

ISSN 2079 – 6900

ЖУРНАЛ СРЕДНЕВОЛЖСКОГО МАТЕМАТИЧЕСКОГО ОБЩЕСТВА

Том 14, № 3



2012

СРЕДНЕВОЛЖСКОЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОБЩЕСТВО

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
МОРДОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ Н. П. ОГАРЁВА

Журнал Средневолжского математического общества

ТОМ 14, № 3

Издается с декабря 1998 года
Выходит четыре раза в год

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

САРАНСК

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, № 3

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

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

Г. И. Казакевич, Л. В. Ключкова, Ю. А. Повещенко, В. Ф. Тишкин	
Математическое моделирование автоколебательных режимов формирования месторождений нефти и газа	7
1. Введение	7
2. Математическая модель движения флюидов	7
3. Результаты вычислительных экспериментов, проведенных на основании эмпирических данных по ряду регионов	8
4. Заключение	9

И. В. Бойков, В. А. Рязанцев	
Критерии устойчивости решений дифференциальных уравнений в частных производных параболического типа	12
1. Введение	12
2. Устойчивость решения линейного n -мерного параболического уравнения ..	13
3. Устойчивость решения системы параболических уравнений	17

В СРЕДНЕВОЛЖСКОМ МАТЕМАТИЧЕСКОМ ОБЩЕСТВЕ

С. Н. Алексеенко, Л. Е. Платонова	
Дифференциальное уравнение в частных производных первого порядка общего вида с начальными данными в декартