-1}x_2^2 - k_2x_1x_5, \\ \frac{dx_2}{dt} = 2k_1x_1 - 2k_{-1}x_2^2 - k_9x_2x_3 + k_{11}x_5x_7 + k_2x_1x_5 - k_3x_2x_5, \\ \frac{dx_3}{dt} = -k_9x_2x_3 - k_{12}x_3x_8, \\ \frac{dx_4}{dt} = k_9x_2x_3 - k_{10}x_4x_5 + k_{12}x_3x_8, \\ \frac{dx_5}{dt} = k_9x_2x_3 - k_{10}x_4x_5 - k_{11}x_5x_7 - k_2x_1x_5 - k_3x_2x_5 + 2k_{12}x_3x_8, \\ \frac{dx_6}{dt} = k_{10}x_4x_5, \\ \frac{dx_7}{dt} = k_{10}x_4x_5 - k_{11}x_5x_7, \\ \frac{dx_8}{dt} = k_2x_1x_5 + k_3x_2x_5 - k_{12}x_3x_8 \end{cases}$

стить решение задачи Коши для общей схемы ГАО с ДИБАХ, т.к. при решении обратной задачи необходимо варьировать только те константы, которые не были определены для частных реакций. Это в свою очередь существенно уменьшает степень неоднозначности решения обратной задачи, т.е. область допустимых значений констант скоростей, адекватно описывающих эксперимент. Данный подход удачен при нехватке данных, необходимых для математической постановки обратной задачи.

4. Редукция при решении прямой и обратной задач

Подробное описание решения задачи для реакции гидроалюминирования олефинов представлено в работе [2], где константы скоростей были найдены с применением многократной ручной коррекции. При этом относительная ошибка отклонения расчета от эксперимента общей реакции ГАО с ДИБАХ составила в среднем 15%.

Ниже представлена полученная математическая модель для общей реакции гидроалюминирования олефинов с ДИБАХ:

$$
\begin{cases}
\frac{dx_1}{dt} = 97x_2^2 - 5x_1 - 10.7x_1x_5 - 2.9x_1x_9, \\
\frac{dx_2}{dt} = 412x_9x_{10} - 194x_2^2 + 10x_1 - 313x_2x_3 + 10.7x_1x_5 - 467x_2x_5 + 0.86x_7x_5 + 757x_{10}x_5 - \\
-4x_2x_9, \\
\frac{dx_3}{dt} = -313x_2x_3 - 0.006x_3x_8, \\
\frac{dx_4}{dt} = 313x_2x_3 + 0.006x_3x_8 - 734x_4x_5, \\
\frac{dx_5}{dt} = 313x_2x_3 - 10.7x_1x_5 - 467x_2x_5 + 0.012x_8x_3 - 734x_4x_5 - 0.86x_7x_5 - 2\cdot 10^{-6}x_{15}x_5 + \\
+0.04x_{10} - 757x_{10}x_5 + 4x_2x_9, \\
\frac{dx_6}{dt} = 734x_4x_5 - 383x_6x_{11} + 3\cdot 10^{-7}x_{19}x_9, \\
\frac{dx_7}{dt} = 734x_4x_5 - 0.86x_7x_5 - 0.426x_7x_9, \\
\frac{dx_8}{dt} = 10.7x_1x_5 + 467x_2x_5 - 0.006x_8x_3 + 2.9x_1x_9, \\
\frac{dx_9}{dt} = -0.001x_9x_{15} + 3\cdot 10^{-7}x_{18}x_{11} - 0.3x_{18}x_9 - 2.9x_1x_9 - 0.426x_7x_9 + 383x_6x_{11} - \\
-3\cdot 10^{-7}x_{19}x_9 + 757x_{10}x_5 - 4x_2x_9, \\
\frac{dx_{10}}{dt} = 0.3x_{18}x_9 - 412x_{10}x_9 + 2.9x_1x_9 + 0.426x_7x_9 + 2\cdot 10^{-6}x_{15}x_5 - 0.04x_{10} - 757x_{10}x_5 + \\
+4x_2x_9, \\
\frac{dx_{11}}{dt} = 0.001x_{15}x_9 - 3\cdot 10^{-7}x_{18}x_{11} + 412x_{10}x_9 - 383x_6x_{11} + 3\cdot 10^{-7}x_{19}, x_9, \\
\frac{dx_{13}}{dt} = 0.3x_{18}x_9 + 412x_{10}x_9, \\
\frac{dx_{15}}{dt} = -0.001x_{15}x_9 + 3\cdot 10^{-7}x_{18}x_{11} - 2\cdot 10^{-6}x_{15}x_5 + 0.04x_{10}, \\
\frac{dx_{18}}{dt} = 0.001x_{15}x_9 - 3\cdot 10^{-7}x_{18}x_{11} - 0.3x_{18}x_9, \\
\frac{dx_{19}}{dt} = 383x_6x_{11} - 3\cdot 10^{-7}x_{19}x_9,
\end{cases}
\tag{4.1}
$$

$$
t = 0(\text{в долях}) : x_3 = 0.451, x_9 = 0.541, x_{15} = 0.008, x_i = 0, i \neq 3, 5, 15. \tag{4.2}
$$

Данная реакция характеризуется наличием очень медленно и очень быстро протекающих химических стадий, в которых значения констант скоростей отличается на порядки величин. Так как стадии реакций протекают с различными скоростями, то решение прямых кинетических задач осложняются жесткостью систем дифференциальных уравнений, что является одной из причин такого грубого решения обратной задачи. При решении прямой задачи в работе [2] использовался явный метод Кутты-Мерсона, который дает неустойчивое, а для некоторых концентраций веществ и неверное решение для данной жесткой СДУ с приведенными константами (рис. 4.1).

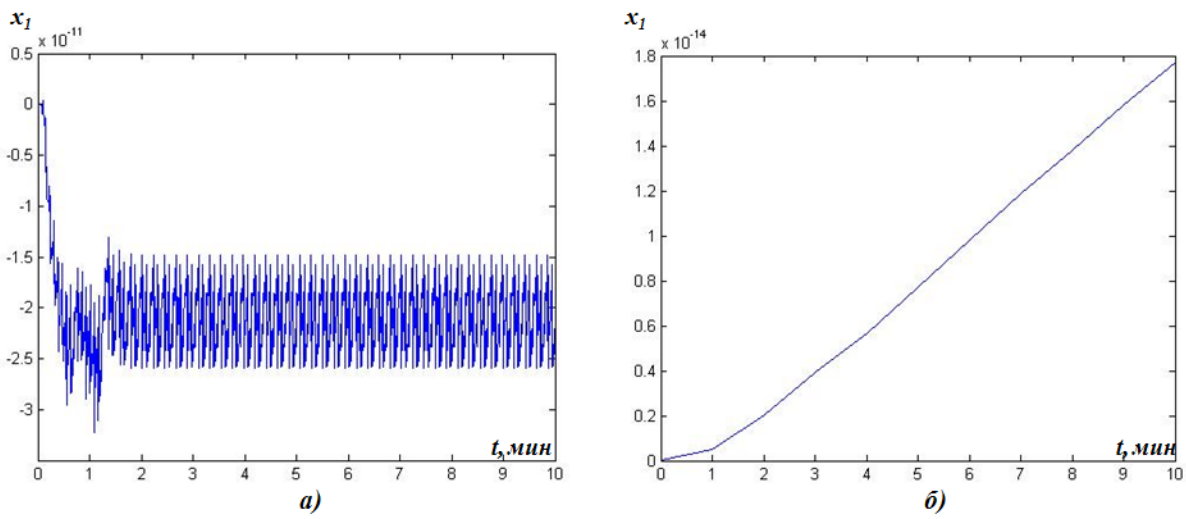


Рисунок **4.1**

График зависимости концентрации x_1 от времени, $Rtol = 10^{-6}$: а) расчет методом Кутты-Мерсона; б) расчет методом Радо II A.

Строго общепринятого определения жестких ОДУ нет. Принято считать, что жесткие системы дифференциальных уравнений – это те уравнения, решении которых получить намного проще с помощью неявных методов, чем с помощью явных. В литературе можно встретить следующее формальное определение жесткой задачи Коши [3]:

Задача Коши $y_i^{'} = f(t, \overline{y}), \overline{t_0} = \overline{y}^0, t_0 \le t \le T$ называется жесткой, если в какой-либо точке фазового пространства спектр матрицы Якоби делится на 2 части:

1) $|\lambda_i| \le l, i = \overline{1,k}; lT = O(l);$ – мягкий спектр;

2) $|Im(\lambda_i)| \le l, Re(\lambda_i) < -L, L \gg l, i = \overline{k+1,N};$ – жесткий спектр и $M = maxRe(-\lambda_i(t))/minRe(-\lambda_i(t)) \gg 1$.

В задаче (4.1)-(4.2), несмотря на то, что коэффициент жесткости принимает очень большое значение (порядка 10^{15}), вещественные части собственных чисел якобиана не велики по модулю (не более 1000), поэтому можно сказать данная задача является умеренно жесткой и явные методы решают ее с требуемой точностью 10^{-6}. «Разболтка» решения наблюдается для тех переменных, которые описывают очень медленно протекающие реакции, как в случае перменной x_1.

При решении данной задачи неявными методами получается гладкое решение, в то время как явный метод проделывает тысячи ненужных шагов и дает неустойчивое решение. А скорость решения особенно важна при решении обратной задачи, т.к. решение обратной задачи сводится к многократному решению прямой задачи перебором по некоторому алгоритму вектора констант скоростей стадий реакции при разных температурах.

Таким образом, необходимо обосновано подбирать методы решения прямой и обратной задач химической кинетики.

Ближайшая наша задача касаемо реакции ГАО олефинов – совместное, одновременное решение четырех систем ОДУ для определения интервалов значений кинетических параметров частных реакций гидроалюмнирования олефинов и нахождение констант скоростей реакции для общей реакции ГАО, удовлетворяющих критерию разности экспериментальных и расчетных данных.

Теперь рассмотрим пример более жесткой системы дифференциальных уравнений (4.3) с начальными условиями (4.4), описывающей реакцию термического разложения этана [4].

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = -k_1x_1 - k_2x_1x_2 - k_4x_1x_6 + k_8x_4^2 - k_{14}x_1x_{12}, \\ \frac{dx_2}{dt} = 2k_1x_1 - k_2x_1x_2 - k_6x_2x_5 + k_7x_8 - k_{10}x_2x_5 - k_{11}x_2x_9 + k_{14}x_1x_{12}, \\ \frac{dx_3}{dt} = k_2x_1x_2 + k_{10}x_2x_5 + k_{11}x_2x_9, \\ \frac{dx_4}{dt} = k_2x_1x_2 - k_3x_4 + k_4x_1x_6 + k_5x_5x_6 - 2k_8x_4x_4 + k_9x_5x_8, \\ \frac{dx_5}{dt} = k_3x_4 - k_5x_5x_6 - k_6x_2x_5 + k_7x_8 + k_8x_4^2 - k_9x_5x_8 - k_{10}x_2x_5 - k_{13}x_5, \\ \frac{dx_6}{dt} = k_3x_4 - k_4x_1x_6 - k_5x_5x_6 - k_{12}x_9x_6, \\ \frac{dx_7}{dt} = k_4x_1x_6 + k_{12}x_9x_6, \\ \frac{dx_8}{dt} = k_6x_2x_5 - k_7x_8 - k_9x_5x_8 + k_{14}x_1x_{12}, \\ \frac{dx_9}{dt} = k_{10}x_2x_5 - k_{11}x_2x_9 - k_{12}x_6x_9, \\ \frac{dx_{10}}{dt} = k_{11}x_2x_9 + k_{12}x_6x_9, \\ \frac{dx_{11}}{dt} = k_9x_5x_8, \\ \frac{dx_{12}}{dt} = k_{13}x_5 - k_{14}x_1x_{12} \end{cases} \tag{4.3}$$

$$t = 0 (\text{в моль/л}) : x_1(0) = 0.04, x_5(0) = 0.004, x_i(0) = 0, i = \overline{2,12}, i \neq 5. \tag{4.4}$$

$k_1 = 0.002, k_2 = 24415734.9, k_3 = 41502.8, k_4 = 813084797.8, k_5 = 9143838074, k_6 = 1499208614, k_7 = 5523511.4, k_8 = 3640227503.7, k_9 = 907807.4, k_{10} = 5907025.7, k_{11} = 6064721569.9, k_{12} = 10^10, k_{13} = 0.03, k_{14} = 130.2.$

Данная задача является жесткой за счет большого разброса порядков в константах скоростей реакции и собственных значений матрицы Якоби. Коэффициент жесткости $M > 10^6$. Для решения задачи (4.3)-(4.4) сначала был выбран пакет математических програм Mathematica 8.0. Для проверки достоверности и точности полученного решения была выбрана библиотека программ-решателей систем ОДУ на языке Си SADEL [5]-[6].

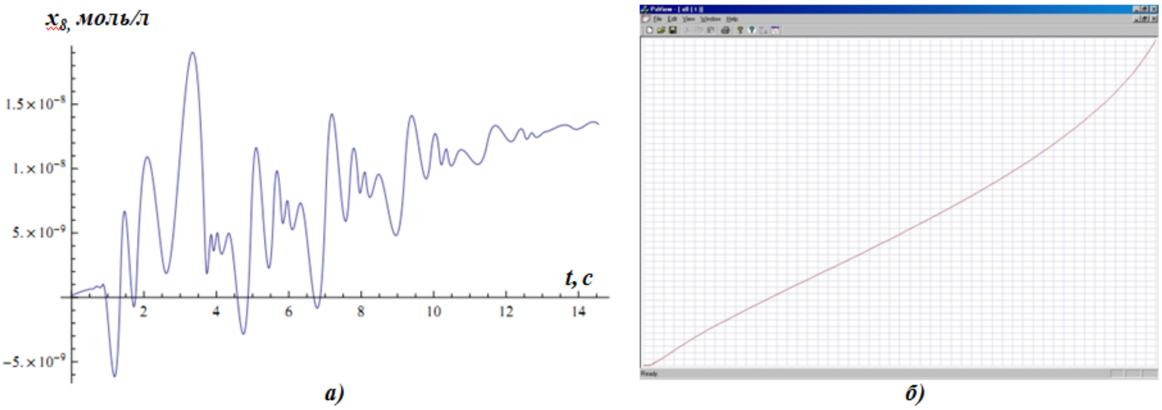


Рисунок **4.2**

График зависимости концентрации x_8 от времени, $Rtol = 10^{-6}$: а) Mathematica 8.0; б) SADEL-PA10.

Как видно из рис. 4.2, неявный метод, выбранный в пакете Mathematica 8.0 по умолчанию выдал колебательный график решения. Неявный метод, реализованный в библиотеке SADEL по умолчанию, выдал правильный график решения. Значения решения в конечный момент времени совпали в обоих случаях вплоть до 6-ой значащей цифры. Следует отметить, что после настройки параметров методов интегрирования, реализованных в пакете Mathematica 8.0, был также получен правильный график решения, однако большинство пользователей математических программ не являются профессиональными специалистами в численных методах и программах для решения систем ОДУ, поэтому достоверность и требуемая точность решения систем ОДУ должна быть обеспечена для параметров программ-решателей этих уравнений, рекомендуемых для этих решателей по умолчанию.

5. Заключение

В Институте нефтехимии и катализа при моделировании задач химической кинетики используется подход, основанный на редукции, применяемой на различных уровнях построения модели. Редукция на уровне механизмов позволяет выделить частные, наиболее важные для исследования стадии реакции и исследовать характер протекания данных стадий. Благодаря этому упрощается задача моделирования общей схемы реакции за счет снижения перебираемого вектора констант. Также ввиду жесткости систем дифференциальных уравнений, описывающих механизмы этих реакций, необходимо обоснованно подбирать метод решения прямой задачи. Хорошо зарекомендовали себя неявные методы для решения подобных систем.

С применением описанного подхода к решению задач химической кинетики в настоящее время ведется построение математической модели общих реакций гидроалюминирования олефинов с ДИБАХ, ТИБА и ДИБАГ.

Список литературы

1. Губайдуллин И. М., Линд Ю. Б., Коледина К. Ф., “Методология распараллеливания при решении многопараметрических обратных задач химической кинетики”, *Вычислительные методы и программирование*, **13** (2012), 28–36.

2. Коледина К. Ф., *Последовательно-параллельное определение кинетических параметров при моделировании детального механизма гидроалюминирования олефинов: дис. ... канд. хим. наук.*, Уфа, 2011.

3. Холодов А. С., Лобанов А. И., Евдокимов А. В., *Разностные схемы для решений жестких обыкновенных дифференциальных уравнений в пространстве неопределенных коэффициентов*, М., 2001.

4. Snytnikov V. N., Mishchenko T. I., Snytnikov Vl. N., Malykhin S. E., Avdeev V. I., Parmon V. N., “Autocatalytic gas-phase dehydrogenation of ethane”, *Research on Chemical Intermediates*, **38**:3–5 (2012), 1133–1147.

5. Андронов А. В., Жук Д. М., Кожевников Д. Ю., Маничев В. Б., “Библиотека математических программ-решателей на языке Си: SADEL”, *http://pa10.ru*, 2011.

6. Жук Д. М., Маничев В. Б., Сахаров М. К., “SADEL – библиотека «сверхточных» решателей для программного комплекса ПА10 (SADEL-PA10)”, *В сб. научных трудов МЭС - 2012- М.: ИППМ РАН*, 2012.

Reductive approach for modeling complex chemical kinetics problems.

© I. M. Gubaidullin[4], V. B. Manichev[5], L. F. Nurislamova[6]

Abstract. In this paper the reductive approach applied in Institute of petrochemistry and catalysis of the Russian Academy of Sciences, to establish the mechanisms of complex chemical reactions is described. The application of this approach is described on an example of determination of the kinetics concrete chemical reactions. This work are supported by RFBR grants (projects № 12-07-00324 and № 12-07-31029).

Key Words: reaction mechanism, the reaction of olefins hydroalumination, reduction, a Cauchy problem, stiff problem.

[4] Senior Research Associate in the Laboratory of Mathematical Chemistry, Institute of petrochemistry and catalysis of the Russian Academy of Sciences, Ufa; IrekMars@mail.ru.

[5] Associate Professor RK6, Moscow State Technical University n.a. N.E. Bauman, Moscow; Manichev@bmstu.ru

[6] Graduate of the second year the Department of mathematical modelling, Bashkir State University, Ufa; Nurislamova_LF@mail.ru.

УДК 517.938.5

О топологической сопряженности градиентно-подобных диффеоморфизмов поверхностей посредством трехцветного графа

© С. Х. Капкаева[1]

Аннотация. В работе найдены условия топологической сопряженности градиентно-подобных диффеоморфизмов поверхностей, неблуждающее множество которых состоит из неподвижных точек. В качестве полного топологического инварианта используется трехцветный граф, являющийся обобщением аналогичного понятия введенного в работе [4] для потоков Морса-Смейла на поверхностях.

Ключевые слова: диффеоморфизм Морса-Смейла, градиентно-подобный диффеоморфизм, топологически сопряженные диффеоморфизмы, трехцветный граф

1. Основные понятия и формулировка результатов

Неблуждающее множество диффеоморфизма f будем обозначать Ω_f. Представим $\Omega_f = \Omega_0 \cup \Omega_1 \cup \Omega_2$, где $\Omega_i(f)$ - множество неподвижных точек диффеоморфизма f индекса i ($i = 0, 1, 2$), то есть $\Omega_0(f)$, $\Omega_1(f)$, $\Omega_2(f)$ - множества стоковых, седловых, источниковых точек диффеоморфизма f соответственно.

Через L_f обозначим множество сепаратрис седловых неподвижных точек диффеоморфизма f.

Определение 1.1. *Диффеоморфизм $f : M^n \to M^n$ называется диффеоморфизмом Морса - Смейла на многообразии M^n, если:*

1. *неблуждающее множество Ω_f гиперболично и конечно (то есть состоит из конечного числа периодических точек, для которых модули собственных значений матрицы Якоби не равны единице);*
2. *для любых различных периодических точек p, q устойчивое многообразие W^s_p и неустойчивое многообразие W^u_q либо не пересекаются, либо трансверсальны в каждой точке пересечения.*

Заметим, что для любого диффеоморфизма Морса-Смейла пересечение $W^s_p \cap W^u_p$ состоит в точности из одной точки p, так как в противном случае это привело бы к бесконечности неблуждающего множества. Однако для различных периодических точек p, q пересечение $W^s_p \cap W^u_q$ может быть непустым множеством. Если $dim W^s_p + dim W^u_q = n$, то каждая точка, принадлежащая $W^s_p \cap W^u_q$, называется гетероклинической, если $dim W^s_p + dim W^u_q > n$, каждая компонента связности $W^s_p \cap W^u_q$ называется гетероклинической компонентой.

Определение 1.2. *Диффеоморфизм Морса-Смейла называется градиентно-подобным, если из условия $W^s_p \cap W^u_q \neq \emptyset$ для различных точек $p, q \in \Omega_f$ следует, что $dim W^u_p < dim W^u_q$.*

[1] Студент математического факультета, Мордовский государственный университет имени Н. П. Огарева, г. Саранск; kapkaevasvetlana@yandex.ru

Определение 1.3. *Два сохраняющих ориентацию диффеоморфизма f, f' : $M^n \to M^n$ называются топологическими сопряженными, если существует сохраняющий ориентацию гомеоморфизм $h : M^n \to M^n$ такой, что $f' = hfh^{-1}$.*

В настоящей работе рассматривается класс G сохраняющих ориентацию диффеоморфизмов Морса-Смейла на двумерном ориентируемом многообразии M^2, удовлетворяющих следующим условиям:

1. множество Ω_f $(f \in G)$ состоит из неподвижных точек и ограничение диффеоморфизма на неустойчивое многообразие любой седловой неподвижной точки сохраняет ориентацию.

2. диффеоморфизм f является градиентно-подобным.[2]

Для топологической классификации потоков Морса-Смейла на двумерном многообразии на поверхностях М. Пейкшото [5] ввел понятие различающего графа. Этот инвариант явился обобщением схемы потока, введенной Е.А. Леонтович-Андроновой и А.Г. Майером для потоков с конечным числом особых траекторий, определенных в ограниченной части плоскости [3]. Основным результатом работы [5] является утверждение о том, что различающий граф, является полным топологическим инвариантом для потоков Морса-Смейла на двумерных многообразиях (с точностью до траекторной топологической эквивалентности). Результат Пейкшото был обобщен В. З. Гринесом и А. Н. Безденежных для градиентно-подобных каскадов на ориентируемых поверхностях [1]. Следует отметить, что проверка изоморфности графов Пейкшото является достаточно громоздким процессом, что связано с наличием различающих подмножеств. В работе [4] А. А. Ошемков и В. В. Шарко предложили поставить в соответствие градиентно-подобному потоку Морса-Смейла на поверхности трехцветный граф, который также является полным топологическим инвариантом, но по сравнению с графом Пейкшото, описание и проверка изоморфности трехцветных графов является значительно более простой.

Следуя работе [4], поставим в соответствие каждому диффеоморфизму $f \in G$ трехцветный граф и докажем, что он является полным топологическим инвариантом, классифицирующим градиентно-подобные диффеоморфизмы на двумерных многообразиях.

Определение 1.4. *Граф T называется трехцветным графом, если все его вершины имеют степень 3, а ребра раскрашены в три цвета таким образом, что в каждой вершине сходятся ребра трех разных цветов. Цвета будем обозначать буквами s, t, u.*

Определение 1.5. *Два трехцветных графа T и T' назовем изоморфными, если они изоморфны с сохранением раскраски (т.е. при изоморфизме ребра помеченные буквами s, t, u переходят в ребра помеченные теми же буквами). Для краткости будем называть эти ребра s-ребрами, t-ребрами и u-ребрами.*

Опишем процедуру сопоставления каждому градиентно-подобному диффеоморфизму некоторого трехцветного графа.

Пусть f - градиентно-подобный диффеморфизм на поверхности M^2, имеющий хотя бы одну седловую особую точку. Удалим из поверхности M^2 замыкание объединения устойчивых и неустойчивых многообразий всех седловых неподвижных точек

[2] Так как M^2 двумерное многообразие, то условие градиентно-подобности эквивалентно тому, что пересечение $W^s_p \cap W^u_q$ является пустым, для любых различных точек p, q из множества $\Omega(f)$.

диффеоморфизма f и обозначим получившееся множество через $\tilde{M}$, то есть $\tilde{M} = M^2 \setminus \overline{\bigcup\limits_{p\in\Omega_1}(W_p^u \cup W_p^s)}$, где Ω_1 – множество всех седловых точек. Тогда множество $\tilde{M}$ представляется в виде объединения открытых областей (ячеек), гомеоморфных открытому стандартному диску, то есть множеству $\{(x,y)\in R^2:\ x^2+y^2<1\}$. Аналогично [3] устанавливается, что граница каждой области из множества $\tilde{M}$ имеет один из видов, изображенных жирными линиями на рис. 1.1 и содержит в точности один источник, один сток, одну или две седловые точки и некоторые из их сепаратрис.

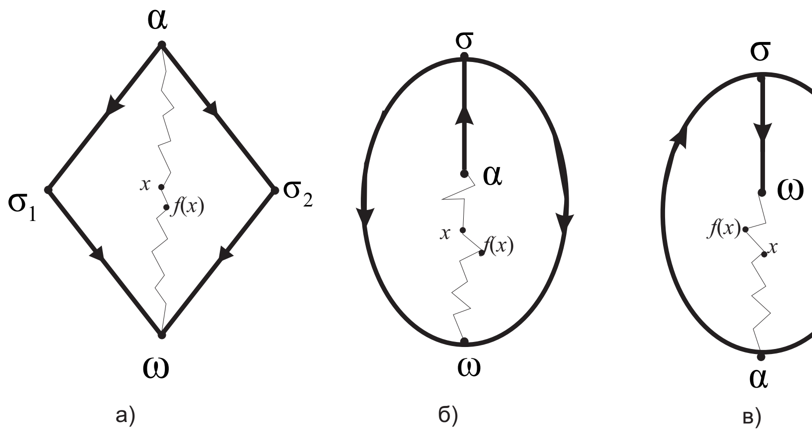


Рисунок **1.1**

Разбиение ячеек на треугольные области

Пусть A - любая ячейка из множества $\tilde{M}$, α и ω - источник и сток, входящие в ее границу, сделаем следующее построение. Для любой стоковой точки ω диффеоморфизма f обозначим через L_ω-множество сепаратрис седловых неподвижных точек, содержащих ω в своем замыкании.

Из леммы 3.2.1 работы [2] следует, что существует гладкий диск B_ω такой, что $\omega \in B_\omega \subset W_\omega^s$, причем $int f(B_\omega) \subset B_\omega$, и любая сепаратриса $l \in L_\omega$ пересекает ∂B_ω в единственной точке. Выберем произвольную точку x на границе диска B_ω, принадлежащую внутренности ячейки A. Положим $y = f(x)$ и соединим точки x и y произвольной простой кривой μ (кривой без самопересечений). Положим $\mathcal{I} = \bigcup\limits_{n\in Z} f^n(\mu)$. Тогда замыкание $\mathcal{I}$ является простой кривой, граничные точки которой состоят из точек α и ω. Будем называть ее t - кривой (рис. 1.1).

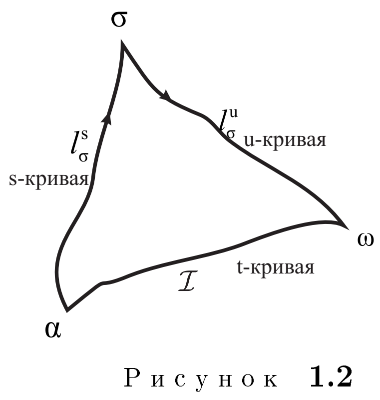


Рисунок **1.2**

Треугольная область

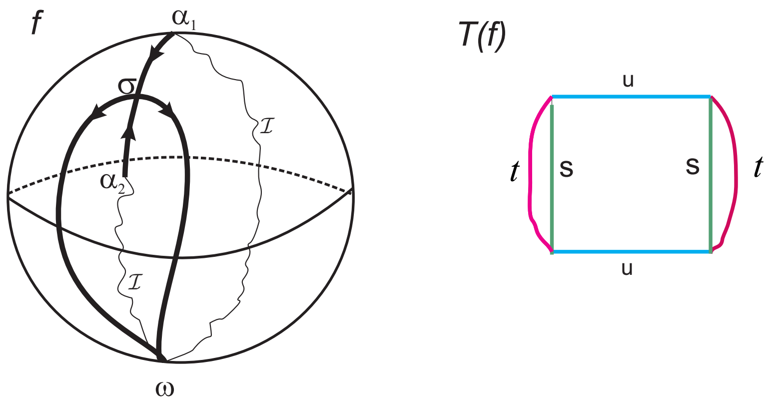
Множество $A\setminus\mathcal{I}$ в точности состоит из двух компонент связности, в границу каждой из которых входят: три неподвижные точки - источник α, седло σ, сток ω, а также устойчивая сепаратриса l^s_σ (будем называть ее s-кривой) с граничными точками α и σ, неустойчивая сепаратриса l^u_σ (u-кривая) с граничными точками ω и σ и кривая $\mathcal{I}$ (t-кривая) с граничными точками α и σ (рис. 1.2).

Каждую из компонент связности множества $A\backslash\mathcal{I}$ будем называть треугольной областью или просто треугольником. Положим Δ множество всех треугольных областей диффеоморфизма f.

Обозначим через $\mathcal{T}$ множество t-кривых, построенных во всех ячейках множества $\tilde{M}$. Положим $M_1 = \tilde{M}\backslash\mathcal{T}$, тогда M_1 представляется в виде объединения треугольных областей.

Стороной треугольной области назовем замыкание одной из s, u или t компонент связности границы.

Будем говорить, что две треугольные области, имеют общую сторону, если она принадлежит замыканиям обеих треугольников.



Р и с у н о к **1.3**

Построим трехцветный граф $T(f)$, соответствующий полученному разбиению M_1 на треугольники следующим образом:

1) вершины графа T взаимно-однозначно соответствуют треугольникам разбиения M_1;

2) две вершины графа инцидентны ребру цвета s, t или u, если соответствующие этим вершинам треугольные области имеют общую сторону s, t или u типа.

На рис. 1.3 приведен фазовый портрет простейшего диффеоморфизма Морса-Смейла на двумерной сфере и соответствующий ему трехцветный граф.

Основным результатом работы является теорема 1.1.

Т е о р е м а 1.1. *Диффеоморфизмы $f, f' \in G$ топологически сопряжены тогда и только тогда, когда их трехцветные графы $T(f), T(f')$ изоморфны.*

2. Доказательство теоремы 1.1.

Необходимость

Д о к а з а т е л ь с т в о. Пусть даны два топологически сопряженных диффеоморфизма $f, f' \in G$, то есть существует гомеоморфизм h, такой, что $f' = hfh^{-1}$. Построим для диффеоморфизма f трехцветный граф и обозначим его через $T(f)$. Для каждой инвариантной t-кривой $\mathcal{I}$, участвующей в построении графа $T(f)$ и принадлежащей некоторой ячейке A из множества $\tilde{M}_f = M^2 \setminus \overline{\bigcup\limits_{p\in\Omega_1}(W^u_p \cup W^s_p)}$, положим $\mathcal{I}' = h(\mathcal{I})$. Так как h сопрягающий гомеоморфизм, то он преобразует ячейку A в ячейку $A' = h(A)$ из множества $\tilde{M}_{f'} = M^2 \setminus \overline{\bigcup\limits_{h(p)\in\Omega'_1}(W^u_{h(p)} \cup W^s_{h(p)})}$. По построению кривая $\mathcal{I}'$ принадлежит ячейке A'. Так как h преобразует замыкания устойчивых и неустойчивых многообразий седловых неподвижных точек дифеоморфизма f в замыкания устойчивых и неустойчивых многообразий седловых неподвижных точек диффеоморфизма f', то он отображает каждую треугольную область разбиения $\tilde{M}_f$ в треугольную область разбиения $\tilde{M}_{f'}$ с сохранением типа ее границы.

Обозначим через $T(f')$ граф, построенный для диффеоморфизма f' по разбиению с использованием кривых $\mathcal{I}$. Покажем, что графы $T(f)$ и $T(f')$ изоморфны. Пусть $\Delta(\Delta')$ — множество всех треугольных областей диффеоморфизма $f(f')$, $\Gamma(\Gamma')$ — множество всех вершин трехцветного графа $T(f)(T(f'))$ и $\pi : \Delta \to \Gamma$ $(\pi' : \Delta' \to \Gamma')$ отображение, которое ставит в соответствие каждой треугольной области диффеоморфизма $f(f')$ вершину графа $T(f)(T(f'))$. Тогда отображение $\eta = \pi' h \pi^{-1}$ является взаимно-однозначным соответствием между множествами Γ и Γ'. Покажем, что η является изоморфизмом трехцветных графов, для этого достаточно показать, что если две вершины a, b инцидентны ребру γ^ν (определенного цвета $\nu \in \{s, t, u\}$), то вершины $a' = \eta(a)$ и $b' = \eta(b)$ инцидентны некоторому ребру γ'^ν того же цвета.

Вершинам a и b инцидентным ребру γ^ν соответствуют две треугольные области $\Delta_a = \pi^{-1}(a)$ и $\Delta_b = \pi^{-1}(b)$, имеющие общую сторону τ^ν (τ того же цвета, что и γ^ν). Области Δ_a и Δ_b преобразуются под действием гомеоморфизма h в треугольные области $h(\Delta_a)$ и $h(\Delta_b)$ с общей стороной τ'^ν. Это означает, что вершины a и b, инцидентные ребру τ^ν, под действием $\eta = \pi' h \pi^{-1}$ преобразуются в вершины $a' = \pi'(h(\Delta_a))$ и $b' = \pi'(h(\Delta_b))$ графа $T(f')$, инцидентные ребру γ'^ν.

Доказательство закончено.

Достаточность

Прежде чем приступить к доказательству достаточности, докажем следующую лемму. Положим $M_2 = M^2 \setminus \bigcup\limits_{\sigma\in\Omega_1} W^s_\sigma$, $M'_2 = M^2 \setminus \bigcup\limits_{\sigma'\in\Omega_1} W^s_{\sigma'}$.

Лемма 2.1. *Пусть трехцветные графы $T(f)$ и $T(f')$ диффеоморфизмов f и f' соответственно изоморфны, тогда существует гомеоморфизм $\tilde{h} : M_2 \to M'_2$, такой что $\tilde{h} f = f' \tilde{h}$.*

Доказательство. Для стоковой неподвижной точки ω диффеоморфизма f обозначим через L_ω множество всех t и u кривых, для которых ω является граничной точкой и через n_ω - число кривых принадлежащих L_ω.[3] Введем аналогичные обозначения $L_{\omega'}$ и $n_{\omega'}$ для стока ω' диффеоморфизма f'.

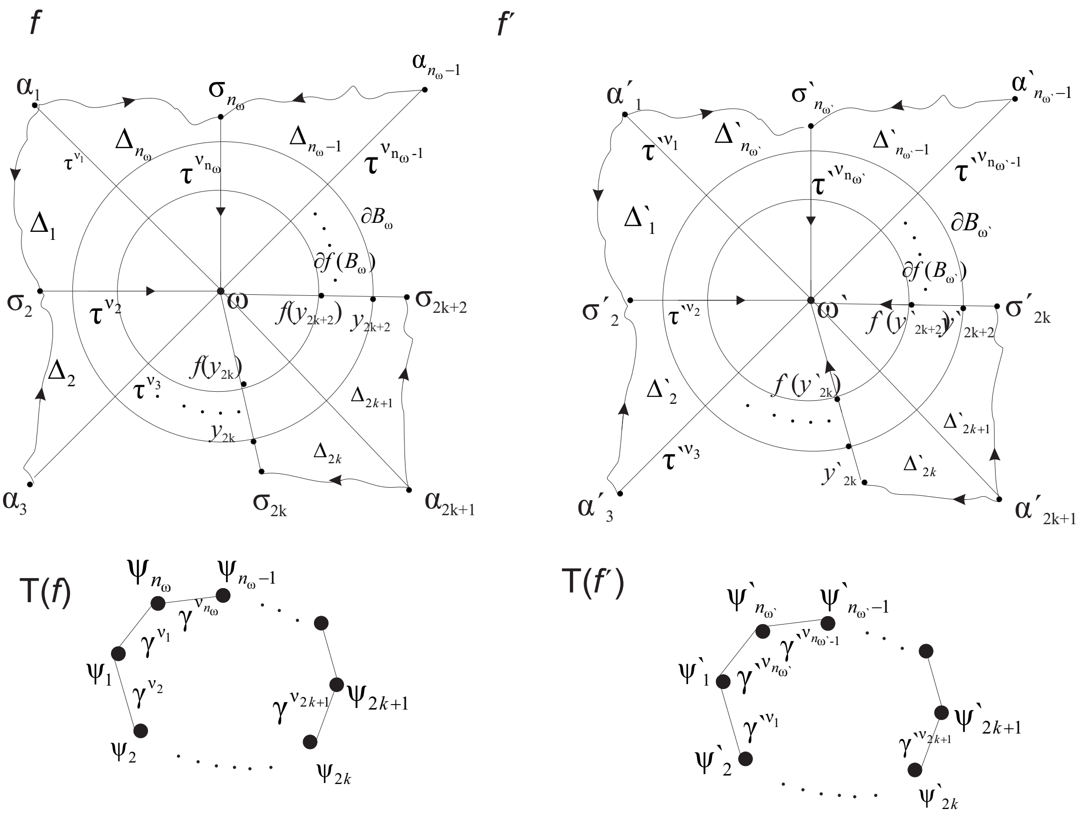
Аналогично лемме 3.2.1 работы [2], устанавливается, что существует гладкий замкнутый диск $B_\omega \subset W^s_\omega$, такой что $\omega \in int B_\omega$, $f(B_\omega) \subset B_\omega$ и любая кривая $\tau^\nu_\omega \in L_\omega$ (где ν - цвет ребра, $\nu \in \{u, t\}$) пересекает кривую $c_\omega = \partial B_\omega$ в единственной точке. Зададим в некоторой точке кривой c_ω пару векторов $(\overrightarrow{\theta}; \overrightarrow{n})$ такую, что вектор $\overrightarrow{n}$ направлен внутрь диска B_ω, вектор $\overrightarrow{\theta}$ касается кривой c_ω и задает на ней направление обхода,

[3] По построению число n_ω четное. Действительно, число сепаратрис, содержащих ω в своем замыкании совпадает с числом ячеек множества $\tilde{M}$, также содержащих ω в своем замыкании. В каждой такой ячейке была выбрана в точности одна t-кривая. Таким образом число n_ω совпадает с удвоенным числом ячеек множества $\tilde{M}$, содержащих ω в своем замыкании.

при котором диск B_ω остается слева (назовем такой обход положительным). Занумеруем кривые, пересекающие c_ω: $\tau_\omega^{\nu_1}, \tau_\omega^{\nu_2}, \dots \tau_\omega^{\nu_{n_\omega}}$ в соответствии с порядком, в котором они встречаются при выбранном обходе вдоль c_ω, начиная с некоторой кривой из множества L_ω. Для определенности положим, что $\tau_\omega^{\nu_1}$ имеет цвет t. Рассмотрим треугольную область, сторонами которой являются кривые $\tau_\omega^{\nu_{2k-1}}$ и $\tau_\omega^{\nu_{2k}}$ $k=\overline{1, n_\omega/2}$ и устойчивая сепаратриса l_σ^s, где $\sigma \in \overline{\tau_\omega^{\nu_{2k}}}$, присвоим этой треугольной области номер $2k-1$ и обозначим ее Δ_{2k-1}. Области со сторонами $\tau_\omega^{\nu_1}$ и $\tau_\omega^{\nu_{n_\omega}}$ присвоим номер n_ω. Заметим, что кривые $\tau_\omega^{\nu_{2k-1}}$ и $\tau_\omega^{\nu_{2k}}$ $k=\overline{1, n_\omega/2}$ имеют разный цвет, так как они являются сторонами одной треугольной области (ранее было указано что, все стороны одной треугольной области имеют разный цвет). Таким образом все $\tau_\omega^{\nu_{2k-1}}$ кривые будут t-кривыми, $\tau_\omega^{\nu_{2k}}$ - u-кривыми.

Обозначим через $\Gamma_\omega \subset \Gamma$ множество вершин трехцветного графа $T(f)$, которым соответствуют треугольные области диффеоморфизма f, содержащие ω в своих замыканиях и положим $\psi_i = \pi^{-1}(\Delta_i)$, где $i=\overline{1, n_\omega}$.

Отображение π переводит треугольные области Δ_{2k-1} и Δ_{2k}, имеющие общую сторону $\tau_\omega^{\nu_{2k}}$, в вершины $\psi_{2k-1} = \pi(\Delta_{2k-1})$ и $\psi_{2k} = \pi(\Delta_{2k})$ трехцветного графа, которые инцидентны некоторому ребру, которое обозначим $\gamma^{\nu_{2k}}$. В силу изоморфизма графов вершины ψ_{2k-1} и ψ_{2k} графа $T(f)$ перейдут в вершины $\psi'_{2k-1} = \eta(\psi_{2k-1})$ и $\psi'_{2k} = \eta(\psi_{2k})$ графа $T(f')$, инцидентные ребру $\gamma'^{\nu_{2k}} = \eta(\gamma^{\nu_{2k}})$. Вершинам ψ'_{2k-1} и ψ'_{2k} трехцветного графа $T(f')$ соответствуют треугольные области $\Delta'_{2k-1} = \pi'^{-1}(\psi'_{2k-1})$ и $\Delta'_{2k} = \pi'^{-1}(\psi'_{2k})$ диффеоморфизма f', граничащие по ребру $\tau_{\omega'}^{\prime\nu_{2k}}$.



Р и с у н о к **2.1**

Таким образом отображение $h = \pi'^{-1}\eta\pi$ ставит в соответствие треугольным областям Δ_{2k-1} и Δ_{2k}, граничащим по стороне $\tau_\omega^{\nu_{2k}}$, диффеоморфизма f треугольные области $\Delta'_{2k-1} = h(\Delta_{2k-1})$ и $\Delta'_{2k} = h(\Delta_{2k})$, граничащие по стороне $\tau_{\omega'}^{\prime\nu_{2k}}$, диффеоморфизма f', где $k=\overline{1, n_\omega/2}$. Треугольным областям Δ_{n_ω} и Δ_1, граничащим по стороне $\tau_\omega^{\nu_1}$, ставятся в соответствие треугольные области $\Delta'_{n_{\omega'}} = h(\Delta_{n_\omega})$ и $\Delta'_1 = h(\Delta_1)$, граничащие по стороне $\tau'^{\nu_1}_{\omega'}$.

Для кривых $c_\omega = \partial B_\omega$ и $c_{\omega'} = \partial B_{\omega'}$ положим, что $y_{2k} = (c_\omega \cap \tau^{\nu_{2k}}_\omega)$ $(k = \overline{1, n_\omega \backslash 2})$ и $y'_{2k} = (c_{\omega'} \cap \tau^{\nu'_{2k}}_{\omega'})$ $(k = \overline{1, n_{\omega'} \backslash 2})$.

Пусть h_c произвольный сохраняющий ориентацию гомеоморфизм $h_c : c_\omega \to c_{\omega'}$, такой, что $h_c(y_{2k}) = y'_{2k}$, где $k = \overline{1, n_\omega \backslash 2}$.

Рассмотрим границу диска $\tilde{c}_\omega = \partial f(B_\omega)$, тогда $f(y_{2k}) = (\tilde{c}_\omega \cap \tau^{\nu_{2k}}_\omega)$ $(k = \overline{1, n_\omega \backslash 2})$. Определим отображение $h_{\tilde{c}} : \tilde{c}_\omega \to \tilde{c}_{\omega'}$ следующим образом. Положим $h_{\tilde{c}}(f(y_{2k})) = f'(y'_{2k})$, где $k = \overline{1, n_\omega \backslash 2}$.

Произвольной точке $\xi \in \tilde{c}_\omega$ поставим в соответствие $\xi' \in \tilde{c}'_\omega$, где $\xi' = f' h_{\tilde{c}} f^{-1}(\xi)$. Часть сепаратрисы $\tau^{\nu_{2k}}_\omega$, находящуюся между точками y_{2k} и $f(y_{2k})$ обозначим через b_{2k}. Пусть $h_{\tau_{2k}} : b_{2k} \to b'_{2k}$ произвольный гомеоморфизм , удовлетворяющий следующим условиям: 1. $h_{\tau_{2k}}(y_{2k}) = h_c(y_{2k})$; 2. $h_{\tau_{2k}}(f(y_{2k})) = h_{\tilde{c}}(y_{2k})$.

Обозначим через a_{2k} дугу $(y_{2k}; y_{2k+2}) \subset c_\omega$ и через $\tilde{a}_{2k}$ дугу $(f(y_{2k}); f(y_{2k+2})) \subset \tilde{c}_\omega$. Обозначим через O_{2k} область, граница которой представляется в виде $\partial O_{2k} = a_{2k} \cup \tilde{a}_{2k} \cup b_{2k} \cup b_{2k+2}$ (рис. 2.2). Пусть $h_{O_{2k}} : \partial O_{2k} \to \partial O'_{2k}$ гомеоморфизм, заданный следующим образом:

$$h_{O_{2k}}(x) = \begin{cases} h_c(x), & \text{если } x \in a_{2k}; \\ h_{\tilde{c}(x)}, & \text{если } x \in \tilde{a}_{2k}; \\ h_{\tau_{2k}(x)}, & \text{если } x \in b_{2k}; \\ h_{\tau_{2k+2}(x)}, & \text{если } x \in b_{2k+2}, \end{cases}$$

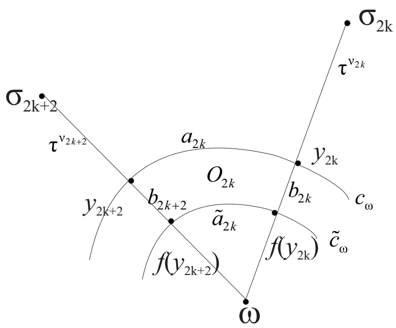


Рисунок **2.2**

Тогда существует гомеоморфизм $H_{O_{2k}} : O_{2k} \to O'_{2k}$ такой, что $H_{O_{2k}}|_{\partial O_{2k}} = h_{O_{2k}}|_{\partial O_{2k}}$. Положим $K_\omega = \overline{B_\omega \backslash f(B_\omega)} (K_{\omega'} = \overline{B_{\omega'} \backslash f'(B_{\omega'})})$. По построению $K_\omega = \bigcup\limits_{k=1}^{n_\omega \backslash 2} O_{2k}$ и обозначим через

$$H_{c_\omega} : K_\omega \to K_{\omega'}$$

гомеоморфизм, совпадающий с $H_{O_{2k}}$ на множестве O_{2k}.

Зададим гомеоморфизм $h_\omega : B_\omega \to B_{\omega'}$, полагая, $h_\omega(x) = f'^k(H_{c_\omega}(f^{-k}(x)))$ для любой точки $x \in B_\omega$, где $f^{-k}(x) \in K_\omega$, $k \in Z$. Тогда гомеоморфизм $\tilde{h} : M_2 \to M'_2$, составленный из гомеоморфизмов h_ω для всех $\omega \in \Omega_0$, является искомым.

Доказательство закончено.

Для доказательства достаточности нам понадобится понятие схемы диффеоморфизма, введенное в [2].

Положим $V_f = W^s_{\Omega_0} \setminus \Omega_0$ - пространство орбит диффеоморфизма f, названное в [2] характеристическим многообразием и $\hat{V}_f = V_f/f$ - характеристическим пространством орбит для диффеоморфизма f. В силу [2] (предложение 2.1.5, теорема 2.1.3) многообразие $\hat{V}_f$ гомеоморфно двумерному тору $\mathbb{T}^2$. Обозначим через $p_{\hat{V}_f} : V_f \to \hat{V}_f$ естественную проекцию, являющуюся накрытием, индуцирущим отображение $\zeta_f : \pi^{-1}(\hat{V}_f) \to \mathbb{Z}$, которое состоит из нетривиальных гомоморфизмов в группу $\mathbb{Z}$ на фундаментальной группе каждого тора из множества $\hat{V}_f$.

Для любой седловой точки $\sigma \in \Omega_1$ положим. $\hat{W}^u_\sigma = \ p_f(W^u_\sigma \setminus \sigma)$ и $\mathbb{W}^u_f = \bigcup_{\sigma \in L_{\Omega_1}} W^u_\sigma$.

Набор $S_f = (\hat{V}_f, \mathbb{W}^u_f, \zeta_f)$ назовем схемой диффеоморфизма f.

О п р е д е л е н и е 2.1. *Схемы S_f и $S_{f'}$ диффеоморфизмов назовем эквивалентными, если существует гомеоморфизм $\hat{\varphi} : \hat{V}_f \to \hat{V}_{f'}$, такой что:*

1. $\zeta_f([c]) = \zeta_{f'}([\hat{\varphi}(c)])$ *для любой замкнутой кривой* $c \subset \hat{V}_f$*;*

2. *для любой седловой точки* $\sigma \in \Omega_1$ *существует* $\sigma' \in \Omega'_1$*, такая что* $\widehat{\varphi}(\hat{W}^u_\sigma) = \hat{W}^u_{\sigma'}$.

Следующая лемма устанавливает взаимосвязь схемы и трехцветного графа:

Л е м м а 2.2. *Если диффеоморфизмы f, f' имеют изоморфные трехцветные графы T_f, T'_f, то их схемы S_f, $S_{f'}$ эквивалентны.*

Д о к а з а т е л ь с т в о. В силу леммы 2.1. существует гомеоморфизм $\tilde{h}$: $M^2 \setminus \bigcup\limits_{\sigma \in \Omega_1} W^s_\sigma \to M^2 \setminus \bigcup\limits_{\sigma' \in \Omega_1} W^s_{\sigma'}$, сопрягающий ограничения диффеоморфизмов на этих множества. Отображение $\hat{\varphi} = \pi\tilde{h}\pi'^{-1}$ является гомеоморфизмом, осуществляющим эквивалентность схем $\hat{V}_f$ и $\hat{V}_{f'}$.

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

В силу леммы 3.2.3 книги [2] из изоморфности схем S_f и $S_{f'}$ следует гомеоморфизм диффеоморфизмов f и f'.

Таким образом, теорема 1.1. доказана.

3. Некоторые примеры

Приведем пример построения трехцветного графа для градиентно-подобного диффеоморфизма на двумерном многообразии.

На рис. 3.1 представлены фазовые портреты несопряженных диффеоморфизмов Морса-Смейла на двумерной сфере (точкам, обозначенным буквой α для f (α' для f'), соответствует в точности одна источниковая точка диффеоморфизма двумерной сферы). Графы Пейкшото, построенные для этих диффеоморфизмов, являются изоморфными (рис. 3.2), а трехцветные графы - неизоморфными (рис. 3.3).

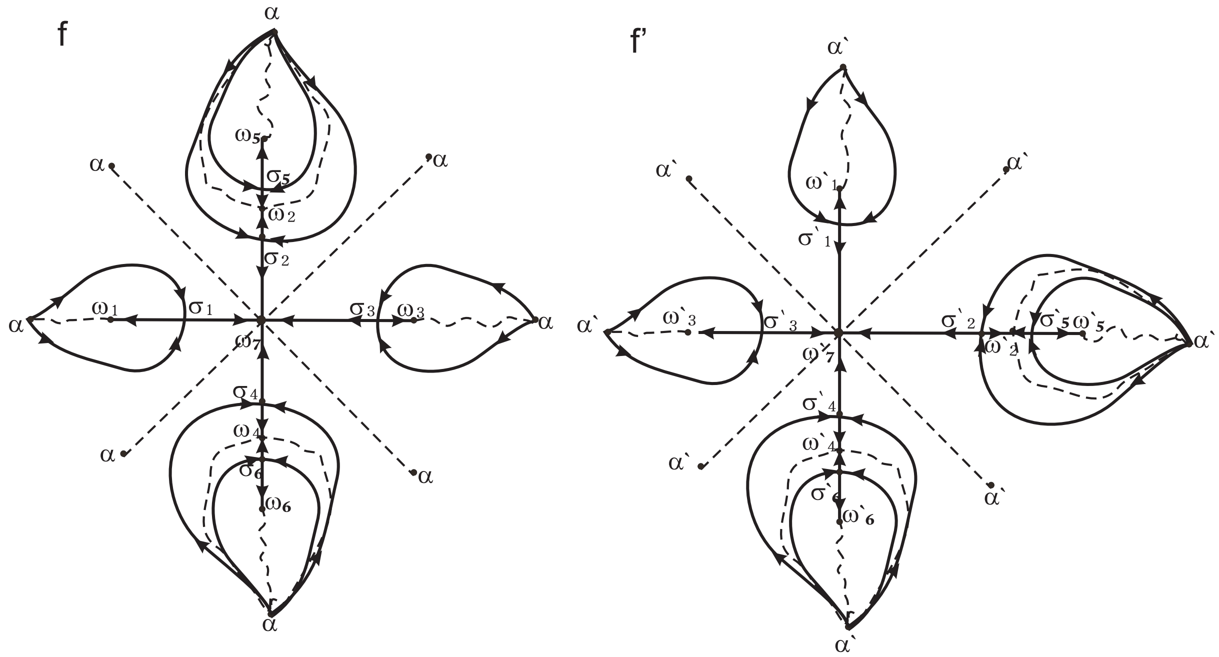


Рисунок **3.1**

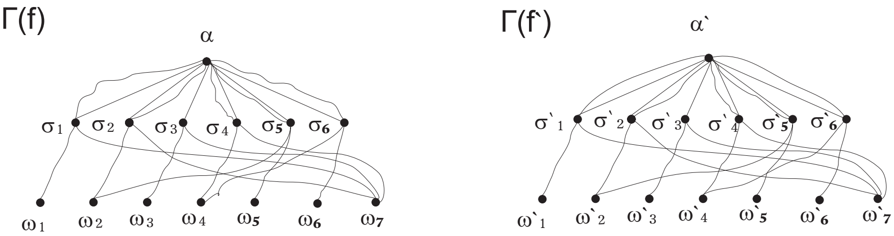


Рисунок **3.2**

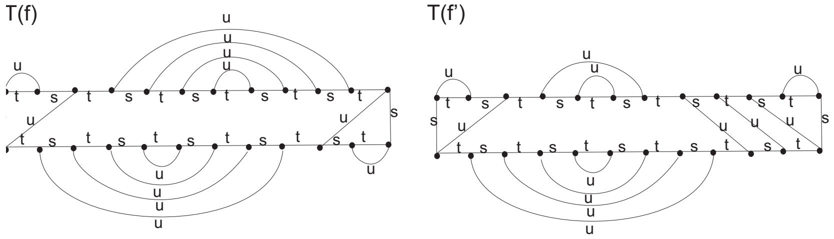


Рисунок **3.3**

Автор выражает благодарность В. З. Гринесу за постановку задачи и внимание к работе.

Список литературы

1. Безденежных А. Н., Гринес В. З., “Динамические свойства и топологическая классификация градиентно-подобных диффеоморфизмов на двумерных многообразиях”, *Методы качественной теории дифференциальных уравнений: межвуз. тематич. сб. науч. тр.*. Т. Ч. 2, ред. Е. А. Леонтович-Андронова, ГГУ, Горький, 1987, 24–32.

2. Гринес В. З., Починка О. В, *Введение в топологическую классификацию каскадов на многообразиях размерности два и три*, НИЦ Регулярная и хаотическая динамика, Ижевский институт компьютерных исследований, Ижевск, 2011, 424 с.

3. Леонтович Е., Майер А. О, “О схеме, определяющей топологическую структуру разбиения на траектории”, *Доклады академии наук СССР*, **4**, 103 (1955), 557–560.

4. Ошемков А. А., Шарко В. В., “О классификации потоков Морса-Смейла на двумерных многообразиях”, *Математический сборник*, **8**, 189 (1998), 93-140.

5. Peixoto M. M., “On the classification of flows on 2-manifolds”, *Dynamical systems*, 1973, 389-419.

On topological classification of grad-like diffeomorphisms on surfaces by means of three-color graph.

© **S. H. Kapkaeva**[4]

Abstract. The paper is devoted to finding of necessary and sufficient conditions for topological conjugacy of gradient-like diffeomorphisms on surfaces whose non-wandering set consists of fixed points. It is shown that three-color graph (deneralising the similar concept introduced in paper [4]) associated with given diffeomorphism is complete topological invariant of diffeomorphism from considered class.

Key Words: Morse-Smale diffeomorphisms, gradient-like diffeomorphisms, topological conjugate diffeomorphisms, three-color graph.

[4] Student, faculty of Mathematics, Mordovian State University after N.P. Ogarev, Saransk; kapkaevasvetlana@yandex.ru.

УДК 519.853.62

ПОДМ с проектированием в переменной метрике

© В. Г. Малинов [1]

Аннотация. В работе впервые исследуется проекционный обобщённый двухшаговый двухэтапный метод (ПОДМ) с проектированием в переменной метрике (ПОДМПМ) для решения конечномерных задач минимизации на выпуклом замкнутом множестве в евклидовом пространстве, для решения функциональных уравнений и других задач. Сходимость метода доказана для выпуклых гладких функций с Липшицевыми градиентами. Получены оценки скорости сходимости: линейной - для выпуклых гладких функций, сверхлинейной и квадратичной - для дважды гладких функций при дополнительных условиях.

Ключевые слова: ПОДМПМ, проектирование в переменной метрике, сходимость, скорость сходимости.

1. Постановка задачи

Рассмотрим задачу минимизации на выпуклом замкнутом простом множестве

$$f(\mathbf{x}) \longrightarrow \inf, \quad \mathbf{x} \in Q \subset E^n, \tag{1.1}$$

где n-мерное евклидово пространство E^n нормировано скалярным произведением, $\|\mathbf{x}\| = (\mathbf{x},\mathbf{x})^{1/2}\ \forall\, \mathbf{x} \in E^n$, выпуклая функция $f(\mathbf{x}) \in C^{1,1}(Q)$. Предполагаем, что функция $f(\mathbf{x})$ имеет *гиперповерхности уровней овражной структуры* и ограничена снизу, множество её минимумов не пусто:

$$\inf f(\mathbf{x}) = f_* > -\infty,\ \mathbf{x} \in Q; \quad Q_* = \{\mathbf{x} \in Q:\ f(\mathbf{x}) = f_*\} \neq \emptyset. \tag{1.2}$$

Множество сложных задач поставленного вида не решаются существующими методами или методы имеют низкую скорость сходимости в окрестности минимума функции, ввиду наличия овражности функции. Традиционные, ставшие классическими, многошаговые методы проекции градиента (МПГ) (см., например, [1]– [4]) без специальной процедуры локального поиска этим недостатком также обладают. В связи с этим предложены непрерывные МПГ в пространствах с переменной метрикой (НМПГПМ) [5]– [6] для задач, описываемых обыкновенными дифференциальными уравнениями. Для других задач оптимизации вида (1.1), не связанных с непрерывными моделями, предложены и исследованы итеративные методы с переменной метрикой класса ПОДМ [7]– [8]. Кратко напомним, что *проекционные обобщённые двухшаговые двухэтапные* методы (ПОДМ) минимизации функций с «овражными» гиперповерхностями уровней — это класс проекционных двухшаговых методов, строящих минимизирующую последовательность $\left\{\mathbf{x}^k\right\} \longrightarrow \mathbf{x}^* \in Q_*$ с помощью прогнозной точки $\mathbf{z}^k = \mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{y}^k$ на «склоне оврага» (где $\mathbf{y}^k = \mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k-1}$) или проекции $\mathbf{z}^k = P_Q\left(\mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{y}^k\right)$ (где α_k – один из параметров методов класса) и проводящие минимизацию из точки $\mathbf{z}^k$ вдоль направлении убывания функции — линейной комбинации вектора $\mathbf{y}^k$ и антиградиента $-\nabla f(\mathbf{z}^k)$ (см., например, [4], [7], [8]). Ввиду использования градиентов $\nabla f(\mathbf{z}^k)$ большей величины на склоне оврага (в отличие от методов, использующих малый градиент $\nabla f(\mathbf{x}^k)$ на «дне» оврага), ПОДМ мало чувствительны к овражности функций и ошибкам округлений [2].

[1] Доцент кафедры ЭММиИТ, Ульяновский госуниверситет, г. Ульяновск; vgmalinov@mail.ru.

Исследуемые ПОДМ с проектированием в переменной метрике обладают свойствами, объединяющими достоинства методов класса ПОДМ и методов переменной метрики (последние для задач безусловной минимизации называют квазиньютоновскими).

Отметим, что: 1) здесь идея, реализованная при построении НМПГПМ [5], распространена на итеративные ПОДМ квазиньютоновского типа; 2) основанные на другой идее многошаговые методы переменной метрики для *решения задач безусловной минимизации* построены иначе (см., например, [9]– [10]); 3) в данной работе полные результаты исследования ПОДМ с проектированием в переменной метрике излагаются впервые; 4) здесь получены оценки линейной, сверхлинейной и квадратичной скорости сходимости ПОДМПМ.

2. Пространство E_1^n и предлагаемый метод

Наряду с существующей метрикой и оператором $P_Q(\mathbf{v})$ проектирования вектора $\mathbf{v} \in E^n$ на множество Q, введём в E^n новую метрику с помощью нового скалярного произведения $(\mathbf{B}(\mathbf{x})\mathbf{u},\mathbf{u})\ \forall\,\mathbf{u},\mathbf{x} \in E^n$, где $\mathbf{B}(\mathbf{x}):\ E^n \longrightarrow E^n$, при каждом фиксированном $\mathbf{x} \in E^n$, суть положительно определённый самосопряженный линейный оператор метрики пространства; $P_Q^{\mathbf{B}(\mathbf{x})}[\mathbf{v}]$ суть оператор проектирования в метрике $\mathbf{B}(\mathbf{x})$ вектора $\mathbf{v} \in E^n$ на множество Q. Критерием проекции $\mathbf{w} = P_Q^{\mathbf{B}(\mathbf{x})}[\mathbf{v}] \in Q$ в новой метрике служит неравенство [6]

$$(\mathbf{B}(\mathbf{x})(\mathbf{w}-\mathbf{v}),\mathbf{u}-\mathbf{w}) \geq 0,\ \mathbf{u} \in Q. \tag{2.1}$$

Проекция существует и единственна как решение $\mathbf{w} \in Q$ квадратичной задачи

$$g(\mathbf{u}) = (\mathbf{B}(\mathbf{x})(\mathbf{u}-\mathbf{v}),\mathbf{u}-\mathbf{v}) \longrightarrow \inf,\ \mathbf{u} \in Q, \tag{2.2}$$

в силу выпуклости множества Q и сильной выпуклости функции $g(\mathbf{u})$ [6]. Полученное евклидово пространство с двумя скалярными произведениями и определяемыми ими метриками обозначим E_1^n, далее подразумеваем задачу вида (1.1) в нём. В построенном пространстве для решения задачи исследуем ПОДМПМ:

$$1\ \text{этап.}\mathbf{y}^k = \mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k-1},\ \mathbf{z}^k = \mathbf{x}^k + \alpha_k\mathbf{y}^k,\ \mathbf{x}^0,\mathbf{x}^1 \in E_1^n,\ f(\mathbf{x}^0) > f(\mathbf{x}^1); \tag{2.3}$$

$$2\ \text{этап.}\quad \mathbf{x}^{k+1} = P_Q^{\mathbf{B}(\mathbf{z}^k)}\left[\mathbf{z}^k - \beta_k[\mathbf{B}(\mathbf{z}^k)]^{-1}\nabla f(\mathbf{z}^k)\right], k = 1,2,..., \tag{2.4}$$

где $\mathbf{x}^0$ – начальная точка; точку $\mathbf{x}^1 \neq \mathbf{x}^0$ выбираем такую, что $f(\mathbf{x}^0) > f(\mathbf{x}^1)$; α_k, β_k – параметры метода; $\mathbf{B}(\mathbf{z}^k) = \mathbf{B}_k$ – последовательность положительно определённых самосопряжённых линейных операторов. В зависимости от выбора операторов $\mathbf{B}_k$ и способов выбора параметров метода, из (2.3), (2.4) получаем различные ПОДМПМ первого порядка, а при $\mathbf{B}(\mathbf{z}^k) = \nabla^2 f(\mathbf{z}^k)$ — ПОДМ второго порядка. Оператор $\mathbf{B}(\mathbf{x})$ в (2.4) таков, что

$$m\|\mathbf{u}\|^2 \leq (\mathbf{B}(\mathbf{x})\mathbf{u},\mathbf{u}),\quad m > 0,\ \forall\,\mathbf{u},\mathbf{x} \in E_1^n. \tag{2.5}$$

Отметим, что в отличие от методов из работ [7], [13], ввиду использования в (2.3), (2.4) проекции $P_Q^{\mathbf{B}(\mathbf{x})}(\mathbf{v})$ в метрике $\mathbf{B}(\mathbf{x})$, а не проекции в обычной метрике $P_Q(\mathbf{v})$, возникают трудности в доказательстве сходимости, которые преодолеваются с помощью получаемого в лемме 5 нового неравенства. При вычислительной реализации метода (2.3), (2.4) задача (2.2) решается численно.

К операторам $\mathbf{B}(\mathbf{x})$ с указанными выше свойствами, кроме выполнения (2.5), в работе предъявляется требование выполнения неравенства $(\mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x}^*)\nabla f(\mathbf{x}^*),\mathbf{u}-\mathbf{x}^*) \geq 0\ \forall\ \mathbf{u} \in$

$Q, \mathbf{x}^* \in Q_*$. Это неравенство доказывается в леммах 1 и 2. Предполагается, что формируемые в (2.4) векторы $\mathbf{p}(\mathbf{z}^k) = -[\mathbf{B}(\mathbf{z}^k)]^{-1}\nabla f(\mathbf{z}^k)$, $k = 1, 2, \ldots$ задают направления убывания функции $f(\mathbf{x})$ в точках $\mathbf{z}^k$ и составляют острый угол с направлением антиградиента $-\nabla f(\mathbf{z}^k)$, направлены в сторону точки минимума функции; следовательно, $(\nabla f(\mathbf{z}^k), \mathbf{p}^k) > 0$, *это не оговаривается в дальнейшем.* В теореме 4 используется сходимость последовательности операторов $\mathbf{B}_k$ к гессиану. Обобщение неравенства из работы [11] для $\mathbf{B}_k$ применяется в доказательстве теоремы 5.

3. Вспомогательные утверждения

Для независимости изложения от других источников, приведём вспомогательные утверждения для доказательства сходимости и оценок скорости сходимости метода семейства (2.3), (2.4). Большая часть из них доказана в работах [7], [13].

Примечание 1. По самому построению пространства E_1^n в нём, наряду с (2.1), имеет место критерий ([1], с. 189)

$$(\mathbf{w} - \mathbf{v}, \mathbf{u} - \mathbf{w}) \geq 0 \;\forall \mathbf{u} \in Q \tag{3.0}$$

проекции $\mathbf{w} \in Q$ вектора $\mathbf{v} \in E_1^n$ на выпуклое замкнутое множество $Q \subset E_1^n$. Поскольку евклидовы пространства с различными скалярными произведениями изоморфны ([12], с. 124, 127), в E_1^n сохраняются все соотношения и теоремы из E^n, связанные со скалярным произведением $(\mathbf{x}, \mathbf{x})$.

В леммах даны соотношения, полезные при доказательстве сходимости и оценке скорости сходимости ПОДМПМ и других методов класса ПОДМ в E^n и E_1^n, для определённости они доказываются в одном из этих пространств.

Лемма 1. *Пусть выпуклые функции $f(\mathbf{x})$ и $\varphi(\mathbf{x})$ класса $C^{1,1}(E_1^n)$ таковы, что*

$$\nabla\varphi(\mathbf{x}) = \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x})\nabla f(\mathbf{x}) \;\forall\, \mathbf{x} \in E_1^n \tag{3.1}$$

и множество точек минимума функций $f(\mathbf{x})$ и $\varphi(\mathbf{x})$ не пусто, $Q_* \neq \emptyset$.

Тогда для $\mathbf{x}^* \in Q_*$ в пространстве E_1^n имеет место неравенство

$$\left(\mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x}^*)\nabla f(\mathbf{x}^*), \mathbf{u} - \mathbf{x}^*\right) \geq 0 \;\forall\, \mathbf{u} \in Q. \tag{3.2}$$

Доказательство. Пользуясь формулой Лагранжа для функции $\varphi(\mathbf{x})$, определением точки минимума $\mathbf{x}^* \in Q_* \subset Q \subset E_1^n$ и (3.1), получим:

$$\varphi(\mathbf{u}) - \varphi(\mathbf{x}^*) = (\nabla\varphi(\mathbf{x}^*), \mathbf{u} - \mathbf{x}^*) = \left(\mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x}^*)\nabla f(\mathbf{x}^*), \mathbf{u} - \mathbf{x}^*\right) \geq 0,\; \mathbf{u} \in Q.$$

Лемма 1 доказана.

Лемма 2. *Пусть множество $Q \subset E_1^n$ выпукло и замкнуто, выпуклая функция $f(\mathbf{x}) \in C^{1,1}(Q)$, выполнены (1.2), $\mathbf{x}^* \in Q_* \subset Q \subset E_1^n$. Тогда из равенства*

$$\mathbf{x}^* = P_Q\left[\mathbf{x}^* - \beta\mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x}^*)\nabla f(\mathbf{x}^*)\right] \tag{3.3}$$

следует неравенство (3.2).

Доказательство. Согласно необходимому и достаточному условию (3.0) проекции $\mathbf{w} = P_Q(\mathbf{v}) \in Q$ в исходной метрике пространства E_1^n при $\mathbf{x}^* \in Q_*$ получаем вариационное неравенство

$$\left(\mathbf{x}^* - (\mathbf{x}^* - \beta\mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x}^*)\nabla f(\mathbf{x}^*)), \mathbf{u} - \mathbf{x}^*\right) \geq 0,\; \mathbf{u} \in Q.$$

Отсюда следует неравенство $\beta\left(\mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x}^*)\nabla f(\mathbf{x}^*), \mathbf{u}-\mathbf{x}^*\right) \geq 0,\ \mathbf{u} \in Q$. В силу положительности β, последнее неравенство влечёт (3.2).

Лемма 2 доказана.

Примечание 2. Неравенство (3.2) и равенство (3.3) выражают аналогичный данному в [1] для пространства E^n критерий оптимальности для указанных функций $f(\mathbf{x})$ на выпуклом замкнутом множестве $Q \subset E_1^n$. Следующая лемма выражает связь между необходимыми условиями оптимальности точки $\mathbf{x}^*$ для функции $f(\mathbf{x})$ в исходной метрике пространства E^n ([1], с. 165) и в метрике $\mathbf{B}(\mathbf{x})$ пространства E_1^n в терминах оператора проекции $P_Q^{\mathbf{B}(\mathbf{x})}$.

Лемма 3. *Пусть: 1) множество $Q \subset E_1^n$ выпукло и замкнуто; 2) выпуклая функция $f(\mathbf{x}) \in C^{1,1}(Q)$; 3) $Q_* \neq \emptyset$, $\mathbf{x}^* \in Q_* \subset Q \subset E_1^n$.*

Тогда из равенства $\mathbf{x}^* = P_Q^{\mathbf{B}(\mathbf{x}^*)}\left[\mathbf{x}^* - \beta\mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x}^*)\nabla f(\mathbf{x}^*)\right]$ следует неравенство

$$(\nabla f(\mathbf{x}^*), \mathbf{u}-\mathbf{x}^*) \geq 0,\ \forall\, \mathbf{u} \in Q. \tag{3.4}$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Из данного равенства, пользуясь в новой метрике пространства E_1^n критерием (2.1) $\mathbf{B}(\mathbf{x})$ – проекции $P_Q^{\mathbf{B}(\mathbf{x})}(\mathbf{v}) \in Q$ при $\mathbf{x} = \mathbf{x}^* \in Q_*$ получим неравенство

$$\left(\mathbf{B}(\mathbf{x}^*)\left(\mathbf{x}^* - \mathbf{x}^* + \beta\mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x}^*)\nabla f(\mathbf{x}^*)\right), \mathbf{u}-\mathbf{x}^*\right) \geq 0, \quad \mathbf{u} \in Q,$$

которому эквивалентно следующее: $\beta\left(\mathbf{B}(\mathbf{x}^*)\mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x}^*)\nabla f(\mathbf{x}^*), \mathbf{u}-\mathbf{x}^*\right) \geq 0,\ \forall\, \mathbf{u} \in Q$. Отсюда в силу свойств операторов имеем $\beta\left(\nabla f(\mathbf{x}^*), \mathbf{u}-\mathbf{x}^*\right) \geq 0\ \forall\, \mathbf{u} \in Q$. Это неравенство, поскольку $\beta > 0$, влечёт (3.4).

Лемма 3 доказана.

Лемма 4. *В евклидовом пространстве E_1^n имеет место двойное неравенство*

$$\begin{aligned}(1-\varepsilon)\|\mathbf{u}-\mathbf{v}\|^2 + (1-\varepsilon^{-1})\|\mathbf{v}-\mathbf{w}\|^2 \leq \|\mathbf{u}-\mathbf{w}\|^2 \leq \\ \leq (1+\varepsilon)\|\mathbf{u}-\mathbf{v}\|^2 + (1+\varepsilon^{-1})\|\mathbf{v}-\mathbf{w}\|^2, \quad \mathbf{u},\mathbf{v},\mathbf{w} \in E_1^n.\end{aligned} \tag{3.5}$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Воспользуемся известным равенством

$$\|\mathbf{u}-\mathbf{w}\|^2 = \|\mathbf{u}-\mathbf{v}\|^2 + 2(\mathbf{u}-\mathbf{v}, \mathbf{v}-\mathbf{w}) + \|\mathbf{v}-\mathbf{w}\|^2,\ \forall\, \mathbf{u},\mathbf{v},\mathbf{w} \in E_1^n, \tag{3.6}$$

запишем его в форме $\|\mathbf{u}-\mathbf{w}\|^2 = \|\mathbf{u}-\mathbf{v}\|^2 - 2(\mathbf{u}-\mathbf{v}, \mathbf{w}-\mathbf{v}) + \|\mathbf{v}-\mathbf{w}\|^2$ и второе слагаемое в его правой части оценим с помощью неравенства

$$2|(\mathbf{u}-\mathbf{v}, \mathbf{w}-\mathbf{v})| \leq \varepsilon\|\mathbf{u}-\mathbf{v}\|^2 + \varepsilon^{-1}\|\mathbf{w}-\mathbf{v}\|^2,\ \varepsilon > 0. \tag{3.7}$$

Тогда получим $\|\mathbf{u}-\mathbf{w}\|^2 \geq \|\mathbf{u}-\mathbf{v}\|^2 - \varepsilon\|\mathbf{u}-\mathbf{v}\|^2 - \varepsilon^{-1}\|\mathbf{v}-\mathbf{w}\|^2 + \|\mathbf{v}-\mathbf{w}\|^2$. Отсюда следует левая часть неравенства (3.5). Пользуясь (3.7) в равенстве (3.6), получим правую часть (3.5), совпадающую с известным неравенством.

Лемма 4 доказана.

Отметим, что правое неравенство (3.5) известное, здесь оно для единообразия выведено в пространстве E_1^n, а левое неравенство (3.5) является результатом объединения применявшихся ранее при обосновании методов оптимизации разрозненных процедур получения нижней оценки квадрата нормы разности векторов в E^n.

Лемма 5. *Для всякой тройки точек $\mathbf{u},\mathbf{v},\mathbf{x} \in E_1^n$ имеет место неравенство*

$$\|\mathbf{u}-\mathbf{v}\|^2 \geq (\varepsilon-1)\|\mathbf{u}-\mathbf{x}\|^2 - (1-\varepsilon^{-1})\|\mathbf{v}-\mathbf{x}\|^2, \tag{3.8}$$

где $0 < \varepsilon_1 \le \varepsilon \le \varepsilon_2$, $\varepsilon_{1,2} = \left[s \mp (s^2 - 4l_2l_3)^{1/2}\right]/(2l_2)$, $l_1 = \|\mathbf{u}-\mathbf{v}\|^2$, $l_2 = \|\mathbf{u}-\mathbf{x}\|^2$, $l_3 = \|\mathbf{v}-\mathbf{x}\|^2$, $s = l_1 + l_2 + l_3$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Поскольку E_1^n метрическое пространство с исходной метрикой $\rho(\mathbf{u},\mathbf{v}) = \|\mathbf{u}-\mathbf{v}\| \; \forall \, \mathbf{u},\mathbf{v} \in E_1^n$, в нём имеет место неравенство ([12], с. 31)

$$|\rho(\mathbf{u},\mathbf{x}) - \rho(\mathbf{v},\mathbf{y})| \le \rho(\mathbf{u},\mathbf{v}) + \rho(\mathbf{x},\mathbf{y}) \forall \, \mathbf{u},\mathbf{v},\mathbf{x},\mathbf{y} \in E_1^n.$$

Отсюда с помощью формулы для метрики при $\mathbf{x} = \mathbf{y}$ получим $|\|\mathbf{u}-\mathbf{x}\| - \|\mathbf{v}-\mathbf{x}\|| \le \|\mathbf{u}-\mathbf{v}\| + \|\mathbf{x}-\mathbf{x}\|$. Возведём его в квадрат и воспользуемся формулой для квадрата разности, $|\|\mathbf{u}-\mathbf{x}\|^2 - 2\|\mathbf{u}-\mathbf{x}\|\|\mathbf{v}-\mathbf{x}\| + \|\mathbf{v}-\mathbf{x}\|^2| \le \|\mathbf{u}-\mathbf{v}\|^2$, удвоенное произведение под знаком модуля оценим с помощью аналога неравенства (3.7). Тогда придём к неравенству

$$|\|\mathbf{u}-\mathbf{x}\|^2 - \varepsilon\|\mathbf{u}-\mathbf{x}\|^2 - \varepsilon^{-1}\|\mathbf{v}-\mathbf{x}\|^2 + \|\mathbf{v}-\mathbf{x}\|^2| \le \|\mathbf{u}-\mathbf{v}\|^2.$$

Представим абсолютную величину в форме двойного неравенства

$$-\|\mathbf{u}-\mathbf{v}\|^2 \le (1-\varepsilon)\|\mathbf{u}-\mathbf{x}\|^2 + (1-\varepsilon^{-1})\|\mathbf{v}-\mathbf{x}\|^2 \le \|\mathbf{u}-\mathbf{v}\|^2. \tag{3.9}$$

Возьмём левую часть этого неравенства и, умножив на -1, придём к неравенству (3.8). Решая неравенство (3.8) относительно $\varepsilon > 0$ при данных обозначениях, получаем для этого числа интервал возможных в (3.8) значений. Заметим, что правое неравенство в (3.9) при $\mathbf{u} = \mathbf{u}, \, \mathbf{x} = \mathbf{v}, \, \mathbf{v} = \mathbf{w}$ совпадает с левым неравенством (3.5).

Лемма 5 доказана.

Примечание 3. Верхняя и нижняя границы числа ε в (3.8) зависят от соотношений длин сторон треугольника с вершинами $\mathbf{v},\mathbf{u},\mathbf{x}$ (например, здесь это упорядоченная тройка точек в порядке вычисления по итерационной формуле (2.4) $\mathbf{x}^k, \mathbf{x}^{k+1}, \mathbf{x}^*$; случай их расположения на одной прямой не исключается). Зададим дополнительные ограничения, при которых допустимы конкретные значения ε , используемые в доказательствах теорем. Например, не обременительны условия:

а) $\|\mathbf{u}-\mathbf{x}\| \le \|\mathbf{u}-\mathbf{v}\| \le \|\mathbf{v}-\mathbf{x}\|$, они при $\mathbf{v} = \mathbf{x}^k$, $\mathbf{u} = \mathbf{x}^{k+1}$, $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$ запишутся в виде

$$\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\| \le \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\| \le \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|; \tag{3.10}$$

б) $2\|\mathbf{u}-\mathbf{x}\| \le \|\mathbf{u}-\mathbf{v}\| \le \|\mathbf{v}-\mathbf{x}\|$, их аналог $2\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\| \le \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\| \le \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|$;

в) $(11/5)\|\mathbf{u}-\mathbf{x}\| \le \|\mathbf{u}-\mathbf{v}\| \le \|\mathbf{v}-\mathbf{x}\|$, их аналог $(11/5)\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\| \le \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\| \le \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|$;

В случае а) для вычисления границ ε решаем следующее из (3.8) неравенство

$$l_2\varepsilon^2 - s\varepsilon + l_3 \le 0, \tag{3.11}$$

полагая $l_1 = l_2 = l_3$. Получаем значения $\varepsilon_{1,2} = (3 \mp 5^{1/2})/2$, то есть округлённо можно принять значения из множества $0.39 \le \varepsilon \le 2.61$. В случае б) решаем неравенство, следующее из (3.11), положив $4l_2 = l_1 = l_3$; получаем границы $\varepsilon_{1,2} = (9 \mp 65^{1/2})/2$; тогда приближённый отрезок возможных значений $0.47 \le \varepsilon \le 8.5$. В случае в) решаем неравенство, аналогичное (3.11), положив $(121/25)l_2 = l_1 = l_3$; получаем границы $\varepsilon_{1,2} = (267 \mp 60189^{1/2})/50$; тогда приближённое множество возможных значений $0.47 \le \varepsilon \le 10$, достаточно для применения (3.8) в данной работе.

Отметим, что неравенство (3.8) является новым в обосновании методов решения экстремальных задач и выведено для обоснования методов класса ПОДМ, необходимый математический инструмент при доказательстве сходимости и оценке скорости сходимости методов минимизации. Появление дополнительных ограничений неравенств при его применении здесь представляется естественным. Неравенство (3.8) получено на основе известного из функционального анализа неравенства четырёхугольника для метрики. Его частный случай известен как второе неравенство треугольника для метрики ([14], с. 27) $|\rho(\mathbf{x},\mathbf{z}) - \rho(\mathbf{y},\mathbf{z})| \le \rho(\mathbf{x},\mathbf{y}) \; \forall \, \mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z} \in X$ в метрическом пространстве (X,ρ) .

4. Обоснование сходимости метода

Исследуем сходимость ПОДМПМ (2.3), (2.4) с параметрами константами $\alpha_k = \alpha,\ \beta_k = \beta$.

Теорема 1. *Пусть выполнены следующие условия: 1) множество $Q \subset E_1^n$ выпукло и замкнуто; 2) функция $f(\mathbf{x}) \in C^{1,1}(Q)$ выпуклая и выполнены соотношения (1.2); 3) последовательность $\left\{\mathbf{x}^k\right\}$ метода (2.3), (2.4) такова, что имеют место неравенства (3.10в); 4) для оператора $\mathbf{B}(\mathbf{x})\ \forall\ \mathbf{x} \in E_1^n$ с указанными в п.2 свойствами выполняется неравенства (2.5); 5) параметры константы метода семейства (2.3), (2.4) таковы, что*

$$0 < \alpha \leq 3/8,\ 0 < \beta \leq [4(m^2+m)b - 35(1+\alpha)]/(Lb), \tag{4.1}$$

где $b = 21 - 4\alpha$, $m^2 + m > 5/12$.

Тогда последовательность $\left\{\mathbf{x}^k\right\}$, *определяемая методом (2.3), (2.4), (4.1), из любой начальной точки* $\mathbf{x}^0 \in E_1^n$ *сходится к точке* $\mathbf{x}^* \in Q_*$,

$$\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\| \longrightarrow 0, \quad f(\mathbf{x}^k) \longrightarrow f(\mathbf{x}^*), \quad k \to \infty. \tag{4.2}$$

Доказательство. Из характеристического свойства (2.1) оператора проектирования в новой метрике пространства E_1^n и (2.4) получим вариационное неравенство

$$\left(\mathbf{B}(\mathbf{z}^k)\left[\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{z}^k + \beta\mathbf{B}(\mathbf{z}^k)^{-1}\nabla f(\mathbf{z}^k)\right], \mathbf{v} - \mathbf{x}^{k+1}\right) \geq 0,\ k \geq 1,\ \mathbf{v} \in Q. \tag{4.3}$$

Это неравенство запишем в форме

$$\begin{gathered}\left(\mathbf{B}(\mathbf{z}^k)(\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{z}^k), \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{z}^k\right) + \left(\mathbf{B}(\mathbf{z}^k)(\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{z}^k), \mathbf{z}^k - \mathbf{v}\right) \leq \\ \leq \beta\left(\nabla f(\mathbf{z}^k), \mathbf{v} - \mathbf{x}^{k+1}\right),\ k \geq 1,\ \mathbf{v} \in Q.\end{gathered}$$

Полученное из этого при $\mathbf{v} = \mathbf{x}^* \in Q_*$ неравенство сложим с неравенством, полученным из (3.4) при $\mathbf{u} = \mathbf{x}^{k+1}$ и умноженным на $\beta > 0$:

$$\begin{gathered}\left(\mathbf{B}(\mathbf{z}^k)(\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{z}^k), \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{z}^k\right) + \left(\mathbf{B}(\mathbf{z}^k)(\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{z}^k), \mathbf{z}^k - \mathbf{x}^*\right) \leq \\ \leq \beta\left(\nabla f(\mathbf{z}^k) - \nabla f(\mathbf{x}^*), \mathbf{x}^* - \mathbf{x}^{k+1}\right),\ k \geq 1,\ \mathbf{x}^* \in Q_*.\end{gathered}$$

Здесь в левой части первое слагаемое оценим с помощью (2.5), а в правой части воспользуемся неравенством $(\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{u}), \mathbf{u} - \mathbf{z}) \leq L\|\mathbf{x} - \mathbf{z}\|^2/4,\ \mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{z} \in Q$, впервые доказанным в гл.1 работы [2] для $f(\mathbf{x}) \in C^{1,1}(Q)$, положив в нём $\mathbf{x} = \mathbf{z}^k$, $\mathbf{u} = \mathbf{x}^*$, $\mathbf{z} = \mathbf{x}^{k+1}$, то есть $\left(\nabla f(\mathbf{z}^k) - \nabla f(\mathbf{x}^*), \mathbf{x}^* - \mathbf{x}^{k+1}\right) \leq L\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{z}^k\|^2/4$; тогда

$$\begin{gathered}(m - L\beta/4)\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{z}^k\|^2 + \left(\mathbf{B}(\mathbf{z}^k)(\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{z}^k), \mathbf{z}^k - \mathbf{x}^*\right) \leq 0, \\ k \geq 1,\ \mathbf{x}^* \in Q_*.\end{gathered} \tag{4.4}$$

В (4.4) сначала оценим второе слагаемое. Рассмотрим тождество

$$\begin{gathered}\|\mathbf{B}(\mathbf{z}^k)(\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{z}^k) - (\mathbf{x}^* - \mathbf{z}^k)\|^2 = \|\mathbf{B}(\mathbf{z}^k)(\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{z}^k)\|^2 - \\ -2\left(\mathbf{B}(\mathbf{z}^k)(\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{z}^k), \mathbf{x}^* - \mathbf{z}^k\right) + \|\mathbf{x}^* - \mathbf{z}^k\|^2.\end{gathered}$$

Обозначив $\mathbf{u} = \mathbf{B}(\mathbf{z}^k)(\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{z}^k)$, $\mathbf{v} = \mathbf{x}^* - \mathbf{z}^k$, запишем

$$2\left(\mathbf{B}(\mathbf{z}^k)(\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{z}^k), \mathbf{z}^k - \mathbf{x}^*\right) = -2(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|^2 - \|\mathbf{u}\|^2 - \|\mathbf{v}\|^2 \tag{4.5}$$

и оценим снизу правую часть; для первого слагаемого с помощью (3.8) при $\mathbf{x}=\mathbf{0}$, $\varepsilon=4$ получим $\|\mathbf{u}-\mathbf{v}\|^2 \ge 3\|\mathbf{u}\|^2-(3/4)\|\mathbf{v}\|^2$; тогда из (4.5), пользуясь (2.5), имеем

$$\begin{gathered}\big(\mathbf{B}(\mathbf{z}^k)(\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{z}^k),\mathbf{z}^k-\mathbf{x}^*\big) \ge 0.5\,(2\|\mathbf{u}\|^2-(7/4)\|\mathbf{v}\|^2) \ge \\ \ge m^2\|\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{z}^k\|^2-(7/8)\|\mathbf{z}^k-\mathbf{x}^*\|^2.\end{gathered}$$

Подставив эту оценку в (4.4), получим

$$a_{01}\|\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{z}^k\|^2 \le (7/8)\|\mathbf{z}^k-\mathbf{x}^*\|^2,\ k\ge 1,\ \mathbf{x}^*\in Q_*, \tag{4.6}$$

где $a_{01}=c-L\beta/4>0$, $\beta<4c/L$, $c=m+m^2$. Здесь проведём преобразования левой части с помощью неравенства (3.8): при $\mathbf{v}=\mathbf{z}^k$, $\mathbf{u}=\mathbf{x}^{k+1}$, $\mathbf{x}=\mathbf{x}^*$, $\varepsilon=5$ имеем

$$0.5\|\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{z}^k\|^2 \ge 2\|\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{x}^*\|^2-(2/5)\|\mathbf{z}^k-\mathbf{x}^*\|^2; \tag{4.7a}$$

при $\mathbf{v}=\mathbf{z}^k$, $\mathbf{u}=\mathbf{x}^{k+1}$, $\mathbf{x}=\mathbf{x}^k$, $\varepsilon=5$ и (2.3) получим

$$\begin{gathered}0.5\|\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{z}^k\|^2 \ge 2\|\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{x}^k\|^2-(2/5)\|\mathbf{z}^k-\mathbf{x}^*\|^2 = \\ = 2\|\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{x}^k\|^2-(2\alpha^2/5)\|\mathbf{y}^k\|^2,\end{gathered}$$

где один квадрат нормы в правой части преобразуем с помощью (3.8) при $\mathbf{v}=\mathbf{x}^k$, $\mathbf{u}=\mathbf{x}^{k+1}$, $\mathbf{x}=\mathbf{x}^*$, $\varepsilon=2$, тогда $\|\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{x}^k\|^2 \ge \|\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{x}^*\|^2-0.5\|\mathbf{x}^k-\mathbf{x}^*\|^2$ и

$$\begin{gathered}0.5\|\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{z}^k\|^2 \ge \|\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{x}^k\|^2+\|\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{x}^*\|^2- \\ -\|\mathbf{x}^k-\mathbf{x}^*\|^2/2-(2\alpha^2/5)\|\mathbf{y}^k\|^2.\end{gathered} \tag{4.7b}$$

Подставив (4.7a) и (4.7b) в (4.6), придём к неравенству

$$\begin{gathered}3a_{01}\|\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{x}^*\|^2+a_{01}\|\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{x}^k\|^2 \le a_{01}\|\mathbf{x}^k-\mathbf{x}^*\|^2/2+ \\ +(2a_{01}\alpha^2/5)\|\mathbf{y}^k\|^2++(7/8+2a_{01}/5)\|\mathbf{z}^k-\mathbf{x}^*\|^2,\ k\ge 1.\end{gathered} \tag{4.8}$$

Правую часть (4.8) преобразуем с помощью неравенства

$$\|\mathbf{z}^k-\mathbf{x}^*\|^2 \le (1+\varepsilon)\|\mathbf{z}^k-\mathbf{x}^k\|^2+(1+\varepsilon^{-1})\|\mathbf{x}^k-\mathbf{x}^*\|^2,\ \varepsilon>0,$$

следующего из правого неравенства (3.5) при $\mathbf{u}=\mathbf{z}^k$, $\mathbf{w}=\mathbf{x}^*$, $\mathbf{v}=\mathbf{x}^k$; положим $\varepsilon=1/\alpha$ и учтём следующее из (2.3) равенство $\|\mathbf{z}^k-\mathbf{x}^k\|^2=\alpha^2\|\mathbf{y}^k\|^2$:

$$a_{02}\|\mathbf{z}^k-\mathbf{x}^*\|^2 \le a_{02}(1+\alpha)\|\mathbf{x}^k-\mathbf{x}^*\|^2+a_{02}(1+\alpha)\alpha\|\mathbf{y}^k\|^2,$$

где $a_{02}=7/8+2a_{01}/5>0$ при $a_{01}>0$. Тогда из (4.8) следует

$$\begin{gathered}3a_{01}\|\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{x}^*\|^2+a_{01}\|\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{x}^k\|^2 \le \\ \le a_{12}\|\mathbf{x}^k-\mathbf{x}^*\|^2+a_{13}\|\mathbf{y}^k\|^2,\ k\ge 1,\end{gathered}$$

где $a_{12}=a_{02}(1+\alpha)+a_{01}/2$, $a_{13}=2a_{01}\alpha^2/5+a_{02}(\alpha+\alpha^2)$. После деления на коэффициент при первом слагаемом имеем

$$\begin{gathered}\|\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{x}^*\|^2+\|\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{x}^k\|^2/3 \le \\ \le a_1\|\mathbf{x}^k-\mathbf{x}^*\|^2+a_2\|\mathbf{y}^k\|^2,\ k\ge 1,\end{gathered} \tag{4.9}$$

где $a_1=a_{12}/(3a_{01})=1/6+a_{02}(1+\alpha)/(3a_{01})$, $a_2=2\alpha^2/15+a_{02}(\alpha+\alpha^2)/(3a_{01})$, $a_1>0$, $a_2>0$ при $a_{01}>0$, $\alpha>0$; $a_1\le 1$ при $0<\beta\le[4cb-35(1+\alpha)]/(Lb)=\beta^{12}$, $b=21-4\alpha$;

$a_2 \le 1/3$ при $\beta \le [8cd - 35(\alpha+\alpha^2)]/(2Ld) = \beta^{13}$, $\beta \le \beta^{12} < \beta^{13}$, $d = 5 - 2\alpha - 4\alpha^2$; $0 < \beta \le \beta^{12} < \beta^{11}$, $0 < \alpha \le 3/8$.

Поскольку $a_1 \le 1$ при условиях теоремы, положим $a_1 = 1$ в (4.9):

$$\begin{gathered}\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\|^2 + \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|^2/3 \le \\ \le \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2 + a_2\|\mathbf{y}^k\|^2,\ k \ge 1.\end{gathered} \tag{4.10}$$

Просуммировав неравенства (4.10) от $k = 1$ до $k = m$, получим

$$\begin{gathered}\|\mathbf{x}^{m+1} - \mathbf{x}^*\|^2 + \|\mathbf{x}^{m+1} - \mathbf{x}^m\|^2/3 + (1/3 - a_2)\sum_{k=1}^{k=m-1}\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|^2 \le \\ \le a_2\|\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^0\|^2 + \|\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^*\|^2.\end{gathered}$$

Отсюда, поскольку $1/3 > 1/3 - a_2 > 0$, $0 < \beta \le \beta^{12} < \beta^{13}$, имеем

$$\begin{gathered}\|\mathbf{x}^{m+1} - \mathbf{x}^*\|^2 + (1/3 - a_2)\sum_{k=1}^{k=m}\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|^2 \le \\ \le a_2\|\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^0\|^2 + \|\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^*\|^2.\end{gathered}$$

Здесь коэффициенты неотрицательны и

$$\sum_{k=1}^{k=m}\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|^2 < \infty\ \forall\, m \ge 1, \quad \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|^2 \to 0,\ k \to \infty,$$

а следовательно, $\|\mathbf{x}^{m+1} - \mathbf{x}^*\|^2 \le a_2\|\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^0\|^2 + \|\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^*\|^2$ и последовательность $\{\mathbf{x}^k\}$ метода (2.3), (2.4), (4.1) ограничена; по теореме Больцано-Вейерштрасса существует точка $\mathbf{v} \in Q$ и подпоследовательность $\{\mathbf{x}^{k_i}\} \to \mathbf{v}$, $i \to \infty$ такая, что

$$\lim_{i\to\infty}\|\mathbf{x}^{k_i} - \mathbf{v}\| = \lim_{i\to\infty}\|\mathbf{x}^{k_i+1} - \mathbf{x}^{k_i}\| = 0. \tag{4.11}$$

Тогда из (2.4) при $k \to \infty$ следует равенство $\mathbf{v} = P_Q^{\mathbf{B}(\mathbf{v})}[\mathbf{v} - \beta[\mathbf{B}(\mathbf{v})]^{-1}\nabla f(\mathbf{v})]$, $\beta > 0$, эквивалентное критерию оптимальности в E_1^n, согласно леммам 1–3. Это значит, что $\mathbf{v} \in Q$ есть точка минимума функции $f(\mathbf{x})$ на множестве Q, то есть $\mathbf{v} = \mathbf{x}^* \in Q_*$.

В силу (4.11) существуют номер $k_0 > 0$ и достаточно малое число $\varepsilon > 0$ такие, что $\forall\, k_i \ge k_0$ выполняются неравенства

$$\|\mathbf{x}^{k_i} - \mathbf{v}\|^2 \le \varepsilon/2,\ \|\mathbf{x}^{k_i+1} - \mathbf{x}^{k_i}\|^2 \le \varepsilon/(2a_2). \tag{4.12}$$

Возьмём числа $N > m \ge k_0$ и просуммируем неравенства (4.10) ещё раз от $k = m$ до $k = N$ при $\mathbf{x}^* = \mathbf{v}$. Получим неравенство

$$\begin{gathered}\|\mathbf{x}^{N+1} - \mathbf{v}\|^2 + \|\mathbf{x}^{N+1} - \mathbf{x}^N\|^2/3 + (1/3 - a_2)\sum_{k=m}^{k=N-1}\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|^2 \le \\ \le \|\mathbf{x}^m - \mathbf{v}\|^2 + a_2\|\mathbf{x}^m - \mathbf{x}^{m-1}\|^2.\end{gathered}$$

Здесь учтём, что $0 < 1/3 - a_2 < 1/3$ при $0 < \beta \le \beta^{12} < \beta^{13}$, тогда

$$\begin{gathered}\|\mathbf{x}^{N+1} - \mathbf{v}\|^2 + (1/3 - a_2)\sum_{k=m}^{k=N}\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|^2 \le \\ \le \|\mathbf{x}^m - \mathbf{v}\|^2 + a_2\|\mathbf{x}^m - \mathbf{x}^{m-1}\|^2.\end{gathered}$$

Отсюда при $N \to \infty$ с учётом сходимости ряда и (4.12) имеем:

$$\|\mathbf{x}^{N+1} - \mathbf{v}\|^2 \le \|\mathbf{x}^m - \mathbf{v}\|^2 + a_2\|\mathbf{x}^m - \mathbf{x}^{m-1}\|^2 \le \varepsilon.$$

Это означает фундаментальность последовательности $\{\mathbf{x}^k\}$. Следовательно, $\|\mathbf{x}^k - \mathbf{v}\| \to 0$, $k \to \infty$; не только подпоследовательность, но и вся последовательность $\{\mathbf{x}^k\}$ метода сходится к точке $\mathbf{v} = \mathbf{x}^* \in Q_*$: $\|\mathbf{x}^k - \mathbf{v}\| \to 0$, $k \to \infty$.

Сходимость метода по функционалу покажем с помощью неравенств для функции $f(\mathbf{x}) \in C^{1,1}(Q)$ на выпуклом множестве Q ([1], с. 164) $f(\mathbf{u}) - f(\mathbf{v}) \geq (\nabla f(\mathbf{v}), \mathbf{u} - \mathbf{v})\ \forall\, \mathbf{u}, \mathbf{v} \in Q$ и $(\nabla f(\mathbf{x}^*), \mathbf{u} - \mathbf{x}^*) \geq 0$, $\mathbf{x}^* \in Q_*$, $\mathbf{u} \in Q$ ([1], с. 165). Из неравенств

$$
\begin{gathered}
0 \leq (\nabla f(\mathbf{x}^*), \mathbf{u} - \mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x}^k) - f(\mathbf{x}^*) \leq \\
\leq (\nabla f(\mathbf{x}^k), \mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*) \leq \|\nabla f_k\| \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|,
\end{gathered}
$$

доказанной сходимости по аргументу, ограниченности градиента функции, следует второе соотношение из (4.2).

Теорема 1 доказана.

Следствие. *Из теоремы 1 следует монотонность сходимости последовательности* $\{\mathbf{x}^k\}$ *и справедливость неравенств*

$$
\begin{gathered}
\|\mathbf{x}^{k-1} - \mathbf{x}^k\| \geq \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k+1}\| \geq \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^{k+2}\| \geq \cdots, \\
\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\| \leq \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\| \leq \|\mathbf{x}^{k-1} - \mathbf{x}^*\| \leq \cdots \leq \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|.
\end{gathered}
$$

5. Оценки скорости сходимости

5.1. Сначала покажем линейную скорость сходимости метода при условиях теоремы 1 (в теоремах 2 и 3), а затем - сверхлинейную и квадратичную при дополнительных условиях.

Теорема 2. *Пусть выполнены все условия теоремы 1, включая условия для параметров метода. Тогда последовательность* $\{\mathbf{x}^k\}$, *определяемая ПОДМПМ (2.3), (2.4), (4.1), со скоростью геометрической прогрессии сходится к решению задачи (1.1),*

$$\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\| \leq q^k \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|, \tag{5.1}$$

где $q = \{[7(1+\alpha)/24 + (0.3 + 2\alpha/15)a_{01}]/a_{01}\}^{1/2}$, $0 < q < 1$ *при условиях (4.1);* $a_{01} = m + m^2 - L\beta/4$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Заметим, что в условиях данной теоремы все выкладки и рассуждения теоремы 1 и неравенство (4.9) верны.

Покажем, что для слагаемых левой и правой частей (4.9) имеет место неравенство $a_2\|\mathbf{y}^k\|^2 - (1/3)\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|^2 \leq 0$. Действительно, оно верно в силу неравенств: $\|\mathbf{y}^k\|^2 \leq \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|^2$ (в силу следствия теоремы 1); $a_2 \leq 1/3$; $a_2 - 1/3 < a_2$; $(a_2 - 1/3)\left(\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|^2 - \|\mathbf{y}^k\|^2\right) \geq 0$;

$$
\begin{gathered}
a_2\|\mathbf{y}^k\|^2 - (1/3)\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|^2 \leq (a_2 - 1/3)\left(\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|^2 - \|\mathbf{y}^k\|^2\right) + \\
+ a_2\|\mathbf{y}^k\|^2 - (1/3)\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|^2 \leq \\
\leq a_2\left(\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|^2 - \|\mathbf{y}^k\|^2\right) + a_2\|\mathbf{y}^k\|^2 - a_2\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|^2 \leq 0.
\end{gathered}
$$

Учитывая доказанное неравенство, из (4.9) получаем,

$$\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\|^2 \leq q^2 \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2,\ k \geq 1, \tag{5.2}$$

где $q = (a_1)^{1/2}$, $0 < q < 1$ при условиях (4.1). Из (5.2) следует (5.1).

Теорема 2 доказана.

Лемма 6. *Пусть последовательность* $\{\mathbf{x}^k\} \to \mathbf{x}^* \in Q_*$ *строится методом класса ПОДМ и выполняются неравенства* $2\|\mathbf{y}^k\| \le \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\| \le \|\mathbf{x}^{k-1} - \mathbf{x}^*\|$ *(следующие из (3.10б)). Тогда для вектора* $\mathbf{y}^k = \mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k-1}$ *приращения аргумента функции* $f(\mathbf{x})$ *имеет место оценка*

$$\|\mathbf{y}^k\| \le (3/\sqrt{8})\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|. \tag{5.3}$$

Доказательство. Из (3.8) при $\mathbf{u} = \mathbf{x}^k$, $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{k+1}$, $\mathbf{v} = \mathbf{x}^*$ следует неравенство $\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2 \ge (\varepsilon - 1)\|\mathbf{y}^k\|^2 - (1 - \varepsilon^{-1})\|\mathbf{x}^{k-1} - \mathbf{x}^*\|^2$. Примем $\varepsilon = 5$ (это допустимо в условиях леммы), тогда $\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2 \ge 4\|\mathbf{y}^k\|^2 - (4/5)\|\mathbf{x}^{k-1} - \mathbf{x}^*\|^2$ или

$$4\|\mathbf{y}^k\|^2 \le \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2 + (4/5)\|\mathbf{x}^{k-1} - \mathbf{x}^*\|^2. \tag{5.4}$$

Из правого неравенства (3.5) при $\mathbf{u} = \mathbf{x}^{k-1}$, $\mathbf{v} = \mathbf{x}^k$, $\mathbf{w} = \mathbf{x}^*$, $\varepsilon = 2/3$ следует $\|\mathbf{x}^{k-1} - \mathbf{x}^*\|^2 \le (5/3)\|\mathbf{y}^k\|^2 + (5/2)\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2$. Подставив его в правую часть (5.4), придём к неравенству $4\|\mathbf{y}^k\|^2 \le \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2 + (4/3)\|\mathbf{y}^k\|^2 + 2\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2$, то есть $8\|\mathbf{y}^k\|^2/3 \le 3\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2$. Отсюда следует неравенство (5.3).

Лемма 6 доказана.

С помощью лемм 3 и 6 можно получить новую оценку линейной скорости сходимости ПОДМПМ (2.3), (2.4) с меньшим, чем полученный в теореме 2, знаменателем прогрессии.

Теорема 3. *Если выполнены все условия теоремы 1 и, кроме того,* $0 < \beta < (16cd - 35e)/(4Ld)$, *то ПОДМПМ (2.3), (2.4)* $\forall\, \mathbf{x}^0 \in E_1^n$ *сходится к точке* $\mathbf{x}^* \in Q_*$ *с оценкой скорости сходимости*

$$\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\| \le q^k\|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|,\ k \ge 1, \tag{5.5}$$

где $q = (a_1/2 + 9a_2/16 + 1/8)^{1/2}$, $0 < q^2 < 1/2$ *при условиях теоремы,* $d = 27 - 17\alpha - 18\alpha^2$, $e = 8 + 17\alpha + 9\alpha^2$, a_1, a_2, c *из теоремы 1.*

Доказательство. Заметив, что в условиях данной теоремы все выкладки и рассуждения теоремы 1 и неравенство (4.9) верны, в (4.9) второе слагаемое в левой части оценим с помощью (3.8) при $\mathbf{u} = \mathbf{x}^{k+1}$, $\mathbf{v} = \mathbf{x}^k$, $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$, $\varepsilon = 4$:

$$\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|^2/3 \ge \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\|^2 - \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2/4.$$

Второе слагаемое в правой части (4.9) оценим с помощью (5.3), $a_2\|\mathbf{y}^k\|^2 \le 9a_2\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2/8$. Подставив эти оценки в (4.9), придём к неравенству $2\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\|^2 \le (a_1 + 9a_2/8 + 1/4)\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2$, то есть $\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\|^2 \le q^2\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2$, $k \ge 1$, где $q^2 = a_1/2 + 9a_2/16 + 1/8$, $0 < q^2 < 1/2$ при $0 < \beta < (16cd - 35e)/(4Ld) < \beta^{12}$, β^{12} из теоремы 1. Отсюда следует (5.5).

Теорема 3 доказана.

5.2. Далее предположим, что функция $f(\mathbf{x}) \in C^{2,1}(E_1^n)$, и покажем, что метод (2.3), (2.4) в этом случае имеет сверхлинейную скорость сходимости. Заметим, что в силу теоремы 1 $\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\| \to 0$, и $\|\mathbf{z}^k - \mathbf{x}^*\| \to 0$ при $\|\mathbf{y}^k\| \to 0$ (следствие теоремы 1), тогда ввиду непрерывности гессиана

$$\|\nabla^2 f(\mathbf{x}^k) - \nabla^2 f(\mathbf{x}^*)\| \to 0,\ \|\nabla^2 f(\mathbf{z}^k) - \nabla^2 f(\mathbf{x}^*)\| \to 0,\ k \to \infty. \tag{5.6}$$

Предположим, что

$$\|\mathbf{B}(\mathbf{z}^k) - \mathbf{B}(\mathbf{x}^*)\| \to 0,\ \|\mathbf{B}(\mathbf{z}^k) - \nabla^2 f(\mathbf{z}^k)\| \to 0,\ k \to \infty. \tag{5.7}$$

Теорема 4. *Пусть выполнены все условия теоремы 1 и, кроме того: 1) функция* $f(\mathbf{x}) \in C^{2,1}(E_1^n)$; *2) для последовательности* $\{\mathbf{x}^k\} \to \mathbf{x}^* \in Q_*$ *ПОДМПМ (2.3), (2.4)* *существует номер $N>1$ такой, что $\beta_k=1$ при $k\ge N$; 3) выполнены соотношения (5.6)-(5.7). Тогда последовательность $\{\mathbf{x}^k\}$, определяемая методом (2.3), (2.4), (4.1) $\forall\,\mathbf{x}^0\in E_1^n$ со сверхлинейной скоростью сходится к решению задачи (1.1),*

$$\|\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{x}^*\|\le q_k\|\mathbf{x}^k-\mathbf{x}^*\|,\ q_k\to 0 \text{ при } k\to\infty. \tag{5.8}$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Результаты и выкладки теоремы 1 здесь справедливы. Запишем неравенство (4.3) в форме

$$\begin{gathered}\left(\mathbf{B}(\mathbf{z}^k)(\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{v}),\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{v}\right)\le\left(\mathbf{B}(\mathbf{z}^k)(\mathbf{z}^k-\mathbf{v}),\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{v}\right)+\\ +\beta\left(\nabla f(\mathbf{z}^k),\mathbf{v}-\mathbf{x}^{k+1}\right),\ k\ge 1,\ \mathbf{v}\in Q.\end{gathered}$$

Полученное из этого при $\mathbf{v}=\mathbf{x}^*\in Q_*$ неравенство сложим с неравенством, полученным из (3.4) при $\mathbf{u}=\mathbf{x}^{k+1}$ и умноженным на $\beta>0$:

$$\begin{gathered}\left(\mathbf{B}(\mathbf{z}^k)(\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{x}^*),\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{x}^*\right)\le\left(\mathbf{B}(\mathbf{z}^k)(\mathbf{z}^k-\mathbf{x}^*),\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{x}^*\right)+\\ +\beta\left(\nabla f(\mathbf{z}^k)-\nabla f(\mathbf{x}^*),\mathbf{x}^*-\mathbf{x}^{k+1}\right),\ k\ge 1,\ \mathbf{x}^*\in Q_*.\end{gathered}$$

Здесь левую часть оценим снизу с помощью (2.5), а в правой части во втором скалярном произведении воспользуемся формулой Лагранжа,

$$\begin{gathered}m\|\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{x}^*\|^2\le\left(\mathbf{B}(\mathbf{z}^k)(\mathbf{z}^k-\mathbf{x}^*),\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{x}^*\right)+\\ +\beta\left(\nabla^2 f(\xi^k)(\mathbf{z}^k-\mathbf{x}^*),\mathbf{x}^*-\mathbf{x}^{k+1}\right),\\ k\ge 0,\ \xi^k=\mathbf{z}^k-\theta(\mathbf{z}^k-\mathbf{x}^*),\theta\in[0;1].\end{gathered} \tag{5.9}$$

Преобразуем (5.9), $m\|\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{x}^*\|^2\le\left(\mathbf{B}(\mathbf{z}^k)-\beta\nabla^2 f(\xi^k)(\mathbf{z}^k-\mathbf{x}^*),\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{x}^*\right)$, и воспользуемся неравенством Коши-Буняковского, тогда придём к неравенству

$$m\|\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{x}^*\|\le\|\mathbf{B}(\mathbf{z}^k)-\beta\nabla^2 f(\xi^k)\|\|\mathbf{z}^k-\mathbf{x}^*\|. \tag{5.10}$$

Последний сомножитель в правой части (5.10) оценим с помощью (2.3) и (5.3),

$$\begin{gathered}\|\mathbf{z}^k-\mathbf{x}^*\|=\|\mathbf{x}^k+\alpha\mathbf{y}^k-\mathbf{x}^*\|\le\\ \le\|\mathbf{x}^k-\mathbf{x}^*\|+\alpha\|\mathbf{y}^k\|\le(1+3\alpha/\sqrt{8})\|\mathbf{x}^k-\mathbf{x}^*\|.\end{gathered} \tag{5.11}$$

Подставим оценку (5.11) в (5.10) и учтём, что $\beta_k=1$ при $k\ge N$; тогда получим

$$m\|\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{x}^*\|\le\|\mathbf{B}(\mathbf{z}^k)-\nabla^2 f(\xi^k)\|(1+3\alpha/\sqrt{8})\|\mathbf{x}^k-\mathbf{x}^*\|. \tag{5.12}$$

Из (5.12) следует оценка

$$\|\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{x}^*\|\le q_k\|\mathbf{x}^k-\mathbf{x}^*\|,\ q_k\to 0 \text{ при } k\to\infty \tag{5.13}$$

где $q_k=\|\mathbf{B}(\mathbf{z}^k)-\nabla^2 f(\xi^k)\|(1+3\alpha/\sqrt{8})/m$,

$$\|\mathbf{B}(\mathbf{z}^k)-\nabla^2 f(\xi^k)\|\le\|\mathbf{B}(\mathbf{z}^k)-\nabla^2 f(\mathbf{x}^*)\|\to 0 \text{ при } k\to\infty. \tag{5.14}$$

Из (5.13), (5.14) следует (5.8).

Теорема 4 доказана.

5.3. При дополнительном условии относительно операторов $\mathbf{B}_k$ получим оценку квадратичной сходимости ПОДМПМ (2.3), (2.4). Воспользуемся обобщением неравенства из работы [11]. Предположим, что константа $c_1 > 0$ такова, что $\forall\, k \geq N$ имеет место неравенство

$$\|\mathbf{B}(\mathbf{z}^k) - \nabla^2 f(\mathbf{x}^*)\| \leq c_1 \|\mathbf{z}^k - \mathbf{x}^*\|. \tag{5.15}$$

Теорема 5. *Пусть выполнены все условия теорем 1 и 4 и (5.15). Тогда последовательность* $\{\mathbf{x}^k\}$ *метода (2.3), (2.4), (4.1)* $\forall\, \mathbf{x}^0 \in E_1^n$ *с квадратичной скоростью сходится к решению* $\mathbf{x}^* \in Q_*$ *задачи (1.1),*

$$\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\| \leq c\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2,\ c = c_1(1 + 3\alpha/\sqrt{8})^2/m. \tag{5.16}$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Заметим, что при условиях теоремы 5 все выкладки теорем 1 и 4, а также неравенство (5.12), справедливы. Воспользуемся в (5.12) неравенствами (5.6), (5.7), (5.14), (5.15), а также оценками (5.11) и

$$\|\mathbf{B}(\mathbf{z}^k) - \nabla^2 f(\xi^k)\| \leq \|\mathbf{B}(\mathbf{z}^k) - \nabla^2 f(\mathbf{x}^*)\| \leq$$
$$\leq c_1\|\mathbf{z}^k - \mathbf{x}^*\| \leq c_1(1 + 3\alpha/\sqrt{8})\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|.$$

Тогда из (5.12) получим $\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\| \leq c_1(1 + 3\alpha/\sqrt{8})^2\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2/m$, $k \geq N$. Отсюда следует (5.16).

Теорема 5 доказана.

Примечание 5. Для численных реализаций представляет интерес также и модификация ПОДМПМ (2.3), (2.4):

$$1\ \text{этап.}\mathbf{y}^k = \mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k-1},\ \mathbf{z}^k = \mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{y}^k/\|\mathbf{y}^k\|, \mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1 \in E_1^n,\ f(\mathbf{x}^0) > f(\mathbf{x}^1);$$

$$2\ \text{этап.}\quad \mathbf{x}^{k+1} = P_Q^{\mathbf{B}(\mathbf{z}^k)}\left(\mathbf{z}^k + \beta_k \mathbf{p}(\mathbf{z}^k)/\|\nabla f(\mathbf{z}^k)\|\right),\ k = 1, 2, ...,$$

где $\mathbf{p}(\mathbf{z}^k) = -\mathbf{B}(\mathbf{z}^k)^{-1}\nabla f(\mathbf{z}^k)$ (см. п. 2), параметры метода α_k, β_k константы или вычисляются на итерациях по заданным правилам. Например, α_k можно выбирать из условия, что точка $\mathbf{z}^k$ лежит внутри односвязной замкнутой области, ограниченной гиперповерхностью уровня $f(\mathbf{x}) = const = f(\mathbf{x}^{k-1})$, а β_k вычисляется одномерной минимизацией, $\beta_k = argmin_{\beta > 0} f\left(\mathbf{z}^k - \beta\mathbf{p}(\mathbf{z}^k)/\|\nabla f(\mathbf{z}^k)\|\right)$; другие обозначения те же, что и в (2.3), (2.4). Доказательство сходимости и оценки скорости сходимости метода аналогичны данным для ПОДМПМ (2.3), (2.4).

Список литературы

1. Васильев Ф. П., *Численные методы решения экстремальных задач*, Наука, М., 1988, 552. с.

2. Антипин А. С., “Непрерывные и итеративные процессы с операторами проектирования и типа проектирования”, *Вопросы кибернетики. Вычислительные вопросы анализа больших систем*, 1989, 5–43..

3. Амочкина Т. В., Недич А., “Об одном варианте непрерывного метода проекции градиента второго порядка и его дискретном аналоге”, *Вестник МГУ, Сер. 15. Вычисл. матем. и кибернет.*, 1995, № 2, 5–11..

4. Малинов В. Г., “Четырехпараметрические двухшаговые проекционные методы минимизации первого порядка”, *Журнал вычислительной математики и математической физики*, **36**:12 (1996), 48–56..

5. Антипин А. С. Васильев Ф. П., “О непрерывном методе минимизации в пространствах с переменной метрикой”, *Известия вузов. Математика*, 1995, № 12(403), 3–9..

6. Амочкина Т. В., “Непрерывный метод проекции градиента второго порядка с переменной метрикой”, *Журнал вычислительной математики и математической физики*, **37**:10 (1997), 1174–1182..

7. Малинов В. Г., “О проекционном квазиньютоновском обобщенном двухшаговом методе минимизации и оптимизации траектории летательного аппарата”, *Журнал Средневолжского математического общества*, **12**:4 (2010), 37–48..

8. Malinov V. G., “Projection Two-step Variable Metric Methods”, *4th Moscow International Conference on Operations Research (ORM2004). Moscow. September 21-24, 2004. Proceedings*, 2004, 135–137..

9. Wolfe M. A., “A Quasi-Newton Method with Memory for Unconstrained Function Minimization”, *J. Inst. Mathematics & Applications*, **15**:1 (1975), 85–94..

10. Ford J. A., Moghrabi I. A., “Multi-step quasi-Newton methods for optimization”, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **50**:Complete (1994), 305–323..

11. Conn A. R., Gould N. I. M., Toint Ph. L., “Convergence of quasi-Newton matrices generated by the symmetric rank one update”, *Mathematical Programming*, **50**:2 (1991), 177–195..

12. Канторович Л. В., Акилов Г. П., *Функциональный анализ*, Наука, М., 1977, 744. с.

13. Малинов В.Г., “Проекционный двухшаговый МПМ и численное решение задачи оптимального управления”, *Журнал Средневолжского математического общества*, **14**:1 (2012), 83–91..

14. Шилов Г. Е., *Математический анализ. Специальный курс*, Физматлит, М., 1960, 388. с.

PGTM with projecting in variable metric

© **V. G. Malinov** [2]

Abstract. In the work projection generalized two-step two-stage method (PGTM) with projecting in variable metric (PGTVMM) for solving finite dimensional minimization problems on the convex closed set in the Euclidean space is proposed. It may be used as well for solution of functional equations and other problems. The convergence of the method is proved for continuously differentiable convex functions with a Lipschitz gradients. Estimates rate of convergence are proved: at first linear rate of convergence for convex smooth functions, afterwards derived superlinear and quadratic rate of convergence for twice differentiable functions on supplemental suppositions.
Key Words: PGTVMM, projecting in variable metric, convergence, rate of convergence.

[2] Assistant Professor of Ulyanovsk State University, Ulyanovsk; vgmalinov@mail.ru.

УДК 512.917+513.9

Применения метода многомерных возмущений одномерных хаотических отображений в клеточных сетях

© М. И. Малкин[1]

Аннотация. В данной работе показано наличие хаотического поведения в клеточных сетях, представляющих собой дискретные модели некоторых уравнений в частных производных диффузионного типа. Для этой цели применен метод, разработанный в [1], [2] и заключающийся в доказательстве существования и устойчивости топологических подков вблизи вырожденного хаотического отображения малой размерности.

Ключевые слова: разностные уравнения, хаотическое поведение траекторий, клеточные сети, дискретные модели уравнений диффузионного типа

1. Введение

В качественной теории динамических систем существует несколько подходов, имеющих целью установить наличие хаотического поведения траекторий. Наиболее типичной методикой здесь является исследование гомоклинических точек и как следствие, обнаружение (при проверке достаточных условий) структуры гиперболической или топологической подковы (см. работы [3], [8], [9]). Отметим, что установить хаотичность отображения или разностного уравнения малой размерности гораздо проще, чем в многомерном случае благодаря хорошо развитым аналитическим и вычислительным методам подсчета хаотических (в основном, энтропийных) характеристик для таких отображений. С помощью техники, развитой в работах [1], [2] удается доказать, что при выполнении естественных достаточных условий хаотичность поведения системы малой размерности продолжается и на многомерную окрестность в пространстве отображений. Как показывают результаты данной статьи, для некоторых классов клеточных сетей (решеток), являющихся различными дискретными моделями уравнений диффузионного типа, можно эффективно проверить достаточные условия хаотичности при сингулярных значениях малого параметра (коэффициента диффузии) и тем самым, указанная техника многомерных возмущений применима. Таким образом, доказано наличие хаоса в клеточных сетях, являющихся дискретными моделями конкретных систем диффузионного типа (уравнения Колмогорова-Петровского-Пискунова, уравнение Хаксли, модель Френкеля-Конторовой и др.).

Перейдем к формулировке основного результата работы [1], который мы будем использовать в следующей главе в применении к клеточным моделям. Рассмотрим разностное уравнение вида

$$\Phi_\lambda(y_n, y_{n+1}, \dots, y_{n+m}) = 0, \tag{1.1}$$

здесь параметр λ — элемент некоторого метрического пространства E, а функция Φ_λ определена на замкнутом параллелепипеде $Q^{m+1} \subset \mathbb{R}^{m+1}$, где $Q = [s_1, s_2]\backslash V$ для некоторых чисел $s_1 < s_2$ и открытого (возможно, пустого) множества $V \subset \mathbb{R}$. Мы предполагаем, что для любого $\lambda \in E$ функция $\Phi_\lambda : Q^{m+1} \to \mathbb{R}$ принадлежит классу C^1 и непрерывно зависит от λ на E. Кроме того, предполагается, что частные производные

[1] Доцент кафедры дифференциальных уравнений и математического анализа, Нижегородский государственный университет им. Н.И.Лобачевского, Нижний Новгород, malkin@mm.unn.ru

$\partial_i\Phi_\lambda(x_1,\ldots,x_{m+1})$, $i=1,\ldots,m+1$, $(x_1,\ldots,x_{m+1})\in Q^{m+1}$ непрерывно зависят от λ на E, где $\partial_i\Phi_\lambda$ обозначает частную производную функции Φ_λ по i-ой координате.

Для данного $\lambda\in E$ обозначим через Y_λ множество всех решений разностного уравнения (1.1), т.е. множество всех бесконечных в обе стороны последовательностей $\underline{y}=(y_n)=(\ldots,y_{-1},y_0,y_1,\ldots)$, которые обладают следующими свойствами при всех $n\in\mathbb{Z}$:

1. $y_n\in Q$; and

2. $(m+1)$ последовательных координат $y_n,y_{n+1},\ldots,y_{n+m}$ точки $\underline{y}$ удовлетворяют уравнению (1.1).

Один из основных результатов работы [1] состоит в следующем.

Теорема 1.1. *Пусть $\Phi_\lambda(y_n,y_{n+1},\ldots,y_{n+m})=0$ — разностное уравнение с параметром $\lambda\in E$ и пусть функция $\Phi_\lambda: Q^{m+1}\to\mathbb{R}$ принадлежит классу C^1 для каждого λ и непрерывно зависит от $\lambda\in E$, и кроме того, частные производные $\partial i\Phi_\lambda$, $i=1,\ldots,m+1$ также непрерывно зависит от λ. Пусть при сингулярном значении параметра $\lambda=\lambda_0$ функция Φ_{λ_0} зависит лишь от одной переменной, т.е.: $\Phi_{\lambda_0}(x_1,x_2,\ldots,x_{m+1})=\varphi(x_N)$, где N – целое число из интервала $1\le N\le m+1$, а функция $\varphi: Q\to\mathbb{R}$ принадлежит классу C^1 и имеет k простых корней внутри Q.*

Тогда найдется окрестность E_0 сингулярного значения λ_0 такая, что для всех $\lambda\in E_0$ существует замкнутое, инвариантное относительно сдвига σ подмножество Γ_λ множества решений Y_λ (рассматриваемого в тихоновской топологии) со следующими свойствами:

(i) ограничение $\sigma|\Gamma_\lambda$ топологически сопряжено со схемой Бернулли $\sigma|\Sigma_k$ из k символов; в частности, $h_{top}(\sigma|Y_\lambda)\ge\log k$;

(ii) сопряжение $\bar\psi_\lambda:\Sigma_\lambda\to\Gamma_\lambda$ есть тождественное отображение при $\lambda=\lambda_0$ и непрерывно зависит от $\lambda\in E_0$; более того, отображение $\lambda\mapsto\bar\psi_\lambda(\underline{x})$ из E_0 в ℓ_∞ равномерно непрерывно;

(iii) если разностное уравнение (1.1) для данного λ порождено отображением $f_\lambda: P_\lambda\to\mathbb{R}^m$, то $h_{top}(f_\lambda)\ge\log k$ и имеет место коммутативная диаграмма:

$$\begin{array}{ccccccc}
\Sigma_k & \xrightarrow{\bar\psi_\lambda} & Y_\lambda & \xrightarrow{T_\lambda} & \tilde P_\lambda & \xrightarrow{\pi_0} & K_\lambda\\
\sigma\downarrow & & \sigma\downarrow & & \sigma_m\downarrow & & f_\lambda\downarrow\\
\Sigma_k & \xrightarrow[\bar\psi_\lambda]{} & Y_\lambda & \xrightarrow[T_\lambda]{} & \tilde P_\lambda & \xrightarrow[\pi_0]{} & K_\lambda
\end{array}$$

где отображение $\bar\psi_\lambda$ инъективно, T_λ биективно, а π_0 есть (сюръективная) проекция, которая представляет собой отображение, сохраняющее топологическую энтропию и взвимно однозначно на множестве периодических точек. (На диаграмме $\tilde P_\lambda=\{\underline{p}=(p_n)_{n=-\infty}^{\infty}\in P_\lambda^{\mathbb{Z}}: p_{n+1}=f_\lambda(p_n)\}$ and $K_\lambda=\bigcap_{i=0}^{\infty}f_\lambda^i(\bigcap_{n=0}^{\infty}f_\lambda^{-n}(P_\lambda))$).

2. Топологические подковы в клеточных сетях

Мы рассматриваем стационарные решения для дискретных моделей в виде клеточных сетей, моделирующих некоторые уравнения в частных производных диффузионного типа (клеточные сети, их регулярное и хаотическое поведение для подобных моделей изучались в работах [4], [5], [6], [7] и др.). Дискретная модель получается из уравнения в частных производных заменой производных по времени и пространству соответствующими разностными членами (см. [7]). В самом общем виде, пространственно-временная модель подобной дискретизации описывается уравнением вида

$$u_n^{t+1} = f(u_n^t) + \varepsilon g(u_{n-s}^t, u_{n-s+1}^t, \dots, u_{n+s}^t), \tag{2.1}$$

где $t \in \mathbb{Z}$ играет роль временной переменной, а $n \in \mathbb{Z}$ – пространственной. В этом уравнении f называется локальной функцией, а g – функцией взаимодействия конечного порядка s.

Стационарные решения u_n^t уравнения (2.1) должны быть независимы от временнóй координаты t, т.е. $u_n^t := x_n$ для всех $t \in \mathbb{Z}$. В таком случае уравнение (2.1) сводится к разностному уравнению

$$x_n = f(x_n) + \varepsilon g(x_{n-s}, x_{n-s+1}, \dots, x_{n+s}), \quad n \in \mathbb{Z}. \tag{2.2}$$

Поэтому, применяя теорему 1.1., мы получаем такой результат о хаотическом поведении стационарных решений:

Теорема 2.1. *Пусть функция $x \mapsto x - f(x)$ имеет $k > 1$ простых корней и пусть в некоторой окрестности U этих корней она является функцией класса C^1. Если функция взаимодействия g является C^1-гладкой на U^{2s+1}, то для достаточно малого ε существует замкнутое (в тихоновской топологии) σ-инвариантное подмножество Λ_ε в пространстве стационарных решений уравнения* (2.1), *такое, что ограничение $\sigma|\Lambda_\varepsilon$ топологически сопряжено со схемой Бернулли $\sigma|\Sigma_k$ из k символов, причем отображение,реализующее сопряженность, непрерывно зависит от ε не только в тихоновской, но и в равномерной топологии.*

Таким образом, в случае выполнения естественных достаточных условий теоремы 2.1., в пространсве стационарных решений уравнения 2.1 имеется топологическая подкова из k символов, и при изменении коэффициента диффузии эта подкова изменяется непрерывно в равномерной метрике, т.е. подкова структурно устойчива, и при близких коэффициентах диффузии все пространственные координаты (от $-\infty$ до $+\infty$, а не только от $-N$ до N при фиксированном N) равномерно близки. Отметим, что, в отличие от работ [4], [5], [7], мы накладываем менее обременительные ограничения на функции f и g, а именно, мы не требуем, чтобы ти функции были определены на всем пространстве $\mathbb{R}$ и $\mathbb{R}^{2s+1}$, соответственно, и имели оганиченные частные производные.

Дискретные модели для многих классов дифференциальных уранений в частных производных могут могут быть заданы в виде клеточных сетей, удовлетворяющих уравнению типа (2.1). В частности, к такому классу относится нелинейное уравнение реакции диффузии

$$u_t = h(u) + \varepsilon u_{xx}, \tag{2.3}$$

где ε — коэффициент диффузии. Дискретный вариант этого уравнения имеет следующий вид

$$u_n^{t+1} = u_n^t + \delta h(u_n^t) + \delta\eta^{-2}\varepsilon(u_{n+1}^t - 2u_n^t + u_{n-1}^t),$$

где δ и η — шаг дискретизации по времени и пространству, соответственно, h — нелинейная функция, t и n — временная и пространственная координаты. Таким образом, стационарные решения — это решения разностного уравнения

$$h(u_n) + \eta^{-2}\varepsilon(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) = 0. \tag{2.4}$$

Частные случаи уравнения реакции диффузии имеют следующий вид:

1. *Уравнение Колмогорова-Петровского-Пискунова* с функцией $h(u) = \alpha u(1-u)$ и параметром $\alpha > 0$;

2. *Уравнение Хаксли* с функцией $h(u) = \alpha u(1-u)(u-a)$ и параметрами $0 < a < 1$ и $\alpha > 0$;

3. *Модель Френкеля-Конторовой* с функцией $h(u) = \sin(u)$.

В качестве другого примера рассмотрим уравнение Ландау-Гинзбурга

$$u_t = h(u) + (\varepsilon + i\delta)u_{xx},$$

вещественный вариант которого имеет вид (2.3) с функцией $h(u) = u(\alpha - \beta u^2)$ и вещественными параметрами $\varepsilon, \alpha, \beta$. В уравнении Колмогорова-Петровского-Пискунова функция h имеет два простых корня (а имеено, 0 и 1), а в уравнении Хаксли и в уравнении Ландау-Гинзбурга у функции h — три простых корня, в модели Френкеля-Конторовой — не менее двух простых корней на интервале длины более π. Поэтому теорема 2.1. применима для этих уравнений при достаточно малом коэффициенте диффузии ε. Таким образом, стационарные решения этих уравнений обладают хаотическим поведением с наличием топологических подков из двух или трех символов соответственно.

Результаты работ [1], [2] применимы и в том случае, когда пространство состояний клеточной сети (решетки) многомерно. Поэтому можно рассмотреть в данном контексте многомерное уравнение реакции диффузии

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} = h(\vec{u}) + \varepsilon A \Delta \vec{u},$$

где A — матрица взаимодействия. В частности, для двумерного уравнения Фитц Хью-Нагумо функция h имеет вид

$$h(u_1, u_2) = (du_1(u_1 - \theta)(1-u_1) - au_2,\ bu_1 - cu_2),$$

где $0 < \theta < 1$ и $a, b, c, d > 0$. В этом случае многомерное обобщение теоремы 2.1. применимо, поскольку функция h имеет (для невырожденных значений параметров) три различных корня, а именно

$$(0,0) \text{ и } (u_\pm, \frac{b}{c}u_\pm), \text{ где } u_\pm = \frac{1}{2}\left(1 + \theta \pm \sqrt{(1-\theta)^2 - \frac{4ab}{cd}}\right),$$

с ненулевым значением якобиана в этих корнях.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, гранты 12-01-00672, 11-01-12056-офи-м, и Правительства РФ, грант 11.G34.31.0039.

Список литературы

1. M.-C. Li, M. Malkin, "Topological horseshoes for perturbations of singular difference equations", *Nonlinearity*, **19** (2006), 795–811.

2. J. Juang, M.-C. Li , M.I. Malkin, "Chaotic difference equations in two variables and their multidimensional perturbations", *Nonlinearity*, **21** (2008), 1019–1040.

3. V. Afraimovich, S.-B. Hsu, *Lectures on chaotic dynamical systems. AMS/IP Studies in Advanced Mathematics, vol. 28*, American Mathematical Society Providence, RI; International Press, Somerville, 2003.

4. V. Afraimovich, S.-N. Chow, "Topological spatial chaos and homoclinic points of $\mathbf{z}^d$-actions in lattice dynamical systems", *Japan J. Indust. Appl. Math.*, **12** (1995), 367–383.

5. V. Afraimovich, Ya. Pesin, "Travelling waves in lattice models of multi-dimensional and multi-component media: I. General hyperbolic properties", *Nonlinearity*, **6** (1993), 429–455.

6. L.A. Bunimovich, E.A. Carlen, "On the problem of stability in lattice dynamical systems", *J. Differential Equations*, **123** (1995), 213–229.

7. D.R. Orendovici, Ya.B. Pesin, *Numerical methods for bifurcation problems and large-scale dynamical systems. Minneapolis.*, Springer, NY pages 327–358, 2000.

8. L.P. Shilnikov, A.L. Shilnikov, D.V. Turaev, L.O. Chua, *Methods of Qualitative Theory in Nonlinear Dynamics. Part I*, World Scientific Publishing Co., Inc., River Edge, NJ, 1998.

9. D.Sterling, H.R. Dullin, J.D. Meiss, "Homoclinic bifurcations for the Henon map", *Phys. D*, **134** (1999), 153–184.

Applying the method of one-dimensional perturbations chaotic maps in cellular networks

© **M.I. Malkin**[2]

Abstract. In the paper, the presence of chaotic behavior has been shown for some classes of cellular networks which are discrete models of diffusion type equations. To this aim, the author's method for proving the existence and stability of topological horseshoes near degenerate chaotic low dimensional map has been applied.

Key Words: Difference equations, chaotic behavior of trajectories, cell network, discrete models of diffusion

[2] Assistant professor of differential equations and mathematical analysis, Nizhny Novgorod State University. Lobachevsky, Nizhny Novgorod, malkin@mm.unn.ru

УДК 517.9

Исследование математических моделей взаимодействия многовидовых сообществ

© Т. Ф. Мамедова[1], А. А. Ляпина[2]

Аннотация. Рассматривается математическая модель экосистемы типа хищник-жертва. В работе приведены примеры исследования нелинейных динамических моделей эколого-экономических систем на устойчивость и стабилизацию по части переменных.

Ключевые слова: асимптотическая устойчивость по части переменных, система обыкновенных дифференциальных уравнений, эколого-экономическая система, модель «хищник-жертва», динамика экосистем.

В настоящее время большое внимание уделяется изучению методов исследования процессов эволюции различных сообществ, в том числе одной из центральных проблем математической экологии - проблеме устойчивости, стабильности экосистем. На сегодняшний день существует множество разработанных подходов решения данной задачи.

Настоящая работа посвящена изучению методом сравнения Е.В.Воскресенского [1] процессов изменения структуры взаимодействующих сообществ в экологии, описываемых нелинейными обыкновенными дифференциальными уравнениями. Рассматриваются системы двух и более нелинейных дифференциальных уравнений, исследуется одна из основных задач системной динамики - оценка устойчивости системы.

Рассмотрим вольтеровскую модель взаимодействия n видов [6]

$$\frac{dx_i}{dt} = x_i(\varepsilon_i - \Sigma_{i=1}^{n} \gamma ij x_j) \tag{1.1}$$

где x_i - численность популяции i-го вида; γ_{ij} - показатель внутривидового взаимодействия $i \neq j$; ε_i - скорость естественного прироста или смертности i-го вида при отсутствии остальных видов.

Биологический смысл имеют лишь неотрицательные решения системы (1.1) . Обобщенные коэффициенты прироста в модели (1.1) обозначим через функцию:

$$G_i(x_1, ..., x_n) = \varepsilon_i - \Sigma_{i=1}^{n} \gamma ij x_j$$

Для изолированной системы численность популяции зависит от структуры видов, поэтому обозначим через $F_i(x_1, ..., x_n)x_i G(x_1, ..., x_n)$. Тогда система (1.1) примет вид:

$$\frac{dx_i}{dt} = F_i(x_1, ..., x_n; t), i = \bar{1, n}$$

где функции F_i описывают скорость изменения численности популяции в зависимости от структуры видовых взаимодействий и их количественных показателей. Будем решать задачу об устойчивости состояния равновесия системы методом сравнения Е.В.Воскресенского [1].

Для применения метода сравнения Е.В.Воскресенского запишем систему (1.1) в матричной форме:

$$\dot{x} = A(t)x + f(t, x) \tag{1.2}$$

[1] Профессор кафедры прикладной математики, Мордовский государственный университет имени Н. П. Огарева, г. Саранск, mamedovatf@yandex.ru.

[2] Аспирант кафедры прикладной математики, Мордовский государственный университет имени Н. П. Огарева, г. Саранск, lyapina@e-mordovia.ru.

где $X = \begin{pmatrix} x_1 \\ ... \\ x_n \end{pmatrix}$; $A(t) = \begin{pmatrix} a_{11} & ... & a_{1n} \\ ... & ... & ... \\ a_{n1} & ... & a_{nn}) \end{pmatrix}$ $f(t,x) = \begin{pmatrix} f_1(t,x) \\ ... \\ f_n t,x) \end{pmatrix}$

Решение $x(t:t_0,x_0)$ уравнения (1.2) существует для всех начальных условий $(t_0,x_0) \in T \times R^n$ и $t \in T$ $,T = [0,+\infty]$. Предполагается так же, что уравнение (1.2) имеет нулевое решение, которое является единственным состоянием равновесия экосистемы, описываемой дифференциальным уравнением (1.1). Все результаты сформулируем относительно этого решения при $\bar{M}_0 = N$.

Алгоритм метода сравнения Воскресенкого состоит в следующем.

Рассмотрим уравнения

$$\dot{x} = A(t)x + f(t,x), \tag{1.3}$$

$$\dot{y} = A(t)y, \tag{1.4}$$

где $A(\cdot) : [T,+\infty) \to Hom(R^n, R^n)$, $f \in C^{(0,1)}(R^1_+ \times R^n, R^n)$.

Решение $x(t:t_0,x_0)$ уравнения (1.3) существует для всех начальных условий $(t_0,x_0) \in T \times R^n$ и $t \in T$, $T = [0,+\infty)$.

Предположим так же, что уравнение (1.3) имеет решение $x(t) \equiv 0$.

Рассмотрим множества $N_0 \subseteq M \subseteq M_0 \subseteq \bar{M}_0 \subseteq N$, где $N = 1,2,\ldots,n$.

Пусть выполняются условия:

1. $|f_j(t,x_j,\ldots,x_n)| \le \lambda_j(t,|x_{j_1}|,\ldots,|x_{j_q}|)$, $\forall j \in N$, $\{j_1,\ldots,j_q\} \in M_0$; $\lambda_j : [T,+\infty) \times R^q_+ \to R^1_+$, $R^1_+ = [0,+\infty)$, $\lambda_j \in C([T,+\infty) \times R^q_+)$, $\lambda_j(t,r_1,\ldots,r_i,\ldots,r_q) \le \lambda_j(t,\overline{r_1},...,\overline{r_i},...,\overline{r_q}), r_i \le \overline{r_i}$, $i = \overline{1,q}$ при всех $t \in [T,+\infty)$.

2. $R_0 = \{x : x \in R^n, x = colon(x_1,...,x_n), x_j = 0, j \notin \overline{M_0}\}$.

3. Фундаментальная матрица $Y(t) = (y_{ij}(t)), i,j = \overline{1,n}$ нормирована в точке $t_0 \in [T_0,+\infty)$, $T_0 \ge T$, $Y^{-1}(t) = (y^{ij}(t))$, $i,j = \overline{1,n}$.

4.Эталонные функции сравнения $\mu_i : [T,+\infty) \to R^1_+$, $m_i : [T,+\infty) \to R^1_+$, удовлетворяют неравенствам

$$\mu_i \ge \max_{j \in N_0}\{|y_{ij}(t)|\},$$

$T_0 \le t_0 \le t < +\infty$, $i \in M_0$, если $N_0 \ne 0, j \in N_0$ и $\mu_i(t) \ge 0$, если $N_0 = 0$, $i \in M_0$,

$$m_i(t) \ge \max\{\max_{j \in \bar{M}_0}\{|y_{ij}(t)|\}\mu_i(t)\},$$

$T_0 \le t_0 \le t < +\infty$, $i \in M_0$.

5. Пусть

$$J_i(t,\varphi) = \int_{t_0}^{t} \sum_{j \in M, k \in B} y_{ik}(t) y^{jk}(s) f_j(s,\varphi(s)) ds - \int_{t}^{+\infty} \sum_{j \in N, k \in B} \{y_{ik}(t) y^{jk}(s) f_j(s,\varphi(s)) ds\},$$

$B = N - M$, $J_i(t,\varphi)$ существует $\forall i \in N$, $c \in R^1_+$ и $J_i(t,\varphi) = o(\mu_i(t))$ при $t \to +\infty$ и всех $i \in M_0$.

Несобственные интегралы сходятся равномерно по t на любом компакте из $[T;+\infty)$.

6. Все решения уравнения

$$\frac{dz}{dt} = \sum_{k,j \in N} |y^{jk}(t)| \lambda_j(t, zm(t)),$$

определены на любом компакте из $[T, +\infty)$.

Тогда справедлива следующая теорема.

Теорема 1. Пусть уравнения (1.3) и (1.4) асимптотически эквивалентны по Брауеру, условие (5) имеет место равномерно относительно $0 < c < +\infty$ при $t \to +\infty$ и $\frac{J_i(t,c)}{\mu_i(t)} \to 0$ равномерно по t при $c \to 0, \mu_i(t) \to 0, \forall t \in [T, +\infty), \forall i \in M_0$. Тогда для того, чтобы тривиальное решение уравнения (1.3) было устойчиво (асимптотически устойчиво) по части переменных, необходимо и достаточно, чтобы уравнение (1.4) было устойчиво (асимптотически устойчиво) по той же части переменных.

Доказательство теоремы вытекает из доказательства теоремы 5 [5].

Исследование модели взаимодействия двух сообществ.

Рассмотрим модель взаимодействия двух сообществ с постоянной общей численностью [2].

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = \alpha x - \beta xy - \gamma x^3, \\ \frac{dy}{dt} = k\beta xy - my. \end{cases} \tag{1.5}$$

здесь где x, y - численность популяций жертвы и хищника соответственно. Если популяция жертв отсутствует, то размер популяции хищников растет экспоненциально со скоростью α ; тогда как в отсутствии популяции хищника смертность популяции жертв - экспоненциально. Следовательно, коэффициентам α и β соответствует внутривидовая скорость роста численности жертв и внутривидовая скорость смертности хищников, соответственно. $\gamma > 0$, γx^3 - описывает внутривидовую конкуренцию, $g(x)$ - зависимость плотности жертв в отсутствии хищников. a , d , e , w - положительные параметры.

Для численной реализации выберем следующие параметры: $\alpha = -0,15$, $\beta = 2,5$, $\gamma = 0,1$, $k = 0,2$, $m = 0,008$.

Тогда система (1.5) примет вид:

$$\begin{cases} \frac{dy_1}{dt} - 0,15y_1 - 2,5y_1y_2 - 0,1y_1^3 \\ \frac{dy_2}{dt} = 0,5y_1y_2 - 0,008y_2 \end{cases} \tag{1.6}$$

Точка $(0,016; 0,0131)$ - положение равновесия системы (1.6).

Сделаем замену переменных и перейдем к исследованию нулевого решения соответствующего первого линейного приближения, которое имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = -0,1799x_1 - 0,04x_2 - 2,5x_1x_2 + 0,0048x_1^2 + 0,1_1^3 - 0,1 \\ \frac{dx_2}{dt} = 0,006x_1 + 0,5x_1x_2. \end{cases} \tag{1.7}$$

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = -0,1799x_1 - 0,04x_2 \\ \frac{dx_2}{dt} = 0,006x_1 \end{cases} \tag{1.8}$$

Фундаментальная матрица системы (1.8) и обратная к ней имеют вид:

$$Y(t) = \begin{pmatrix} -0,999e^{0,1777t} & -0,219e^{0,0014t} \\ -0,0338e^{0,1777t} & -0,975e^{0,014t} \end{pmatrix};$$

$$Y^{-1}(s) = \begin{pmatrix} -1,008e^{0,1777s} & -0,226e^{0,1777s} \\ -0,034e^{0,0014s} & -1,032e^{0,0014s} \end{pmatrix}.$$

Множество $N = 1,2$, $\bar{M}_0 = N$, тогда справедливы оценки [1].
$||f_1(t,x)|| \leq |-2,5x_1x_2 + 0,0048x_1^2 + 0,1x_1^3 - 0,1029| \leq \lambda_1(|x_1||x_2|)$,
$||f_2(t,x)|| \leq |0,5x_1x_2| \leq |x_1||x_2| = \lambda_2(|x_1||x_2|)$,

поэтому $M_0 = 1, 2$, $M = M_0$, $b = N - M = 0$.

Тогда эталонные функции сравнения $\mu_i[T, +\infty] \to R^1_+$, $m_i : [T, +\infty) \to R^1_+$ удовлетворяют неравенства $\mu_i \geq \max_{j\in N_0} |y_{ij}(t)|, T_0 \leq t_0 \leq t < +\infty, i \in M_0$, если $N_0 \neq 0$; если N_0 , то $\mu_i \geq 0, m_i \geq \max\max_{j\in N_0} |y_{ij}|, \mu_i(t)$, $T_0 \leq t < +\infty$, $i \in M_0$ будут иметь вид:

$$\mu_1(t) = \max_{j\in N_0} |y_{11}, y_{12}| = 0,99e^{-0,177t};$$

$$\mu_2(t) = \max_{j\in N_0} |y_{21}, y_{22}| = 0,975e^{-0,0014t};$$

$$m_1(t) = \max\max_{j\in N_0} |y_{11}, y_{12}|, \mu_1(t) = 0,99e^{-0,177t};$$

$$m_2(t) = \max\max_{j\in N_0} |y_{21}, y_{22}|, \mu_2(t) = 0,975e^{-0,0014t}.$$

Рассмотрим $J_i(t,\varphi) = \int_{t_0}^{t} \sum_{j\in N,k\in B} y_{ik}(t) y^{jk}(s) f_j(s,\varphi(s))ds - \int_t^{+\infty} \sum_{j\in N,k\in M} y_{ik}(t) y^{jk}(s) f_j(s,\varphi(s))ds.$

Выражение $J_i(t,\varphi)$ существует $\forall i \in N, c \in R^1_+$ и $J_i(t,\varphi) = o(\mu_i(t))$ при $t \to +\infty$. Несобственные интегралы сходятся равномерно по t на любом компакте из $[T; +\infty)$.

$J_1(t,\varphi) = -\int_t^{+\partial}(y_{11}y^{11}f_1 + y_{12}y^{12}f_1 + y_{11}y^{21}f_2 + y_{12}y^{22}f_2)ds = -0,95e^{0,177t}\int_t^{+\partial} e^{-0,0014s}ds + 0,42e^{-0,0014t}ds - 0,21e^{-0,177t}\int_t^{+\partial} e^{0,177s}ds + 0,21e^{-0,0014t}\int_t^{+\partial} e^{-0,177s}ds$

$J_2(t,\varphi) = -\int_t^{+\partial}(y_{21}y^{12}f_1 + y_{22}y^{12}f_1 + y_{21}y^{21}f_2 + y_{22}y^{22}f_2)ds = -0,006e^{0,177t}\int_t^{+\partial} e^{-0,0014s}ds - 0,2e^{-0,0014t}ds - 0,0009e^{-0,177t}\int_t^{+\partial} e^{0,177s}ds - 0,96e^{-0,0014t}\int_t^{+\partial} e^{-0,177s}ds$

Все решения уравнения $\frac{dz}{dt} = \sum_{k\in N,j\in N} |y^{jk}(t)|\lambda_j(t, zm(t))$ определены на компакте $[T_0, t_0]$.

$\frac{dz}{dt} = \sum_{k\in N,j\in N} |y^{jk}(t)|\lambda_j(t, zm(t)) = 0,749e^{-0,34t} + 0,88e^{-0,17t}$,

$z = -2,2e^{-0,34t} - 5,134e^{-0,17t}$.

Отсюда следует, что каждое решение системы (1.8) определено на требуемом множестве. Таким образом, условия теоремы 1 [1] выполняются. Так как система уравнений (1.8) асимптотически устойчива по переменным, то тривиальное решение системы уравнений (1.6) обладает этим же свойством по всем переменным.

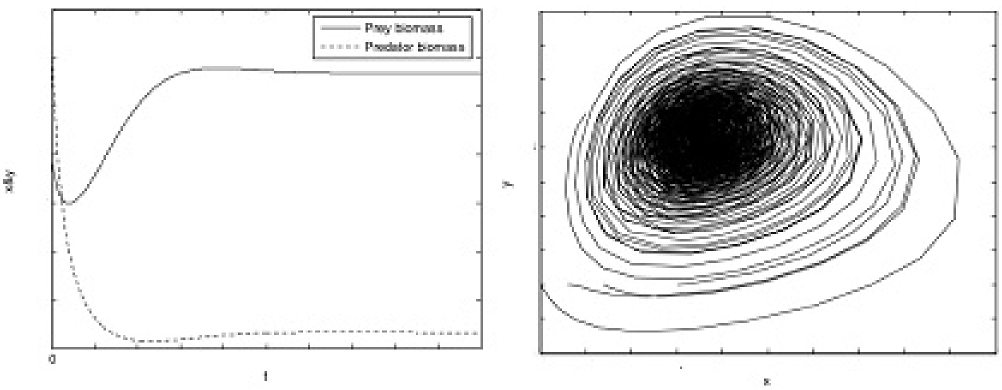


Рисунок **1.1**

Время эволюции всей популяции для системы (1.5) модели «хищник-жертва»

Исследование модели взаимодействия трех сообществ

Для проведения исследования модели взаимодействия трех сообществ рассмотрим [3]. Система дифференциальных уравнений первого порядка (модель Лотки-Вольтерра), описывающая динамику системы «хищник-жертва», имеет следующий вид [4]:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = rx(1-\frac{x}{K}) - a_1xy - \omega_1xz, \\ \frac{dy}{dt} = sy(1-\frac{y}{L}) - a_2xy - \frac{\omega_1yz}{m+y}, \\ \frac{dz}{dt} = b_1\varpi_1xz + b_2\varpi_2\frac{yz}{m+y} - cz. \end{cases} \quad (1.9)$$

здесь где $x\,,y\,,z$ - плотности популяций хищника и двух жертв, предполагается, что все параметры постоянны и неотрицательны; r и s - темпы роста двух видов жертв соответственно; K - емкость среды; L - нижняя критическая численность; c - скорость естественной гибели популяции хищников в единицу времени в расчете на одного хищника в отсутствии жертв; a_1 и a_2 - эффективный коэффициент популяционного роста численности двух видов жертв соответственно (выражают влияние на скорости роста - гибели каждой популяции при наличии другой популяции); $\omega_1\,,\omega_2$ - коэффициенты роста численности хищника за счет потребления жертв; $b_1\,,\ b_2$ - коэффициенты естественной смертности хищника связанные с темпами роста популяции жертв (коэффициенты преобразования, обозначающие число (недавно) родившихся хищников для каждого захваченного вида жертв.

Емкость среды ограничена величиной K, и безграничный рост жертв в отсутствии хищника невозможен. Существует нижняя критическая численность жертв L, и если число особей падает по каким-либо причинам ниже L, популяция вымирает. Для численной реализации выберем следующие параметры:

$r = 3,5$; $K = 150$; $a_1 = 0,001$; $\varpi_1 = 0,24$; $s = 4,5$; $L = 150$; $a_2 = 0,1$; $\varpi_0,21$; $m = 15$; $b_1 = 0,5$; $b_2 = 0,6$; $c = 3,9$.

Тогда система (1.9) примет вид:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = 3,5x(1-\frac{x}{150}) - 0,001xy - 0,24xz, \\ \frac{dy}{dt} = 4,5y(1-\frac{y}{150}) - 0,1xy - \frac{0,21yz}{15+y}, \\ \frac{dz}{dt} = 0,5\cdot 0,24xz + 0,6\cdot 0,21\frac{yz}{15+y} - 3,9z. \end{cases} \quad (1.10)$$

Точка $(31,72;42,89;11,32)$ - положение равновесия системы. Сделаем замену переменных и перейдем к исследованию нулевого решения :

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = -0,702x_1 - 0,03x_2 + 7,61x_3 - 0,023x_1^2 - 0,01x_1x_2 - 0,24x_1x_3 + 0,35, \\ \frac{dx_2}{dt} = -4,28x_1 - 1,24x_2 - 0,03x_2^2 - 0,1x_1x_2 - \frac{0,21x_2x_3+2,3x_2+3x_3+101,95}{x_2+57,89} + 1,86, \\ \frac{dx_3}{dt} = 1,35x_1 - 0,1x_3 + 0,12x_1x_3 + \frac{0,126x_2+11,12}{15x_2+643,35} - 1,14. \end{cases} \quad (1.11)$$

Соответствующее первое линейное приближение имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = -0,702x_1 - 0,03x_2 + 7,61x_3, \\ \frac{dx_2}{dt} = -4,28x_1 - 1,24x_2, (4.7) \\ \frac{dx_3}{dt} = 1,35x_1 - 0,1x_3. \end{cases} \quad (1.12)$$

Фундаментальная матрица системы (1.12) и обратная к ней имеют вид:

$$Y(t) = \begin{pmatrix} 0,65e^{-2,83t} & 0,47e^{-3,64t} & 0,03e^{-1,22t} \\ -0,69e^{-2,83t} & -0,86e^{-3,64t} & e^{-1,22t} \\ -0,3e^{-2,83t} & 0,18e^{-3,64t} & -0,004e^{-1,22t} \end{pmatrix},$$

$$Y^{-1}(s) = \begin{pmatrix} 0,65e^{2,83s} & -0,02e^{0,283s} & -1,84e^{2,83s} \\ 1,12e^{3,64s} & -0,02e^{3,64s} & 2,49e^{3,64s} \\ 1,42e^{1,22s} & 0,87e^{1,22s} & 0 \end{pmatrix}.$$

Множество $N = 1,2,3$, $\bar{M}_0 = N$. Тогда справедливы оценки [1].

$$||f_1(t,x)|| \le |-0,023x_1^2 - 0,01x_1x_2 - 0,24x_1x_3 + 0,35| \le |x_1|^2|x_3| = \lambda_1(|x_1|,|x_3|),$$

$$||f_2(t,x)|| \le |-0,023x_1^2 - 0,01x_1x_2 - 0,24x_1x_3 + 0,35| \le |x_1||x_2|^2 = \lambda_2(|x_1|,|x_2|),$$

$$||f_3(t,x)|| \le |0,12x_1x_3 - 1,14 + \frac{0,126x_2 + 11,12}{15x_2 + 643,35}| \le |x_1||x_2||x_3| = \lambda_3(|x_1||x_2||x_3|).$$

поэтому $M_0 = 1,2,3$, $M = M_0$, $B = N - M = 0$. Тогда эталонные функции сравнения $\mu_i : [T,+\infty) \to R^1_+$, $m_i : [T,+\infty) \to R^1_+$ удовлетворяют неравенствам $\mu_i \ge \max_{j\in N_0}|y_{ij}(t)|$, $T \le t_0 \le t < +\infty$, $i \in M_0$ если $N_0 \ne 0$; если $N_0 = 0$, то $\mu_i \ge 0$, $m_i(t) \ge \max\max_{j\in\bar{M}_0|y_{ij}|,\mu_i(t)}$, $T_0 \le t < +\infty$, $i \in M_0$ и будет иметь вид:

$$\mu_1(t) = \max_{j\in N_0}|y_{11}(t), y_{12}(t), y_{13}(t)| = 0,03e^{-1,22t},$$

$$\mu_2(t) = \max_{j\in N_0}|y_{21}(t), y_{22}(t), y_{23}(t)| = e^{-1,22t},$$

$$\mu_3(t) = \max_{j\in N_0}|y_{31}(t), y_{32}(t), y_{33}(t)| = 0,004e^{-1,22t},$$

$$m_1(t) = \max\max_{j\in N_0}|y_{11}(t)|, |y_{12}(t)|, |y_{13}(t)|, \mu_1(t) = 0,03e^{-1,22t},$$

$$m_2(t) = \max\max_{j\in N_0}|y_{21}(t)|, |y_{22}(t)|, |y_{23}(t)|, \mu_2(t) = e^{-1,22t},$$

$$m_3(t) = \max\max_{j\in N_0}|y_{31}(t)|, |y_{32}(t)|, |y_{33}(t)|, \mu_3(t) = 0,004e^{-1,22t},$$

Рассмотрим $J_i(t,\varphi) = \int_{t_0}^{t}\sum_{j\in N,k\in B} y_{ik}(t)y^{jk}(s)f_j(s,\varphi(s))ds - \int_t^{+\infty}\sum_{j\in N,k\in M} y_{ik}(t)y^{jk}(s)f_j(s,\varphi(s))ds.$

Выражение $J_i(t,\varphi)$ существует $\forall i \in N$, $c \in R^1_+$ и $J_i(t,\varphi) = o(\mu_i(t))$ при $t \to +\infty$. Несобственные интегралы сходятся равномерно по t на любом компакте из $[T;+\infty)$.

$J_1(t,\varphi) = -\int_t^{+\partial}(y_{11}y^{11}f_1 + y_{12}y^{12}f_1 + y_{13}y^{13}f_1 + y_{11}y^{21}f_2 + y_{12}y^{22}f_2 + y_{13}y^{23}f_2 + y_{11}y^{31}f_3 + y_{13}y^{33}f_3 + y_{12}y^{32}f_3)ds = -0,000036(0,42e^{2,83t} - 0,009e^{-3,64t} - 0,05e^{-1,22t})\int_t^{+\infty}e^{-0,83s}ds - 0,009e^{-3,64t} - 0,05e^{-1,22t}\int_t^{+\infty}e^{-1,22t} - 0,03(0,56e^{-2,83t} - 0,0009e^{-3,64t} + 0,07e^{-1,22t})\int_t^{+\infty}e^{-2,44s}ds - 0,000012(0,92e^{-2,83t} + 0,02e^{-1,22t} + 0,45e^{-3,64t})\int_t^{+\infty}e^{-2,44s}ds,$

$J_2(t,\varphi) = -\int_t^{+\partial}(y_{21}y^{12}f_1 + y_{22}y^{12}f_1 + y_{23}y^{13}f_1 + y_{21}y^{21}f_2 + y_{22}y^{22}f_2 + y_{23}y^{23}f_2 + y_{23}y^{33}f_3 + y_{21}y^{31}f_3 + y_{22}y^{32}f_3)ds = -0,0000036(0,44e^{-2,83t} + 0,01e^{-3,64t} + 1,84e^{-1,22t})\int_t^{+\infty}e^{-0,083s}ds + 0,03(0,77e^{-2,83t} - 0,01e^{-3,64t} - 2,49e^{-1,22t})\int_t^{+\infty}e^{-0,02s}ds - 0,00012(0,87e^{-1,22t} - 0,97e^{-2,83t} - 0,82e^{-3,64t})\int_t^{+\infty}e^{-2,44}ds,$

$J_3(t,\varphi) = -\int_t^{+\partial}(y_{31}y^{11}f_1 + y_{32}y^{12}f_1 + y_{33}y^{13}f_1 + y_{31}y^{21}f_2 + y_{32}y^{22}f_2 + y_{33}y^{23}f_2 + y_{31}y^{31}f_3 + y_{32}y^{32}f_3 + y_{33}y^{33}f_3)ds = 0,0000036(0,7e^{-1,22t} - 0,19e^{-2,83t} - 0,03e^{-3,64t}) + \int_t^{+\infty}e^{-0,83s} + 0,03(0,03e^{-2,83t} + 0,003e^{-3,64t} + 0,001e^{-1,22t})\int_t^{+\infty}e^{-0,02s}ds + 0,000012(0,42e^{-2,83t} - 0,17e^{-3,64t} + 0,003e^{1,22t})\int_t^{+\infty}e^{-2,44s}ds,$

Все решения уравнения $\frac{dz}{dt} = \sum_{k\in N, j\in N} |y^{jk}(t)|\lambda_j(t, zm(t))$ определены на компакте $[T_0, t_0]$.

$$\frac{dz}{dt} = \sum_{k\in N, j\in N} |y^{jk}(t)|\lambda_j(t, zm(t)) = 0,000009e^{-0,83t} + 0,1e^{-0,02t} + 0,0003e^{-2,44t},$$

$z = -0,0001e^{-2,44t} - 0,000014e^{-0,83t} - 5,2e^{-0,02t}$.

Отсюда следует, что каждое решение системы (1.9) определено на множестве $[T_0, +\infty)$. Таким образом, условия теоремы 1 [1] выполняются. Так как система уравнений (1.12) асимптотически устойчива по переменным x_1, x_2, x_3, то тривиальное решение системы уравнений (1.11) обладает этим же свойством по всем переменным. Графическая иллюстрация результата приведена на рисунке (1.2):

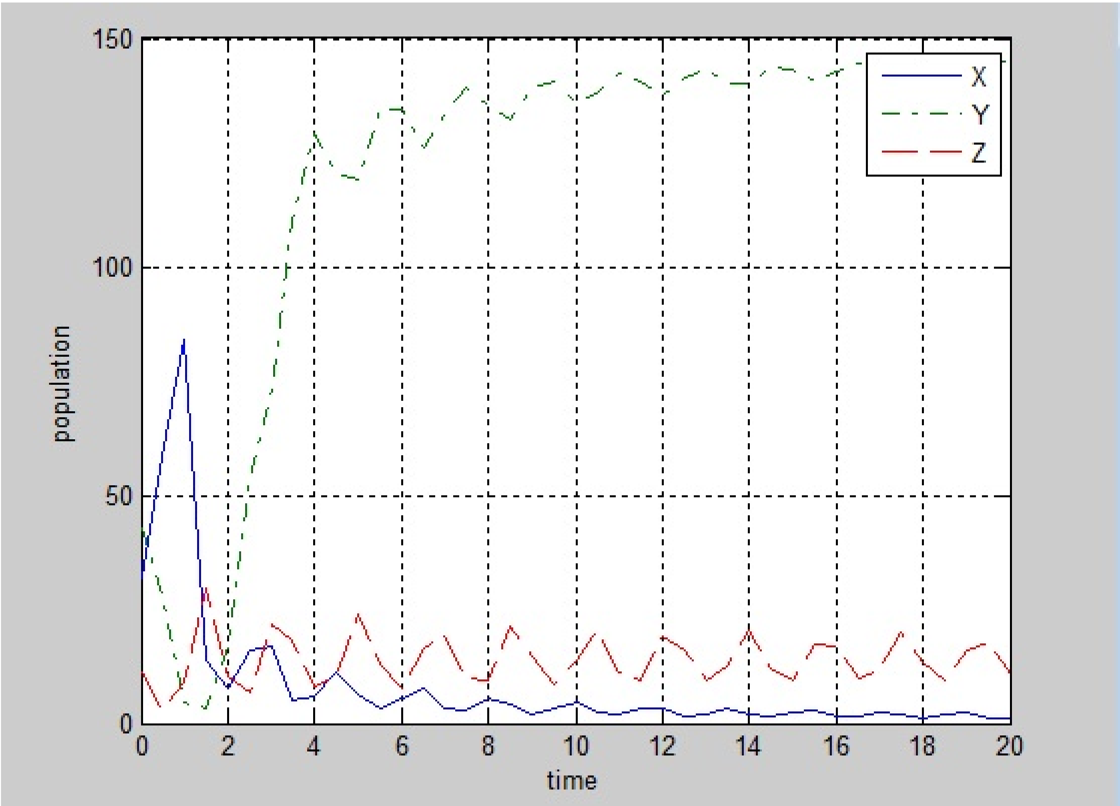


Рисунок **1.2**

Время эволюции всей популяции для системы (4.5) модели «хищник-жертва». Зона наблюдений точка положительного равновесия $(31,72; 42,89; 11,32)$.

Таким образом, условия теоремы 1 выполняются.

Список литературы

1. Воскресенский Е. В., *Асимптотические методы: Теория и приложения*, Средне-волжское математическое общество, Саранск, 2001, 300 с.

2. Yuejian Jie, Yuan Yuan, "Model Stability Analysis of Marine Ecosystem", *International Journal of Biology*, **1**:2 (2009), 22–25.

3. Kar T. K., Chakraborty Kunal., “Bioeconomic modelling of a prey predator system using differential algebraic equitation”, *International Journal of Engineering, Science and Technology*, **2**:1 (2010), 13–34.

4. Kar T. K., Ashim Batabyal, “Persistence and stability of a two prey one predator system”, *International Journal of Engineering, Science and Technology*, **2**:2 (2010), 174–190.

5. Воскресенский Е. В., Мамедова Т. Ф., “Асимптотические методы для части компонент решений дифференциальных уравнений”, *Труды семинара по диф.уравнениям Мордовского университета*, **4**:2 (1992), 6–12.

6. Петросян Л. А., Захаров В. В., *Введение в математическую экологию*, Изд-во ЛГУ, Л, 1986, 222 с.

7. Горстко А. Б., Угольницкий Г. А., *Введение в моделирование эколого - экономических систем*, Издательство РГУ, Ростов на Дону, 1990, 112 с.

Study of mathematical models of interaction between multi-species communities

© T. F. Mamedova[3] A. A. Lyapina[4]

Abstract. In the article new approach is suggested ti the solution stability investigation for the one class of differential equations of Lotka-Volterra type.

Key Words: differential equations of Volterra type, stability, asymptotic stability with respect to par of variables

[3] Associate professor of Applied Mathematics, Mordovian State University after N.P. Ogarev, Saransk, mamedovatf@yandex.ru.

[4] Postgraduate student of Applied Mathematics, Mordovian State University after N.P. Ogarev, Saransk, lyapina@e-mordovia.ru

УДК 519.876.5

Автоматизированная система построения жестких кинетических моделей реакций с участием металлоорганических соединений (АС)

© Д. Ф. Масков[1], И. М. Губайдуллин[2]

Аннотация. В работе представлено описание программного комплекса. Приведены основные направления проектирования автоматизированной системы. Показаны структура базы данных кинетических исследований, схема взаимодействия вычислительных блоков, методы распараллеливания кинетических задач. Работа выполняется при финансовой поддержке РФФИ (гранты №12-07-00324 и №12-07-31029).

Ключевые слова: Кинетическая модель, программа, база данных, численные методы.

1. Введение

Исследование механизмов сложных химических реакций сопровождается обработкой большого объема экспериментальной информации, использованием математических аппаратов моделирования (алгоритмов и методов решения прямых и обратных задач химической кинетики), технических средств распределения вычислительной нагрузки. Эффективный процесс исследования механизмов химических реакций должен опираться на качественное решение приведенных выше задач: необходимо разработать базу данных натурных и вычислительных экспериментов, определить основные вычислительные блоки и связи между ними, способ автоматизированного выбора математического аппарата в зависимости от жесткости химической системы, и метод распараллеливания кинетической задачи. Автоматизация процесса исследования позволит уделить больше внимания творческим задачам и предоставит больший простор для вычислительных экспериментов.

2. Этапы проектирования и разработки

2.1. База данных натурных и вычислительных экспериментов.

База данных разработана на основе теории баз данных [1] и детального исследования процесса разработки кинетических моделей. Структура базы данных поделена на четыре логических блоков (рисунки №№ 1,2,3,4): сведения о реакциях, данные об участвующих в реакциях веществах, сведения по условиям и результатам проведения химических экспериментов, сведения по условиям и результатам проведения вычислительных экспериментов. Так, данные исследуемых реакций включают в себя принадлежность группе (таблица «Группа»), название (таблица «Реакция»), различные предполагаемые схемы реакций (таблицы «Схема реакции», «Стадия реакции», «Схема стадии»), на основе которых происходит формирование стехиометрической матрицы, необходимой для задания системы обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений. На основании схемы стадий и структуры веществ (таблицы

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

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

«Вещества реакции», «Вещество», «Атомы веществ», «Атом») осуществляется расчет атомарно-молекулярных матриц, которые необходимы для проверки закона сохранения масс. Условия и результаты проведения химического эксперимента (таблицы «Эксперимент», «Экспериментальные данные») в совокупности с условиями расчета (таблица «Расчет») позволяют определить кинетические параметры реакции (таблицы «Кинетическая константа», «Энергия активации»). Разработанная модель базы данных дает возможность хранить разные схемы и эксперименты исследуемой реакции. Разбиение структуры на четыре логических блока, следование стандартам теории баз данных и опыта создания кинетических моделей упрощает расширение и изменение базы данных.

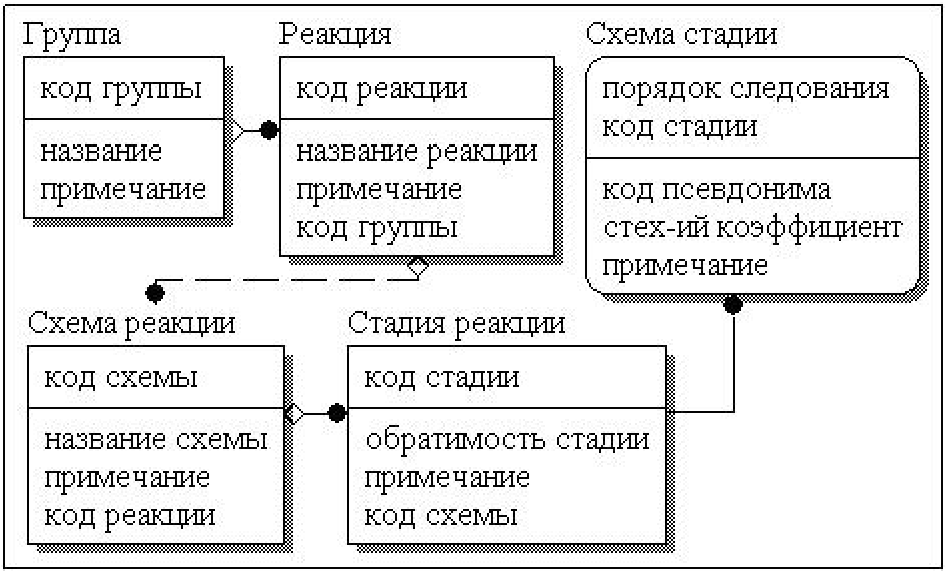


Рисунок 1. Логический блок «Сведения о реакции»

Рисунок 2. Логический блок «Данные о веществах реакции»

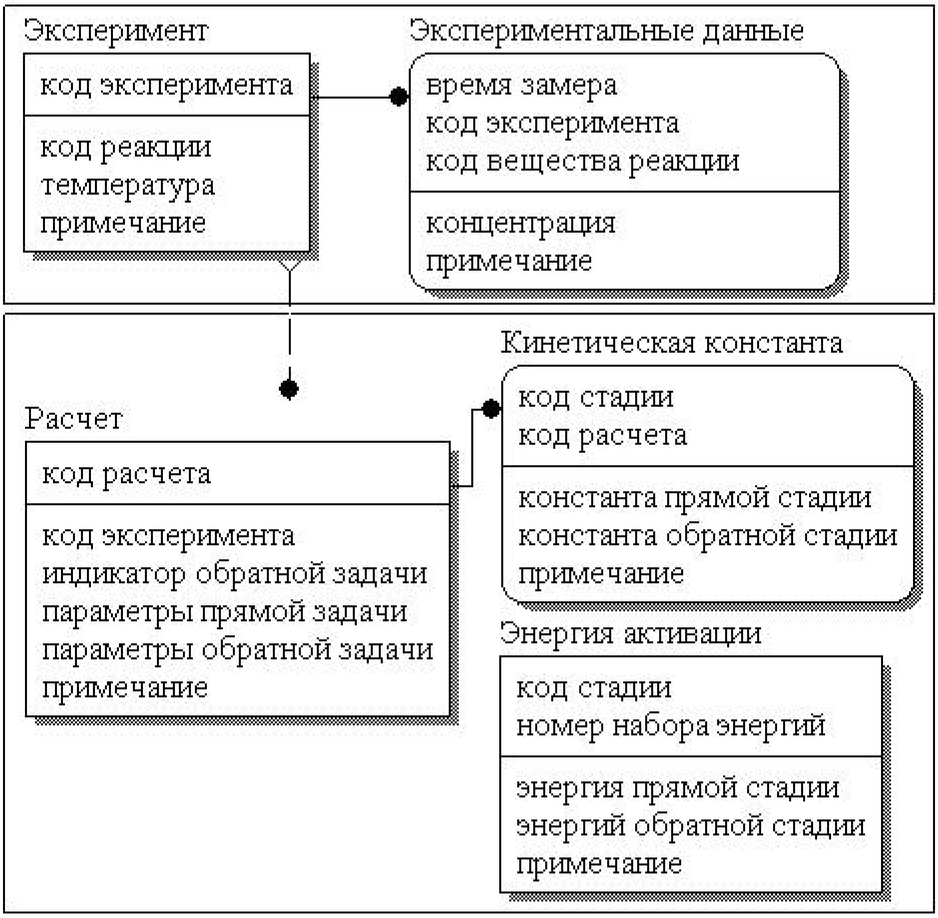


Рисунок 3. Логические блоки «Химический и вычислительный эксперименты»

2.2. Основные вычислительные блоки, их взаимодействие.

К основным вычислительным блокам АС следует отнести:

1. «Математическое описание»
2. «Анализ жесткости химической системы»
3. «Метод решения прямой задачи»
4. «Функционал минимизации»
5. «Метод решения обратной задачи»

1. «Математическое описание»- реализует функциональные зависимости, сформированные на основе стехиометрических матриц, и подставляемые в правые части системы обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений (СОНДУ) [2]. Реализована модель «закона действующих масс» [3].

2. «Анализ жесткости системы»- определяет жесткость химической системы на основе результатов решения матрицы Якобиана [4] из частных производных правых частей СОНДУ.

3. «Метод решения прямой задачи»- рассчитывает состав и скорость химической реакции на основе функций правой части СОНДУ. Реализованы: «Рунге-Кутта», неявный метод «Эйлера» [5].

4. «Функционал минимизации»- выполняет сравнение данных, полученных численным и экспериментальным путями. Реализованы: «Сумма абсолютных разностей», «Среднеквадратичное отклонение»

5. «Метод решения обратной задачи»- производит поиск кинетических констант на основе их начальных значений с целью минимизации указанного функционала. Реализованы: «Покоординатный спуск» [5], «Случайный поиск» [6].

Взаимодействие вычислительных блоков происходит следующим образом (рисунок 4): на первоначальном этапе, «центр вычислений» обращается к математическому описанию для установления вида СОНДУ, далее, проводится анализ жесткости химической системы и определяются численные методы решения СОНДУ (явные, неявные). На следующих этапах происходит итеративный вызов метода решения обратной задачи с запросом значения функционала минимизации, который в свою очередь обращается к методу решения прямой задачи для получения концентраций. Метод решения прямой задачи использует функцию правых частей из блока математического описания. На каждой итерации изменение значений кинетических констант производится до достижения требуемой точности.

Рисунок 4. Взаимодействие вычислительных блоков.

2.3. Распараллеливание решения 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 [7].

Известно, что для каждой реакции при данной температуре константа скорости является постоянной величиной [8]. Рассчитав константы скорости решением обратной задачи при заданном в ходе эксперимента наборе температур, можно с уверенностью сказать, как поведет себя химическая реакция при изменении температуры, не проводя химический эксперимент и не возобновляя расчеты. При этом вследствие ресурсоемкости решения обратной задачи, возникает необходимость ускорить вычисления связанные с прямой задачей. Распараллеливание прямой задачи возможно по блокам экспериментальных данных, замеренных при разных температурах. Предлагаемая модель распараллеливания вычислительного процесса приведена на рисунке 3.

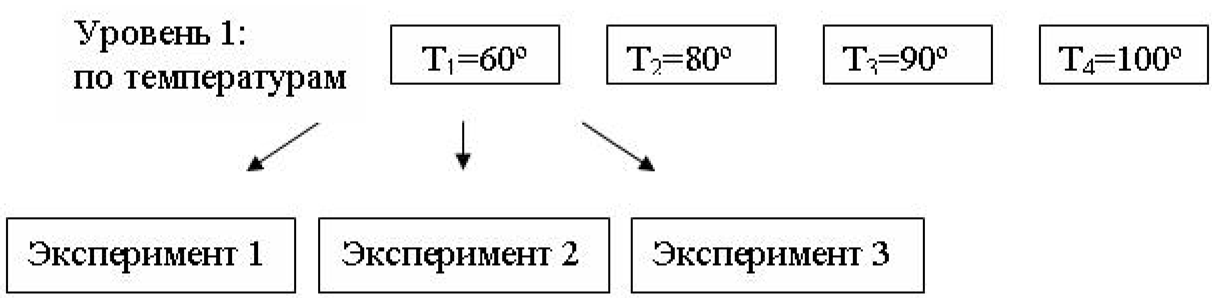


Рисунок 5.Распределенный процесс обработки частной реакции

Как видно из рисунка, 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 оптимальных значений кинетических констант. Приведенная схема распараллеливания решения прямой задачи позволяет добиться кратного прироста производительности. В качестве платформ увеличения производительности в АС используются: регистры SSE одно- и многопроцессорных ЭВМ, графические карты, кластеры

3. Заключение.

Определены основные направления проектирования АС. Разработана и опробована база данных натурных и вычислительных экспериментов. Выполняется заполнение базы данных данными химических реакций с участием металлоорганических соединений. Определены основные вычислительные блоки, их взаимодействие. Установлена типовая модель оптимизации вычислительного процесса с учетом жесткости химической системы и возможностью распараллеливания кинетической задачи. Проводятся работы по стандартизации и интеграции алгоритмов и методов решения прямых и обратных задач химической кинетики.

Список литературы

1. Боуман Дж, Эмерсон С., Дарновски С., *Практическое руководство по SQL*, Питер, СПб, М., 2002, 325 с.
2. Фихтенгольц Г. М., *Курс дифференциального и интегрального исчисления*, ФИЗМАТЛИТ, М., 2005, 728 с.
3. Царева З.М., Орлова Е.И., *Теоретические основы химической технологии*, Киев, Высшая школа, 1986, 255 с.
4. Арнольд В. И., *Обыкновенные дифференциальные уравнения*, Наука, М., 1966, 368 с.
5. Самарский А. А., *Численные методы*, Наука, М., 1989, 240 с.
6. Карманов В. Г., *Математическое программирование*, Наука, М., 2000, 264 с.
7. Губайдуллин И.М., Рябов В.В., Тихонова М.В., “Применение индексного метода глобальной оптимизации при решении обратных задач химической кинетики”, *Вычислительные методы и программирование*, 2011, № 12, 137–45.
8. Спивак С.И., Губайдуллин И.М., Вайман Е.В., *Обратные задачи химической кинетики*, БашГу, Уфа РИО, 2003, 110 с.

An automated system for constructing hard kinetic models of reactions involving organometallic compounds (AS)

© D. F. Maskov[3] I. M. Gubaydullin[4]

Abstract. The paper describes the software system. The main directions of design automation system. Shows the structure of a database of kinetic studies, the scheme of interaction, computational units, parallelization techniques kinetic problems. This work is supported by RFFI (grants № 12-07-00324 and № 12-07-31029).

Key Words: kinetic model, program, database, numerical methods

[3] Postgraduate student laboratory of mathematical chemistry, Institute of petrochemical and catalysis, Ufa; denismaskov@mail.ru

[4] Senior research associate in the laboratory of mathematical chemistry, Institute of petrochemical and catalysis, Ufa; irekmars@mail.ru

УДК 517.9

Грубые гетероклинические кривые в нейронных сетях

© И.С. Клыков[1], О.В. Починка[2]

Аннотация. Полученный результат является доказательством существования грубых гетероклинических кривых в системе дифференциальных уравнений типа Лотки-Вольтерра, которая была предложена для моделирования когнитивных и эмоциональных функций мозга в работах [5],[6].

Ключевые слова: нейронные сети, гетероклинические цепочки, система Лотки-Вольтерра.

1. Введение

Традиции моделирования процесса мышления на базе теории динамических систем берут своё начало с рождения кибернетики в конце 1940-х годов [1]. Однако в то время преобладало влияние символического описания искусственного интеллекта и применение чисто информационного подхода к психологическим задачам. Кроме того, ещё в 1960-1970-х годах отсутствовали экспериментальные технологии исследования мозга с достаточно высоким пространственным и временным разрешением. Поэтому попытки динамического описания "живого интеллекта" в то время особого успеха не имели.

В конце XX века динамические идеи применительно к мозгу вновь стали популярны. К примеру, авторы [2] описали развитие определённого поведения новорождённого, такого как "лягание" и "потягивание" с помощью динамических понятий устойчивости, аттракторов в фазовом пространстве и их бифуркаций. Поиски динамических механизмов эмоционального поведения ведутся многие десятилетия. Например, уже в 1935 г. высказывались мнения, что эмоции — это последовательность переходных состояний [3]. В работе [4] развивается теория, в рамках которой и положительные, и отрицательные эмоции рассматриваются и измеряются как сосуществующие и конкурирующие динамические процессы.

В недавних работах [5],[6] для моделирования когнитивных и эмоциональных функций мозга предлагается использовать систему дифференциальных уравнений типа Лотки-Вольтерра. При особых условиях в фазовом пространстве системы удается обнаружить негрубую гетероклиническую цепочку соединяющую седловые точки системы.

Настоящая же работа посвящена изучению системы Лотки-Вольтерра и поиску условий, при которых возможно существование грубых гетероклинических пересечений в фазовом пространстве этой системы.

2. Формулировка результатов

Динамику процесса конкуренции когнитивных или эмоциональных мод между собой и эмоциональных и когнитивных мод друг с другом будем описывать системой уравнений типа Лотки-Вольтерра. В обобщённой форме модель Лотки-Вольтерра имеет вид

[1] Студент кафедры теории функций ННГУ им. Н.И. Лобачевского; igor.kl@mail.ru
[2] Доцент кафедры теории функций ННГУ им. Н.И. Лобачевского; olga-pochinka@yandex.ru

$$\frac{\partial}{\partial t}x_i(t) = x_i\left\{\mu_i(E) - \sum_{j=1}^{n}\varphi_{ij}(E)x_j(t)\right\} + x_i(t)\eta(t), i \in \mathbb{N}, i = \overline{1,n}, \tag{2.1}$$

где $x_i \geq 0$ характеризует активность i-й моды (численность i-й популяции в экологии), n — число взаимодействующих мод (популяций), $\mu_i(E)$ — икремент i-й моды, E — поступающая в систему информация или доступные ресурсы, $\varphi_{ij}(E)$ — элементы матрицы взаимодействия, $\eta(t)$ — мультипликативный шум, присутствующий в системе.

Положим $\mu_i(E) = 1, i = \overline{1,n}$ и рассмотрим данную модель в пространстве $\mathbb{R}^3$ при отсутствии мультипликативного шума. Тогда система примет вид

$$\frac{\partial}{\partial t}x_i(t) = x_i\left\{1 - \sum_{j=1}^{3}\varphi_{ij}(E)x_j(t)\right\}, i \in N, i = \overline{1,3}, \tag{2.2}$$

Авторами [5],[6] была исследована динамика системы (2.2) в предположении, что матрица взаимодействия $(\varphi_{ij}(E))$ имеет вид

$$(\varphi_{ij}(E)) = \begin{pmatrix} 1 & \alpha & \beta \\ \beta & 1 & \alpha \\ \alpha & \beta & 1 \end{pmatrix} \tag{2.3}$$

А именно, при условии $\beta > 1 > \alpha$, $\beta + \alpha > 2$ в фазовом пространстве системы точка $(0,0,0)$ является источником, а точки $(1,0,0), (0,1,0), (0,0,1)$ — седлами, каждое из которых имеет одномерное неустойчивое многообразие. Кривые по которым пересекаются седла образуют негрубую гетероклиническую цепочку. Любая траектория, попав в некоторую окрестность гетероклинической цепочки, проходит всю цепочку от седла к седлу, не покидая этой окрестности.

Настоящая работа посвящена исследованию модели Лотки-Вольтерра на предмет наличия в ней грубых гетероклинических пересечений в пространстве $\mathbb{R}^3$ при отсутствии мультипликативного шума для матрицы взаимодействия $(\varphi_{ij}(E))$ следущего вида

$$(\varphi_{ij}(E)) = \begin{pmatrix} 1 & \mu & \mu \\ \mu & 1 & \mu \\ \mu & \mu & 1 \end{pmatrix} \tag{2.4}$$

При определенных ограничениях на μ в фазовом пространстве системы удалось обнаружить грубые гетероклинические пересечения, а именно, была сформулирована и доказана следущая теорема

Теорема 2.1. *Для матрицы взаимодействия (2.4) и для любых $\mu \in (-\frac{1}{2}, 1)$ в фазовом пространстве системы Лотки-Вольтерра (2.2) существуют грубые гетероклинические кривые.*

Благодарности. Авторы благодарят гранты 12-01-00672, 11-01-12056-офи-м РФФИ, грант правительства Российской Федерации 11.G34.31.0039 и грант Минобрнауки РФ в рамках государственного задания на оказание услуг в 2012-2014 гг. подведомственными высшими учебными заведениями (шифр заявки 1.1907.2011) за частичную финансовую поддержку.

3. Основные понятия и определения

Рассмотрим систему дифференциальных уравнений следующего вида:

$$\begin{cases} \dot{x_1} = P(x_1, x_2, x_3) \\ \dot{x_2} = Q(x_1, x_2, x_3) \\ \dot{x_3} = R(x_1, x_2, x_3) \end{cases} \tag{3.1}$$

или в векторной форме:

$$\dot{x} = F(x), x = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3 \tag{3.2}$$

Решением такой системы дифференциальных уравнений является поток. Дадим более строгое определение потока на метрическом пространстве

Определение 3.1. *Потоком на метрическом пространстве* $(\mathbb{R}^3, d)$ *называется непрерывное отображение* $f : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}^3$ *с групповыми свойствами*

1. $f(x, 0) = x, \forall x \in \mathbb{R}^3$
2. $f(f(x, t), s) = f(x, t + s), \forall x \in \mathbb{R}^3; \forall s, t \in \mathbb{R}$

В дальнейшем для потока будем полагать $f(x, t) = f^t(x), t \in \mathbb{R}$. Многие свойства динамической системы определяются положением и асимптотическим поведением ее траекторий.

Определение 3.2. *Траекторией или орбитой точки* $p \in \mathbb{R}^3$ *называется множество* $O_p = f^t(p), t \in \mathbb{R}$.

Выделяют несколько видов траекторий:

1. Неособые, гомеоморфные $\mathbb{R}^1$.
2. Периодические, гомеоморфные $\mathbb{S}^1$.
3. Неподвижные точки.

Определение 3.3. *1. Точка* p *называется периодической, если* $\exists$ $per(p) > 0$, *такое что* $f^{per(p)}(p) = p, f^t(p) \neq p \;\; \forall t \in (0, per(p))$.

2. Точка $p \in \mathbb{R}^3$ *называется неподвижной, если* $O_p = p$.

В рамках настоящей работы рассматривается система без периодических траекторий с неподвижными точками только гиперболического вида.

Определение 3.4. *Неподвижная точка* p *потока* f^t *называется гиперболической, если среди собственных чисел матрицы Якоби* $(\frac{\partial F}{\partial x})|_p$ *нет чисел с нулевой вещественной частью.*

Рассматривают следующую классификацию гиперболических неподвижных точек

- стоковые (все собственные числа имеют отрицательную вещественную часть),

- источниковые (все собственные числа имеют положительную вещественную часть,
- седловые (неподвижные точки, не являющиеся ни стоковыми, ни источниковыми)

Гиперболичность неподвижных точек приводит к существованию так называемых инвариантных многообразий. Введем следующие обозначения
$W_p^s = \{y \in \mathbb{R}^3 : d(p, f^k(y)) \to 0, k \to \infty\}$ — устойчивое многообразие
$W_u^s = \{y \in \mathbb{R}^3 : d(p, f^{-k}(y)) \to 0, k \to \infty\}$ — неустойчивое многообразие

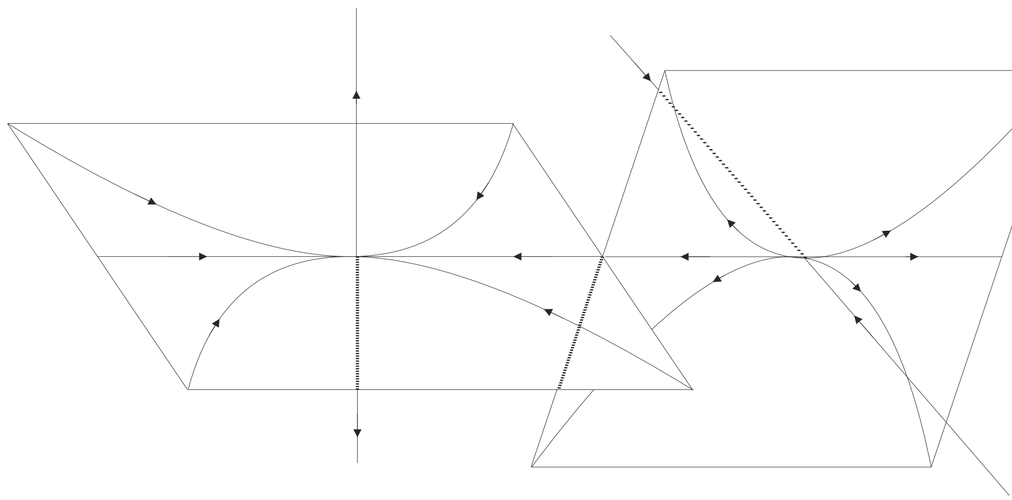


Рис. 1: Грубое пересечение

Определение 3.5. *Для гиперболической неподвижной точки p устойчивое и неустойчивое многообразие называется инвариантным многообразием этой точки, компонента связности $W_p^s \setminus p$ $(W_p^u \setminus p)$ называется устойчивой (неустойчивой) сепаратрисой, а число, равное размерности неустойчивого многообразия называется индексом Морса этой точки.*

Для динамических систем с седловыми неподвижными точками интересен особый вид движение от седла к седлу, являющееся гетероклиническим пересечением инвариантных многообразий. Если инвариантные многообразия пересекаются трансверсально, то такое пересечение называют грубым (рис. 1).

Если инвариантные многообразия пересекаются нетрансверсально, то такое пересечение называют негрубым (рис. 2).

4. Доказательство теоремы 2.1.

Запишем систему (2.2) при условии, что матрица взаимодействия $(\varphi_{ij}(E))$ имеет вид (2.4)

$$\begin{cases} \dot{x_1} = x_1(1 - x_1 - \mu x_2 - \mu x_3) \\ \dot{x_2} = x_2(1 - \mu x_1 - x_2 - \mu x_3) \\ \dot{x_3} = x_3(1 - \mu x_1 - \mu x_2 - x_3) \end{cases} \tag{4.3}$$

Неподвижные точки системы (4.3) и их собственные числа в силу особого вида матрицы взаимодействия $(\varphi_{ij}(E))$ находятся путем несложных вычислений. Итак, в фазовом пространстве системы имеем следущие неподвижные точки: $O = (0, 0, 0), A_1 = (1, 0, 0)$,

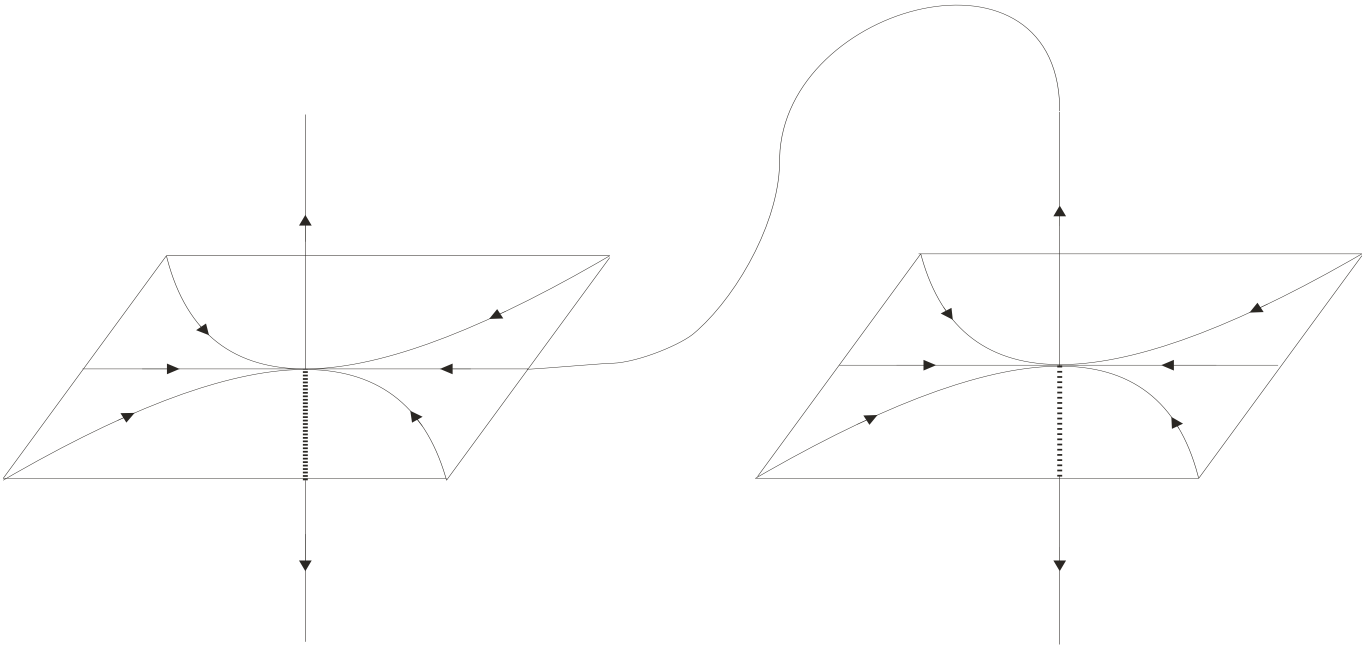


Рис. 2: Негрубое пересечение

$A_2 = (0,1,0), A_3 = (0,0,1), B_1 = (0, \frac{1}{\mu+1}, \frac{1}{\mu+1}), B_2 = (\frac{1}{\mu+1}, 0, \frac{1}{\mu+1}), B_3 = (\frac{1}{\mu+1}, \frac{1}{\mu+1}, 0)$,
$C = (\frac{1}{2\mu+1}, \frac{1}{2\mu+1}, \frac{1}{2\mu+1})$

Для точки O получаем собственные числа: $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = 1$. Точки A_1, A_2, A_3 имеют собственные числа: $\lambda_1 = \lambda_2 = 1-\mu, \lambda_3 = -1-\mu$, а точки B_1, B_2, B_3: $\lambda_1 = \lambda_2 = \frac{-1}{\mu+1}$, $\lambda_3 = \frac{1-\mu}{1+\mu}$. Наконец, для точки C собственные значения будут следущими: $\lambda_1 = \frac{-1}{2\mu+1}$, $\lambda_2 = \frac{\mu-1}{2\mu+1}, \lambda_3 = \frac{-1-\mu}{2\mu+1}$.

Согласно утверждению теоремы $\mu \in (-\frac{1}{2}, 1)$. Тогда в фазовом пространстве системы имеем: O — источник, C — сток, A_1, A_2, A_3 — седла с индексом 2, B_1, B_2, B_3 — седла с индексом 1.

Рассмотрим седловые точки A_1, A_2, B_3 и ограничение системы (4.3) на плоскость $x_3 = 0$

$$\begin{cases} \dot{x_1} = x_1(1 - x_1 - \mu x_2) \\ \dot{x_2} = x_2(1 - \mu x_1 - x_2) \end{cases} \tag{4.4}$$

В фазовом пространстве системы (4.4) точки A_1, A_2 имеют собственные числа: $\lambda_1 = 1-\mu, \lambda_2 = -1-\mu$, а точка B_3: $\lambda_1 = \lambda_2 = \frac{-1}{\mu+1}$. То есть, при $\mu \in (-\frac{1}{2}, 1)$ получаем, что в фазовом пространстве системы (4.4) точки A_1, A_2 — седла, а точка B_3 — сток. Поскольку других неподвижных точек в фазовом пространстве системы (4.4) нет, любая траектория проходящая через седла A_1, A_2 должна двигаться к стоку B_3, что в свою очередь означает наличие гетероклинического пересечения между парами точек A_1, B_3 и A_2, B_3 в фазовом пространстве системы (4.3). Поскольку инвариантные многообразия этих точек пересекаются трансверсально, это пересечение является грубым.

Для остальных пар точек рассуждения будут аналогичными в силу симметрии системы (4.3). Теорема доказана.

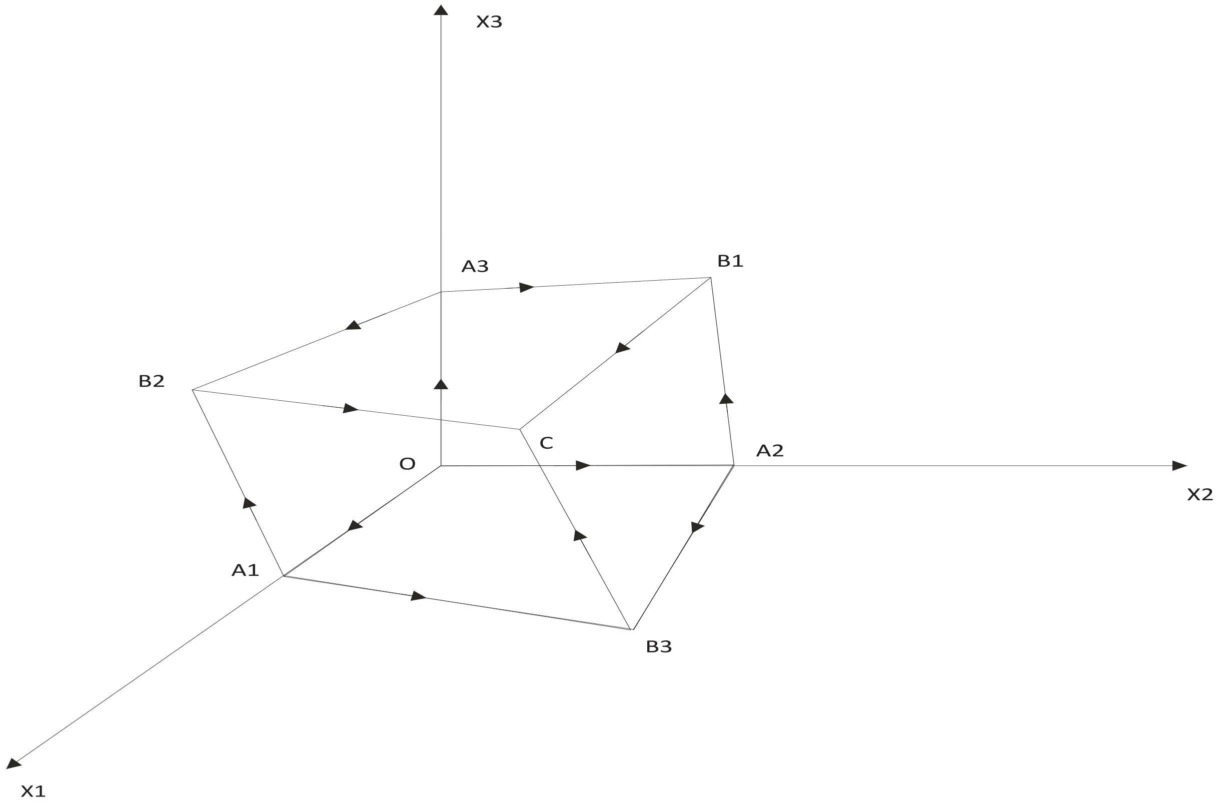


Рис. 3: Иллюстрация к доказательству теоремы

Список литературы

1. Ashby W.R., *Design for a Brain*, J. Wiley, New York, 1954.

2. Thelen E., Smith L.B., *A dynamic Systems Approach to the Development of Cognition and Action*, Cambridge, MA: MIT Press, 1994.

3. Franz A.J., *Psychology of Emotion*, 1935.

4. Zautra A. J., *Emotions, Stress, and Health*, Oxford Univ. Press, New York, 2003.

5. Afraimovich V., Rabinovich M., Varona P., *Heteroclinic Contours in Neural Ensembles and the Winnerless Competition Principle*, Institute for Nonlinear Science. University of California, San Diego, 2002.

6. Рабинович М.И., Мюезинолу М.К., “Нелинейная динамика мозга: эмоции и интелектуальная деятельность”, *Успехи физических наук*, **80**:4 (2010).

Rough heteroclinic curves in neural networks

© I. S. Klykov[3], O. V. Pochinka[4]

Abstract. The result is a proof of the existence of rough heteroclinic curves in the system of differential equations of Lotka-Volterra model, which was proposed to model the cognitive and emotional functions of the brain in papers [5], [6].

Key Words: neural networks, heteroclinic channels, the system of Lotka-Volterra.

[3] Student of theory function chair of Nizhny Novgorod State University after N.I.Lobachevsky; igor.kl@mail.ru

[4] Docent of theory function chair of Nizhny Novgorod State University after N.I. Lobachevsky; olga-pochinka@yandex.ru

УДК 004.02, 519.6

Разработка программного комплекса для анализа строения фуллеренов

© А. Д. Саитгалина[1]

Аннотация. В работе описан алгоритм расчета объема молекул фуллеренов, в основе которого лежит разбиение полиэдрической молекулы на симплексы (пирамиды), вычисление их объемов и последующее суммирование. Обсуждается использование параллельных вычислений для оптимизации временных затрат при решении этой задачи. Разработанный алгоритм положен в основу программного комплекса «Volume», который предполагается использовать для поиска фуллеренов и их производных с необходимыми значениями объема внутренней полости и оценки возможности их инкапсулирования.

Ключевые слова: фуллерен, объем молекулы, инкапсулирование, наноструктуры.

1. Объект исследования

Индустрия наносистем и наноматериалов была объявлена приоритетным направлением развития российской науки. Одна из актуальных проблем этой отрасли знания заключается в получении нанообъектов заданной архитектуры и создании молекулярных устройств на их основе. В качестве исходных веществ для решения этой проблемы активно используются фуллерены, размер молекул которых составляет 7-30 Å. При создании наноустройств чаще всего используются не сами фуллерены, а их производные, обладающие повышенной полярностью и, вследствие этого, склонностью к сильным межмолекулярным взаимодействиям, стабилизирующим наносистему. Основной способ получения таких производных фуллеренам - химическая функционализация за счет присоединения к фуллеренам различных атомов и молекул.

В настоящее время получены эндофуллерены с различными инкапсулированными атомами (He, Ne, Ar, Kr, Xe, N, атомы металлов и др.) и малыми молекулами (H_2, H_2O, N_2, CO) [1], а также теоретически показана возможность образования таких комплексов с более сложными молекулами и коллективами молекул (например, $n H_2@C_{60}$ [2], $C_6H_6@C_{60}$ [3] и др.). Очевидно, перечень атомов и молекул, вводимых внутрь каркасов фуллеренов и их производных будет расширяться, в связи с чем необходима предварительная оценка возможностей образования эндоэдральных комплексов, заключающаяся в сравнительном анализе геометрических параметров каркаса фуллерена и вводимых в его внутреннюю полость атомов и молекул. При этом ключевым параметром, характеризующим возможность инкапсулирования, является внутренний объем фуллерена, который может изменяться при переходе от одного фуллерена к другому, а также при функционализации их молекул. Влияние функциональных групп на внутренний объем молекул фуллеренов ранее не изучалось, поэтому нами запланирован скрининг таких соединений на предмет возможности инкапсулирования. На первом этапе этого исследования нами был разработан алгоритм для вычисления, который положен в основу программы «Volume» и апробирован для изучения зависимости объема фуллеренов от числа атомов в молекуле.

[1] Аспирант лаборатории физико-химических проблем, Институт нефтехимии и катализа РАН, г. Уфа; saitgalinaAD@bashedu.ru.

2. Методика моделирования

Молекула фуллерена с геометрической точки зрения представляет собой полиэдр. Несмотря на то, что используются подходы, основанные на том, что фуллерен - это «поверхность», бывает важным геометрическая характеристика фуллерена как полиэдра.

Гранями полиэдра (фуллерена) являются пятиугольники (пентагоны) и шестиугольники (гексагоны). Они могут быть плоскими либо неплоскими, в связи с чем, нужно триангулировать эти грани (рис. 2.1).

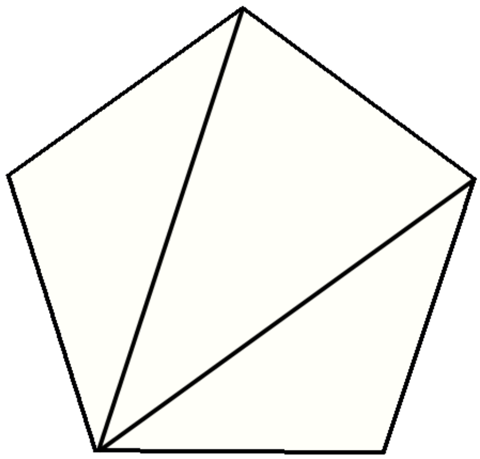


Рисунок **2.1**
Триангулирование пентагонов и гексагонов

Любая молекула фуллерена содержит 12 пентагонов и $F-12$ гексагонов, где $F=N/2-10+12$, F - сумма пентагонов и гексагонов, N - количество вершин.

Для нахождения объема, необходимо полиэдр делить на непересекающиеся симплексы, в рассматриваемом случае, пирамиды, затем найти объем каждой пирамиды и суммировать их.

Выберем внутри полиэдра точку $O(X_C, Y_C, Z_C)$. Каждую грань полиэдра триангулируем и к каждому треугольнику «пристроим» пирамиду с вершиной в точке $O(X_C, Y_C, Z_C)$ (рис. 2.2). Для каждой пирамиды определен объем. Обобщённым объёмом полиэдра назовём сумму этих объёмов. В качестве точки $O(X_C, Y_C, Z_C)$ используем координаты центра масс молекулы фуллерена.

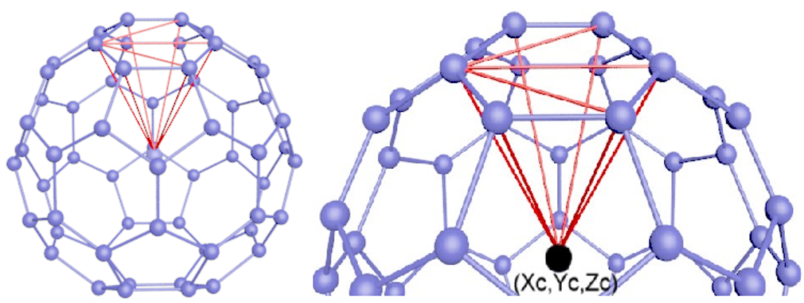


Рисунок **2.2**
Разбиение полиэдра на симплексы

Формула для нахождения обобщённого объёма в данном случае выглядит так:

$$V(C_n)=\sum_{i=1}^{P} v_i+\sum_{j=1}^{G} v_j, \tag{2.1}$$

где $P = 12$ - количество пентагонов, $G = F - P$ - количество гексагонов, v_i и v_j определяются по формулам:

$$v_i = \sum_{k=1}^{T_p} v_{T_k}, \quad v_j = \sum_{j=1}^{T_g} v_{T_j}, \tag{2.2}$$

где T_p - количество треугольников в пентагоне, T_g - количество треугольников в гексагоне, v_{T_k} и v_{T_j} - объемы пирамид, построенных на векторах, началом которых является центр масс молекулы фуллерена O, а концами - вершины полиэдра, соответствующие атомам углеродного каркаса молекулы. Объем каждой из пирамид v_T вычисляли по соответствующим координатам ее вершин $O(X_C, Y_C, Z_C)$, $A_1(x_1, y_1, z_1)$, $A_2(x_2, y_2, z_2)$, $A_3(x_3, y_3, z_3)$

$$v_{ij} = \left| \frac{1}{6} \begin{vmatrix} x_1 - X_C & y_1 - Y_C & z_1 - Z_C \\ x_2 - X_C & y_2 - Y_C & z_2 - Z_C \\ x_3 - X_C & Y_3 - y_C & z_3 - Z_C \end{vmatrix} \right|, \tag{2.3}$$

3. Применение параллельных вычислений

При разработке алгоритма и параллельной программы для вычисления объемов молекул фуллеренов использована технология MPI [4], [5], в которой параллельная программа представляет собой набор последовательных программ, обрабатываемых одновременно. Обычно каждая из них выполняется на своем процессоре и имеет доступ к своей (локальной) памяти. При запуске нескольких программ одновременно на одном или нескольких процессорах требуется механизм, обеспечивающий согласованную работу частей параллельной программы - эту функцию выполняет MPI. Основой для разрабатываемого параллельного алгоритма послужил алгоритм ранее написанной программы для последовательных ЭВМ. Его необходимо было разделить на максимально независимые друг от друга подзадачи, которые можно было бы выполнять параллельно в одно и то же время.

Исходными данными для вычисления объема являются декартовы координаты атомов, составляющих молекулу фуллерена (вершин полиэдра). Однако какие из этих атомов образуют пентагоны, а какие - гексагоны, неизвестно. Поэтому перед нами возникает задача поиска вершин пентагонов и гексагонов.

Для распараллеливания этой задачи множество атомов делится на равные или «почти равные» части, каждая из которых обслуживается отдельным процессором из параллельной программы, обрабатывающим массив координат всех атомов. Затем происходит сбор данных в «родительском» процессоре. В этом же процессоре вычисляются координаты центра масс молекулы фуллерена по формулам:

$$X_C = \frac{\sum_{i=1}^{N} x_i m_i}{\sum_{i=1}^{N} m_i}, \quad Y_C = \frac{\sum_{i=1}^{N} y_i m_i}{\sum_{i=1}^{N} m_i}, \quad Z_C = \frac{\sum_{i=1}^{N} z_i m_i}{\sum_{i=1}^{N} m_i}, \tag{3.1}$$

где m_i - массы атомов, x_i, y_i, z_i - координаты атомов, N - количество атомов.

После триангуляции найденных граней и разделения полиэдра на треугольные пирамиды множество пирамид также равными частями передается отдельным процессорам параллельной программы. Каждый процессор вычисляет объемы этих пирамид и передает «родительскому» процессору. Последний производит суммирование этих объемов и получает внутренний объем полиэдра - молекулы фуллерена. Разработанный алгоритм приведен на рис. 3.1.

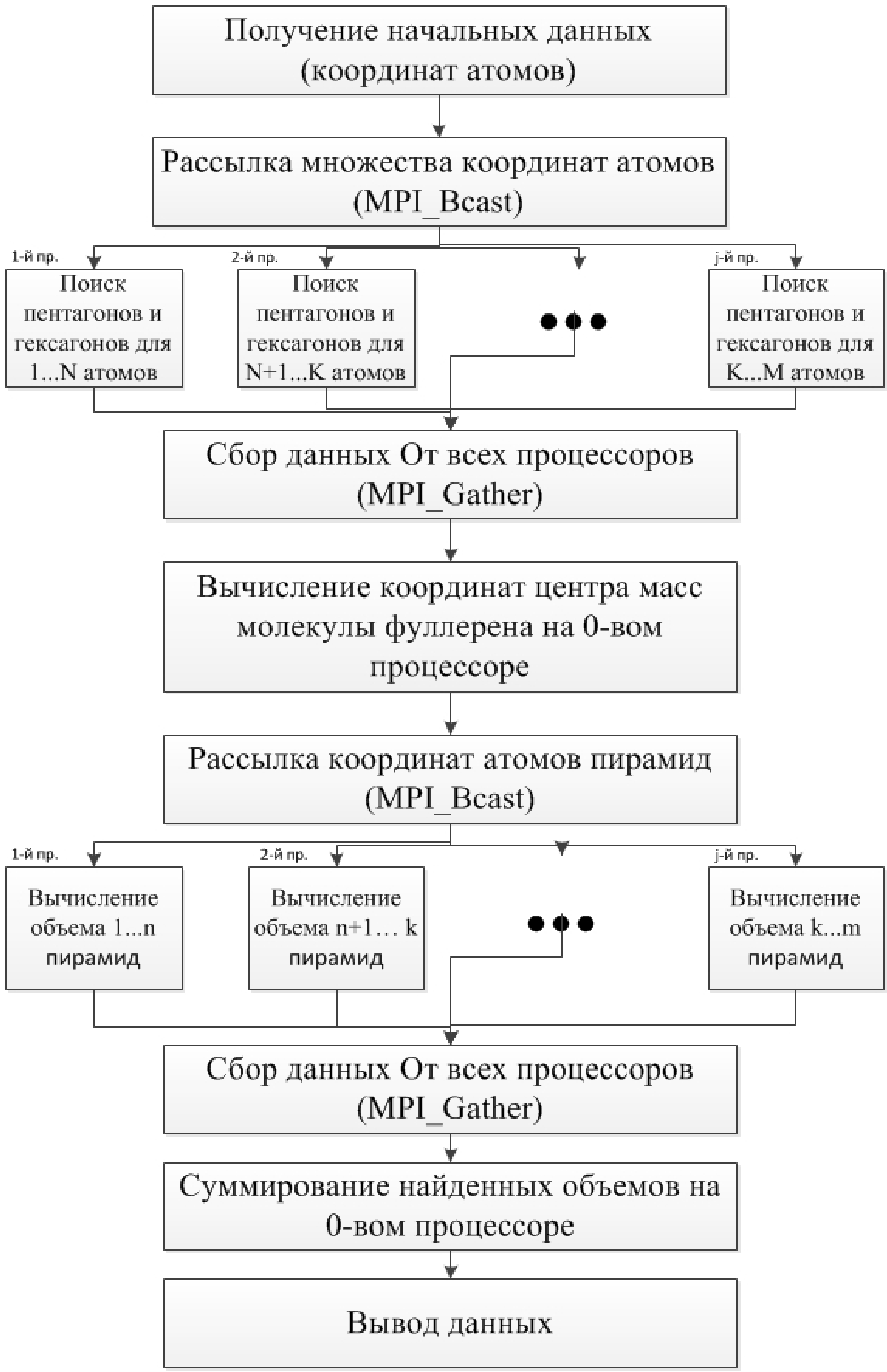


Рисунок **3.1**

Схема работы параллельной программы

4. Результаты

Для вычисления объема молекул фуллеренов $V(C_n)$ использованы координаты атомов из выходного файла квантово-химического расчета. Строение фуллеренов C_{20} (C_i), C_{36} (D_{6h}), C_{60} (I_h), C_{70} (D_{5h}), C_{78} (D_3), C_{78}-1 (C_{2v}), C_{78}-2 (C_{2v}), C_{84} (D_{2d}), C_{540} (I_h) было оптимизировано с использованием стандартных методик методом PBE/ 3ζ (программа "Природа" [6]), корректно воспроизводящим строение, ИК спектр и термодинамические характеристики молекул C_{60} и C_{70} [7], [8]

Как известно [9], размер молекулы фуллерена увеличивается с ростом числа атомов в молекуле n. Однако до сих пор такая зависимость не была изучена количественно. В то же время, известна линейная корреляция между числом атомов в молекуле фуллерена и его средней поляризуемостью [10]. Расчет объема, заключенного внутри полиэдров, вершинами которых являются ядра атомов углерода, образующих молекулы фуллеренов, с использованием программы «Volume» позволил установить некоторые соотношения между величинами V(C_n) и n. Так, было установлено, что изомеры фуллерена C_{78}, относящиеся к разным точечным группам симметрии (два изомера симметрии C_{2v} и один изомер симметрии D_3), характеризуются разными значениями V(C_n), равными для C_{78} (D_3), C_{78}-1 (C_{2v}), C_{78}-2 (C_{2v}) 260.4, 286.9, 264.8 Å^3 соответственно. Можно предположить, что точечная группа симметрии изомерных фуллеренов может играть решающую роль при его инкапсулировании атомами и молекулами. Отметим, что симметрия изомеров не оказывает существенного влияния на другие физико-химические характеристики фуллеренов, например, на их среднюю поляризуемость (для упомянуты выше изомеров C_{78} значения средней поляризуемости составляют $115,26$ Å^3).

Зависимость V(C_n) от n, как видно из рис. 4.1, носит нелинейный характер. При этом с увеличением числа атомов в молекуле фуллерена ее внутренний объем возрастает. Стоит отметить, что ранее изученная корреляционная зависимость средней поляризуемости, имеющей размерность объема, от числа атомов углерода в молекулах фуллеренов является линейной.

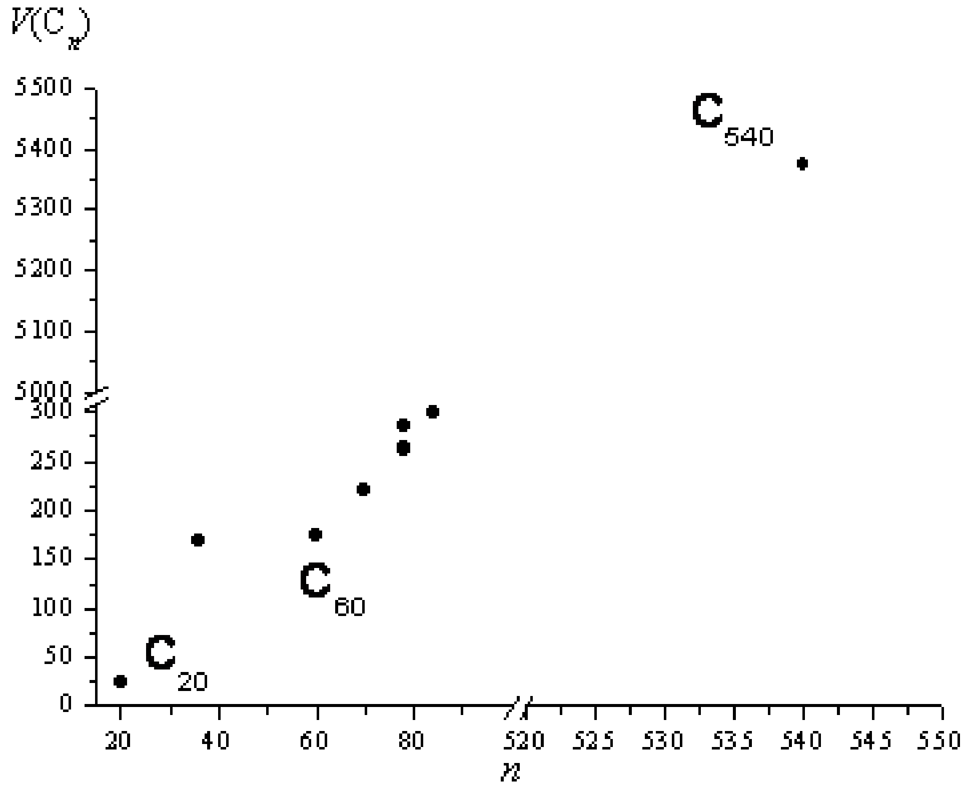


Рисунок **4.1**

Зависимость объема фуллеренов V(C$_n$) от числа атомов в молекуле n

Список литературы

1. Rubin Y., "Ring Opening Reactions of Fullerenes: Designed Approaches to Endohedral Metal Complexes", *Topics in Current Chemistry*, **199** (1999), 57–91, 336 с.

2. Ganji M. D. ,Zure K., "Ring Opening Reactions of Fullerenes: Designed Approaches to Endohedral Metal Complexes", *Molecular Simulation*, **34** (2008), 821–828.

3. Mazurek P., D.,Sadlej-Sosnowska N., "Is fullerene C60 large enough to host an aromatic molecule?", *International Journal of Quantum Chemistry*, **11** (2011), 2398–2405.

4. Воеводин В. В., Воеводин Вл. В., *«Параллельные вычисления»*, БХВ-Петербург, СПб., 2002.

5. Антонов А. С., *«Параллельное программирование с использованием технологии MPI»*, Изд-во МГУ, М., 2004.

6. Лайков Д. Н., Устынюк Ю. А., "Система квантово-химических программ «Природа-04»", *Известия Академии наук. Серия химическая*, 2005, 804–810.

7. Sabirov D. Sh., Bulgakov R. G., "Reactivity of fullerenes family towards radicals in terms of local curvature", *Computational and Theoretical Chemistry*, 2011, № 963, 185–190.

8. Sabirov D. Sh., Bulgakov R. G., “Polarizability of oxygen-containing fullerene derivatives C60On and C70O with epoxide/oxidoannulene moieties”, *Chemical Physics Letters*, 2011, № 506, 52–56, 576 с.

9. Fowler P. W., Manolopoulos D. E., *An Atlas of Fullerene*, Clarendon, Oxford, 1995, 472 с.

10. Сабиров Д. Ш., Хурсан С. Л., Булгаков Р. Г., “Корреляционная зависимость между размером фуллерена и величиной его средней поляризуемости”, *Башкирский химический журнал*, **17**:1 (2010), 46–48.

Development of a software product for the analysis of the structure of fullerenes.

© A. D. Saitgalina[2]

Abstract. In this work the algorithm for calculating the volume of fullerene molecules is described. Algorithm is based on the polyhedral decomposition of the molecule into simplices (the pyramid), the calculation of the volumes and the subsequent summation.Using of parallel processing to optimize the time spent in solving this problem is Discussed. The program product “Volume” is developed using this algorithm.

Key Words: Fullerene, volume, nanostructures, encapsulation.

[2] Postgraduate student laboratory physicochemical problems, Institute of petrochemistry and catalysis of RAS, Ufa; saitgalinaAD@bashedu.ru.

УДК 517.95

О слабой разрешимости смешанной задачи для нелинейного псевдогиперболического уравнения

© **Т. К. Юлдашев**[1]

Аннотация. В данной работе доказывается теорема о слабой обобщенной разрешимости смешанной задачи для нелинейного псевдогиперболического уравнения пятого порядка. С помощью метода разделения переменных получается счетная система нелинейных интегральных уравнений. Используется метод последовательных приближений. Доказывается сходимость полученных рядов.

Ключевые слова: слабая разрешимость, интегральное тождество, система нелинейных интегральных уравнений, метод последовательных приближений.

В области D рассматривается уравнение

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}\left(u(t,x)-\nu\frac{\partial^2 u(t,x)}{\partial x^2}\right)+\mu\frac{\partial^5 u(t,x)}{\partial t\,\partial x^4}+\frac{\partial^4 u(t,x)}{\partial x^4}=f\left(t,x,u(t,x)\right) \tag{1.1}$$

с начальными

$$u(t,x)_{|t=0}=\varphi_1(x),\ \frac{\partial}{\partial t}u(t,x)_{|t=0}=\varphi_2(x) \tag{1.2}$$

и граничными условиями

$$u(t,x)_{|x=0}=u_{x\,x}(t,x)_{|x=0}=u(t,x)_{|x=l}=u_{x\,x}(t,x)_{|x=l}=0, \tag{1.3}$$

где $f\left(t,x,u\right)\in C\left(D\times R\right)$, $\varphi_j(x)\in C^4(D_l)$, $\varphi_j(x)_{|x=0}=\varphi_j''(x)_{|x=0}=\varphi_j(x)_{|x=l}=\varphi_j''(x)_{|x=l}=0$, $j=1,2$, $D\equiv D_T\times D_l$, $D_T\equiv[0,T]$, $D_l\equiv[0,l]$, $0<T<\infty$, $0<l<\infty$, $0<\nu$, μ – малые параметры.

Отметим, что смешанные и краевые задачи были рассмотрены в работах многих авторов, в частности, в [1]-[6]. Представляют большой интерес с точки зрения физических приложений дифференциальные уравнения в частных производных более высоких порядков. Изучение многих задач газовой динамики приводит к рассмотрению дифференциальных уравнений в частных производных более высоких порядков [7].

Определение 1.1. *Если функция $u(t,x)\in C(D)$ удовлетворяет следующему интегральному тождеству*

$$\int_0^T\int_0^l\Big\{u(t,y)\left[\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Phi(t,y)-\nu\frac{\partial^4}{\partial t^2\partial y^2}\Phi(t,y)-\mu\frac{\partial^5}{\partial t\partial y^4}\Phi(t,y)+\frac{\partial^4}{\partial y^4}\Phi(t,y)\right]-$$

$$-f\left(t,y,u(t,y)\right)\Phi(t,y)\Big\}\,dydt=\int_0^l\varphi_1(y)\left[\frac{\partial}{\partial t}\Phi(t,y)-\nu\frac{\partial^3}{\partial t\,\partial y^2}\Phi(t,y)+\mu\frac{\partial^4}{\partial y^4}\Phi(t,y)\right]_{t=0}dy-$$

$$-\int_0^l\varphi_2(y)\left[\Phi(t,y)-\nu\frac{\partial^2}{\partial y^2}\Phi(t,y)\right]_{t=0}dy$$

[1] Доцент кафедры высшей математики, Сибирский государственный аэрокосмический университет имени академика М. Ф. Решетнева, г. Красноярск; tursunbay@rambler.ru.

для любого $\Phi(t,x)\in W_p^{(k)}(D)$, *то функция* $u(t,x)$ *называется решением смешанной задачи* (1.1)-(1.3).

Пусть $b_i(x)=\sqrt{\dfrac{2}{l}}\,\sin\lambda_i x$ – собственные функции дифференциального оператора $\dfrac{\partial^4}{\partial x^4}$, $\lambda_i = dfraci\pi l$, $i=1,2,\ldots$.

Тогда слабое решение смешанной задачи (1.1)-(1.3) разыскивается в виде ряда:

$$u(t,x)=\lim_{N\to\infty}\sum_{i=1}^{N}\left(1-\frac{i-1}{N}\right)a_i(t)\,b_i(x),\quad (t,x)\in D. \tag{1.4}$$

Применение метода разделения переменных в виде (1.4) и использование интегрального тождества позволяет отказаться от непрерывной дифференцируемости правой части уравнения (1.1). Кроме того, такой подход позволяет свести смешанную задачу к счетной системе нелинейных интегральных уравнений (ССНИУ).

Пусть $\lambda_i^4\mu^2-4\lambda_i^2\nu-4<0$. Тогда в силу (1.4) и определения решения смешанной задачи (1.1)-(1.3) получается следующая ССНИУ:

$$a_i(t)=w_i(t)+\int\limits_0^t\int\limits_0^l f\left(s,y,\lim_{N\to\infty}\sum_{j=1}^{N}\Bigl(1-\frac{j-1}{N}\Bigr)a_j(s)\,b_j(y)\right)G_i(t,s)\,b_i(y)\,dyds,$$

где

$$w_i(t)=\exp\Bigl\{-\frac{1}{2}\omega_{1i}(\nu,\mu)t\Bigr\}\Bigl[\varphi_{1i}\cos\omega_{2i}(\nu,\mu)\frac{t}{2}+\frac{2}{\omega_{2i}(\nu,\mu)}\Bigl(\varphi_{2i}+\frac{\varphi_{1i}}{2}\omega_{1i}(\nu,\mu)\Bigr)\sin\omega_{2i}(\nu,\mu)\frac{t}{2}\Bigr],$$

$$G_i(t,s)=\frac{2\exp\Bigl\{-\omega_{1i}(\nu,\mu)\dfrac{t-s}{2}\Bigr\}\sin\omega_{2i}(\nu,\mu)\dfrac{t-s}{2}}{\omega_{0i}(\nu)\Bigl[\omega_{2i}(\nu,\mu)+\omega_{1i}(\nu,\mu)\sin\omega_{2i}(\nu,\mu)s\Bigr]},$$

$$\omega_{0i}(\nu)=1+\lambda_i^2\nu,\ \omega_{1i}(\nu,\mu)=\frac{\lambda_i^4\mu}{\omega_{0i}(\nu)},\ \omega_{2i}(\nu,\mu)=\frac{\lambda_i^2\sqrt{4\omega_{0i}(\nu)-\lambda_i^4\mu^2}}{\omega_{0i}(\nu)}.$$

Отсюда следует, что

$$u(t,x)=\lim_{N\to\infty}\sum_{i=1}^{N}\left(1-\frac{i-1}{N}\right)a_i(t)\,b_i(x)=\lim_{N\to\infty}\sum_{i=1}^{N}\left(1-\frac{i-1}{N}\right)b_i(x)\Bigl[w_i(t)+$$

$$+\int\limits_0^t\int\limits_0^l f\left(s,y,\lim_{N\to\infty}\sum_{j=1}^{N}\Bigl(1-\frac{j-1}{N}\Bigr)a_j(s)\,b_j(y)\right)G_i(t,s)\,b_i(y)\,dyds\Bigr].$$

Теорема 1.1. *Пусть выполняются следующие условия:*

1. $\lambda_i^4\mu^2-4\lambda_i^2\nu-4<0$;

2. Функция $f\,(t,x,u(t,x))$ *при фиксированном* $t\in D_T$ *непрерывна по* $(t,x)\in D_l\times R$ *и удовлетворяет условию Гельдера по* x ;

3. $\|f\,(t,x,u_0(t,x))\|_{C(D)}\le g(t)<\infty$;

4. $f(t,x,u)\in Lip\{g(t)_{|u}\}$, *где* $0<\int\limits_0^t g(s)ds<\infty$;

5. $u_0(t,x)\in C^1(D)$, *где* $u_0(t,x)=\lim_{N\to\infty}\sum\limits_{i=1}^{N}\left(1-\dfrac{i-1}{N}\right)w_i(t)\,b_i(x)$.

Тогда уравнение

$$u(t,x) = u_0(t,x) + \int\limits_0^t \lim_{N\to\infty} \sum_{i=1}^N \left(1 - \frac{i-1}{N}\right) f_i(u)\, G_i(t,s)\, b_i(x)\, ds, \tag{1.5}$$

где $f_i(u) = \int\limits_0^l f\left(t, y, u(t,y)\right) b_i(y)\, dy$ *, имеет единственное решение в классе* $C^1(D)$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Если $u(t,y) \in C(D)$, то

$$\left| \sum_{i=1}^N \left[\int\limits_0^l \left(1 - \frac{i-1}{N}\right) f\left(t, y, u_0(t,y)\right) b_i(y)\, dy \right] b_i(x) \right| \; le \max_x \left| f\left(t, y, u_0(t,y)\right) \right| \leq g(t)$$

и

$$\lim_{N\to\infty} \sum_{i=1}^N \left[\int\limits_0^l \left(1 - \frac{i-1}{N}\right) f\left(t, y, u_0(t,y)\right) b_i(y)\, dy \right] b_i(x) = f\left(t, y, u_0(t,y)\right),$$

причем сходимость равномерна по x для любого $t \in D_T$.

Так как функция $f\left(t, x, u(t,x)\right)$ удовлетворяет условию Гельдера, её частичные суммы равномерно ограничены:

$$\left| \sum_{i=1}^N f_i(u)\, b_i(x) \right| \leq \delta_1 \left\| f(u) \right\|_C.$$

где $0 < \delta_1$ – постоянное число.

Рассмотрим следующий итерационный процесс:

$$u_{k+1}(t,x) = u_0(t,x) + \int\limits_0^t \lim_{N\to\infty} \sum_{i=1}^N \left(1 - \frac{i-1}{N}\right) f_i(u_k)\, G_i(t,s)\, b_i(x)\, ds, \tag{1.6}$$

где $f_i(u_k) = \int\limits_0^l f\left(t, y, u_k(t,y)\right) b_i(y)\, dy,\ k = 0, 1, 2, \ldots$.

Применение преобразования Абеля к правой части (1.6) дает

$$\left\| u_1(t,x) - u_0(t,x) \right\|_{C(D)} \leq \left| \int\limits_0^t \lim_{N\to\infty} \sum_{i=1}^N \left(1 - \frac{i-1}{N}\right) f_i(u_0)\, G_i(t,s)\, b_i(x)\, ds \right| \leq$$

$$\leq \delta_1 \int\limits_0^t \left\| f_i(u_0) \right\|_{C(D)} \cdot \left| G_i(t,s) \right| ds \leq \delta_1\, \delta_2 \int\limits_0^t g(s)\, ds, \tag{1.7}$$

где $\delta_2 = \max_{(t,s)} \left| G_i(t,s) \right|$.

В силу второго условия теоремы, для произвольного натурального числа $k \geq 2$, справедлива оценка

$$\left\| u_{k+1}(t,x) - u_k(t,x) \right\|_{C(D)} \leq \delta_1\, \delta_2 \int\limits_0^t \left\| f\Big(s, x, u_k(s,x)\Big) - f\Big(s, x, u_{k-1}(s,x)\Big) \right\|_{C(D)} ds \leq$$

$$\leq \delta_1\,\delta_2 \int\limits_0^t g(s)\,\|u_k(s,x)-u_{k-1}(s,x)\|_{C(D)}ds \leq \frac{1}{(k+1)!}\left[\delta_1\,\delta_2 \int\limits_0^t g(s)\,ds\right]^{k+1}. \tag{1.8}$$

Из (1.7) и (1.8) следует равномерная сходимость при $k\to\infty$ последовательности функций $\Big\{u_k(t,x)\Big\}_{k=1}^{\infty}$ к функции $u(t,x)$, которая является решением уравнения (1.5). Единственность решения уравнения (1.5) следует из оценки

$$\|u(t,x)-\vartheta(t,x)\|_{C(D)} \leq \delta_1\,\delta_2 \int\limits_0^t g(s)\,\|u(s,x)-\vartheta(s,x)\|_{C(D)}ds, \tag{1.9}$$

если предположить, что уравнение (1.5) имеет два решения $u(t,x)$ и $\vartheta(t,x)$ в области D и применить к (1.9) неравенства Гронуолла-Беллмана.

Список литературы

1. Гордезиани Д. Г., Авалашвили Г. А., "Решения нелокальных задач для одномерных колебаний среды", *Матем. моделир.*, **12**:1 (2000), 94–103.
2. Дмитриев В. Б., "Нелокальная задача с интегральными условиями для волнового уравнения", *Вестник СамГУ. Естественнонаучная серия*, 2006, №2(42), 15–27.
3. Ладыженская О. А., Солонников В. А., Уральцева Н. Н., *Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа*, Наука, М., 1967, 736 с.
4. Пулькина Л. С., "Смешанная задача с интегральным условием для гиперболического уравнения", *Мат. заметки*, **74**:3 (2003), 435–445.
5. Самарский А. А., "О некоторых проблемах теории диффренциальных уравнений", *Дифференц. уравн.*, **16**:11 (1980), 1925–1935.
6. Соболев С. Л., *Некоторые применения функционального анализа в математической физике*, Наука, М., 1988, 336 с.
7. Алгазин С. Д., Кийко И. А., *Флаттер пластин и оболочек*, Наука, М., 2006, 248 с.

On weak solvability of mixed value problem for nonlinear pseudo hyperbolic equation.

© T. K. Yuldashev[2]

Abstract. In this article it is proved the theorem about the weak generalized solvability of mixed value problem for nonlinear partial pseudohyperbolic differential equations of the fifth order. By the method of separation variables the countable system of nonlinear integral equation is obtained. The successive approximations method is used. Convergence of obtained series is proved.

Key Words: weak solvability, integral identity, system of nonlinear equations, method of successive approximations.

[2] Associate professor of Higher Mathematics Chair, M. F. Reshetnev Siberian State Aerospace University, Krasnoyarsk; tursunbay@rambler.ru.

Краткие сообщения

УДК 517.9

О связи между рекуррентными функциями и хаотичностью

© **В. И. Зубов**[1]**, И. В. Зубов**[2]

Аннотация. В статье устанавливается связь между рекуррентными функциями и хаотичностью, понимаемой в вероятностном смысле. Указывается на метод описания хаотических движений в динамике рекуррентными функциями.

Ключевые слова: Движение, колебание, замкнутая кривая, минимальное множество, положение равновесия

1. Введение

Любая последовательность чисел, порождаемая линейной конгруэнтной последовательностью, может быть интерпретирована как последовательность значений в целочисленных точках некоторой рекуррентной функции $\varphi(t)$ из класса H_R^N.

Линейная конгруэнтная последовательность может и не давать равномерно распределенных случайных чисел, и, кроме того, наблюдаемые значения могут не удовлетворять статистическим тестам "на случайность поэтому для выработки случайных чисел используются специально выбранные константы a, c, m. В [1] указаны условия, налагаемые на эти параметры линейной конгруэнтной последовательности, при выполнении которых получаемыпоследовательности удовлетворяют налагаемым требованиям.

2. Природа линейной конгруэнтной последовательности

Введем определение рекуррентной функции в положительном направлении.

Определение 2.1. *Функция $f(t)$, заданная и непрерывная при $t \in (-\infty, +\infty)$ называется рекуррентной в положительном направлении, если для каждого $\varepsilon > 0$ можно указать число L_ε такое, что в каждом интервале действительной оси $(\alpha, \alpha + L_\varepsilon)$, где $\alpha \in (\alpha_0, +\infty)$, для любого действительного числа существует число τ_t, удовлетворяющее условию*

$$|f(t+\tau_t) - f(t)| < \varepsilon.$$

Подобное определение можно ввести для функций, рекуррентных в отрицательном направлении.

Теорема 2.1. *Функция $\varphi(t)$ является рекуррентной в положительном направлении, тогда и функция $f(t)$ является рекуррентной в положительном направлении.*

[1] Аспирант кафедры теории управления, СПбГУ, г. Санкт-Петербург; ddemidova@mail.ru

[2] Профессор кафедры теории управления, СПбГУ, г. Санкт-Петербург; ddemidova@mail.ru

Это утверждение весьма важно, так как оно устанавливает природу линейной конгруэнтной последовательности. Использование алгоритма для выработки случайных чисел было предложено американским математиком Д.Х. Лемером в 1948 г. [1]. Здесь весьма уместным кажется упомянуть теорему Анри Вейля (H.Weyl) 1916 г.

Критерий Вейля решает вопрос о равномерном распределении по модулю 1 бесконечной последовательности $\{x_n\}$. По этому критерию последовательность $\{x_n\}$ распределена равномерно по модулю 1 тогда и только тогда, когда для всех целых $m \neq 0$ выполнено соотношение

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} exp(2\pi i m x_n) = 0.$$

Таким образом, мы связали природу линейной конгруэнтной последовательности с рекуррентными функциями. Эти функции образуют новый класс рекуррентных функций в дополнение к классам, расссмотренным [1].

Рассмотрим пространство $H^N(i_1(t), \ldots, j_N(t))$ рекуррентных в положительном направлении функций с порождающей системой функций

$$j_j = a_j e^t + b_j, \quad j = 1, \ldots, N.$$

Это пространство будем обозначать H_R^N.

Т е о р е м а 2.2. *Пространство* H_R^N *полное в смысле равномерной сходимости на всей действительной полуоси* $(0, +\infty)$ *и линейное.*

Установленная нами выше связь между рекуррентными функциями и хаотичностью, понимаемой в вероятностном смысле, указывает на то, что и хаотические движения в динамике описываются рекуррентными функциями. Такими свойствами обладают движения, содержащиеся в множестве центральных движений [1]. Биркгоф открыл, что рекуррентные движения являются наиболее общим видом колебаний и характерны для того наиболее распространенного случая, когда минимальное множество не состоит из единственной замкнутой кривой или положения равновесия.

В этом, наиболее общем случае минимальное множество состоит из бесконечного неисчислимого числа кривых движения, причем в окрестности любой точки кривой содержатся точки, принадлежащие другим кривым.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (пр. № 10-08-00624).

Список литературы

1. С. В. Зубов, М. В. Стрекопытова, *Анализ равновесных движений и расчетная устойчивость*, СПбГУ, СПб, 2010,, 446 с.

The connection between the recurrent features and chaotic

© **V. I. Zubov**[3], **I. V. Zubov**[4]

Abstract. In aeticle is install the relation between recurrent functions and origin reminding in probable since. Is indicates on method of describing origin motions in dynamics trecurrent functions.

Key Words: Motion, oscillation, exclusive curve, minimal multitude, position of equilibrium.

[3] Post-graduate, SPbGU, town Saint-Petersburg; ddemidova@mail.ru
[4] Professor, SPbGU, town Saint-Petersburg; ddemidova@mail.ru

УДК 517.9

Об уходящем типе движений

© **А. Ф. Зубова**[1]**, С. А. Стрекопытов**[2]**, М. В. Стрекопытова**[3]

Аннотация. Целью настоящей статьи будет являться изучение первого типа движений (уходящих), являющегося малоизученной областью качественной теории.

Ключевые слова: Расстояние, метрика, динамическая система, аргумент, метрическое пространство

Рассмотрим динамическую систему $f(p,t)$, заданную на топологическом произведении R метрических пространств R_1, R_2. Метрика ρ пространства R индуцируется метриками ρ_1, ρ_2 пространства R_1, R_2: $\rho(p,q) = \rho_1(p_1,q_1) + \rho_2(p_2,q_2)$, где $(p,q) \in R$, $(p_1,q_1) \in R_1$, $(p_2,q_2) \in R_2$. Отметим, что метрики ρ_1, ρ_2 могут индуцировать метрику ρ и другим способом.

Поведение динамической системы $f(p,t) = f(p_1,p_2,t)$ полностью определяется поведением ее проекций $f_1(p_1,p_2,t)$, $f_2(p_1,p_2,t)$ на пространства R_1, R_2.

Определение 1.2. *Множество R элементов p, природа которых безразлична, называется метрическим пространством, если любым двум элементам $p,q \in R$ соответствует неотрицательное число $\rho(p,q)$, называемое расстоянием или метрикой и удовлетворяющее условиям* [1]*:*

1) $\rho(p,q) = 0$ лишь при $p = q$;
2) $\rho(p,q) = \rho(q,p)$;
3) $\rho(p,q) \le \rho(p,z) + \rho(z,q)$ для любого $z \in R$.

Элементы метрического пространства называются *точками.*

Определение 1.3. *Динамической системой $f(p,t)$ в метрическом пространстве R будем называть однопараметрическую группу преобразований R на себя, удовлетворяющую условиям:*

1) $f(p,0) = p$;
2) $f(p,t)$ непрерывна по совокупности своих аргументов;
3) $f(f(p,t_2),t_1) = f(p,t_1+t_2)$ для любого $p \in R$ для всех t_1, t_2.

Определение 1.4. *Функцию $f(p,t)$ при фиксированном p будем называть движением. Множество всех точек движения $\{f(p,t) : -\infty < t < +\infty\}$ будем называть траекторией движения и обозначать $f(p,I)$. Аналогично множества $\{f(p,t) : 0 \le t < +\infty\}$, $\{f(p,t) : -\infty < t \le 0\}$ будем называть соотвественно положительной и отрицательной траекториями и обозначать $f(p,I^+)$ и $f(p,I^-)$.*

Конечной дугой траектории временной длины $T^2 - T^1$, где $T^2 \ge T^1$, будем называть множество точек $\{f(p,t) : T^2 \le t \le T^1\}$.

Определение 1.5. *Точка q называется $\omega(\alpha)$ - предельной точкой движения $f(p,t)$, если существует последовательность чисел $t_n \to +\infty$ $(t_n \to -\infty)$ такая, что $f(p,t_n) \underset{n\to\infty}{\to} q$.*

[1] Профессор кафедры теории управления, СПбГУ, г. Санкт-Петербург; ddemidova@mail.ru
[2] Доцент кафедры теории управления, СПбГУ, г. Санкт-Петербург; ddemidova@mail.ru
[3] Доцент кафедры теории управления, СПбГУ, г. Санкт-Петербург; ddemidova@mail.ru

Множество всех ω- предельных точек движения $f(p,t)$ будем обозначать Ω_p, множество всех α-предельных - A_p.

Определение 1.6. *Множество $M \subset R$ называется инвариантным по отношению к динамической системе $f(p,t)$, если оно состоит из траекторий этой динамической системы, т.е. из $p \in M$ следует $f(p,t) \subset M$.*

Свойства множеств Ω_p, A_p изучены в литературе [1].

Пусть выполнены следующие условия.

1. Существует последовательность $\{t_n\}$ такая, что $t_n \to \infty$ при $n \to \infty$ и $f_1(p_1,p_2,t_n) \to q_1 \in R_1$.

2. Последовательность $f_2(p_1,p_2,n)$, $n = 1,2,\ldots$, не имеет предельных точек.

Точку q_1 уместно назвать ω - предельной точкой движения $f_1(p_1,p_2,t)$. Отметим, что к функции $f_1(p_1,p_2,t)$ термин "движение"мы применяем не в строгом смысле. Множество ω - предельных точек движения $f_1(p_1,p_2,t)$ обозначим Ω_{f_1}. Покажем, что движение, удовлетворяющее условиям 1, 2, является уходящим.

Определение 1.7. *Назовем уходящее движение $f(p,t)$, удовлетворяющее условиям 1,2, положительно устойчивым по Пуассону в расширенном смысле по отношению к пространству R_1, если существует хотя бы одна ω - предельная точка движения $f(p_1,p_2,t)$, принадлежащая самому движению, т.е. существует момент времени t^* такой, что $f_1(p_1,p_2,t^*) = q_1$, $q_1 \in \Omega_{f_1}$.*

Аналогичные определения можно ввести и при $t \to -\infty$.

Среди устойчивых по Пуассону в расширенном смысле движений выделим особый вид движений: пусть $f_1(q_1,p_2,t) \equiv q_1$, тогда движение $f(p,t)$ назовем равновесным. Обозначим через $P(q_1)$ множество точек $p_2 \in R_2$, для которых движение $f(p,t)$ является равновесным

$$P(q_1) = \{p_2 \in R_2 : \ f_1(q_1,p_2,t) \equiv q_1\}.$$

Очевидно, что $P(q_1)$ либо пусто, либо состоит из бесконечного множества точек. Особый интерес представляет случай $P(q_1) = R_2$.

Теорема 1.3. *Множество точек $Q = \{q \times p(q_1)\}$ есть замкнутое множество.*

Множество $Q = \{q \times p(q_1)\}$ является инвариантным множеством динамической системы $f(p,t)$. Действительно, из $p \in Q$ следует, что $f_1(p,t) \equiv q_1$, $f_2(p,I) \subset P(q_1)$, поэтому для всех $t \geq 0$ имеет место $f(p,t) \in Q$.

Для изучения свойств уходящих движений расширим определение инвариантности.

Определение 1.8. *Множество $M \subset R = R_1 \times R_2$ назовем R_1 - инвариантным по отношению к динамической системе $f(p,t) = (f_1(p_1,p_2,t), f_2(p_1,p_2,t))$, если из $p \in M$ следует $f_1(p,t) \in M_{R_1}$ $\forall t \geq 0$, $M_{R_1} = \{p_1 \in R_1 : \exists p_2 \in R_2, (p_1,p_2) \in M\}$.*

Обозначим $M_{R_1} = M \bigcap R_1$. В качестве примера R_1- инвариантного множества в R можно привести множество $Q = \{q \times p(q_1)\}$. Действительно, из $p \in Q$ следует $f_1(p,t) \equiv q_1$, $f_1(p,I) \subset Q_{R_1} = q_1$. Таким образом, верна следующая теорема.

Теорема 1.4. *Множество точек $Q = \{q \times p(q_1)\}$ есть инвариантное замкнутое множество.*

Отметим, что из R_1-инвариантности не следует инвариантность, а все инвариантные множества являются и R_1 - инвариантными.

О п р е д е л е н и е 1.9. *Движение* $f(p,t) = (f_1(p_1,p_2,t), f_2(p_1,p_2,t))$ *в* $R = R_1 \times R_2$ *назовем устойчивым по Лагранжу в расширенном смысле по отношению к пространству* R_1, *если траектория* $f_1(p,I)$ *целиком лежит в ограниченной области* $G \subset R_1$.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (пр. № 10-08-00624)

Список литературы

1. А. Ф. Зубова, *Математические методы моделирования промышленных процессов и технологий*, СПбГУ, СПб, 2004,, 472 с.

The passing type movements

© **A. F. Zubova**[4], **S. A. Strecopitov**[5], **M. V. Strecopitova**[6]

Abstract. The arm this article is appears learning first type motions (going to) appearing small learning region of qualitative theory

Key Words: Distance, metric, dynamical system, argument, metrical space.

[4] Professor, SPbGU, town Saint-Petersburg; ddemidova@mail.ru
[5] Docent, SPbGU, town Saint-Petersburg; ddemidova@mail.ru
[6] Docent, SPbGU, town Saint-Petersburg; ddemidova@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.

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 $\textrm{Г}_i$, $\textit{Д}_i$ в текст статьи необходимо набрать команды **\textrm{Г}_i**, **\textit{Д}_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**. *Список цитируемой литературы должен быть оформлен в формате AMSBIB. Подробности смотрите в прилагаемом файле amsbib.pdf. Для правильной работы данного стиля оформления литературы необходимо использовать стилевой файл svmobib.sty (прилагается).*

Список литературы на английском языке оформлять не нужно.

Список литературы на русском языке оформляется в виде последовательности команд **\RBibitem{метка для ссылки на источник}**.

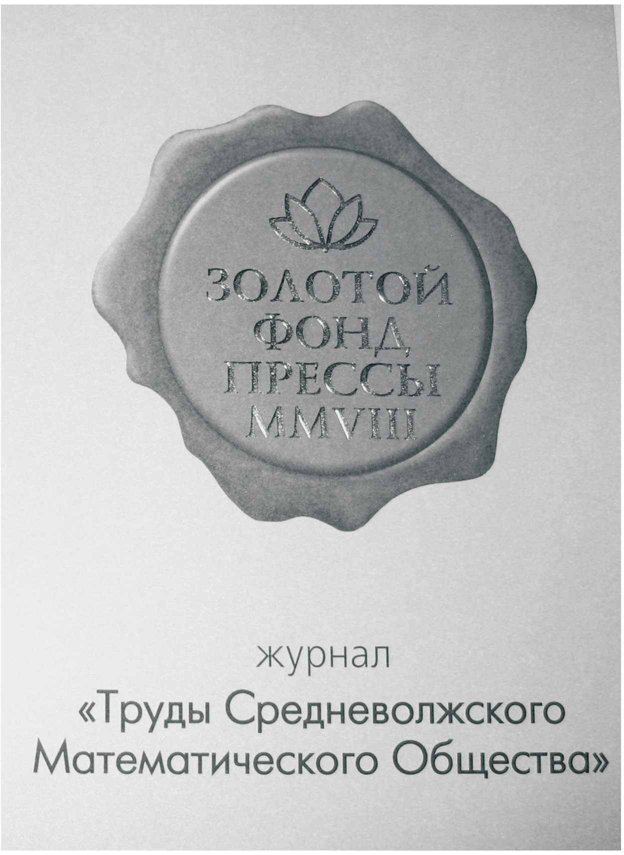
Для приведенного выше примера в качестве метки для пункта 7 в списке литературы нужно использовать строку 'ivanovb7'. Для ссылок на элементы списка литературы необходимо использовать команду **\cite** или **\pgcite** (параметры см. в преамбуле).

Метки всех объектов статьи должны быть уникальными.

Компиляция журнала производится при помощи MiKTEX 2.9, дистрибутив которого можно получить на сайте *http://www.miktex.org*.

Алфавитный указатель

В 2008 г. на XVI Международной профессиональной выставке «Пресса» журнал «Труды Средневолжского математического общества» удостоен Знака отличия «Золотой фонд прессы-2008» в номинации «Наука, техника, научно-популярная пресса».



С 2009 года журнал носит название «Журнал Средневолжского математического общества».

Уважаемые читатели и подписчики!

Подписка на журнал «Журнал Средневолжского математического общества» осуществляется через отделения почтовой связи «Почта России» на всей территории Российской Федерации.

Подписной индекс журнала в каталоге Российской прессы «Почта России» – 38278.

Для заметок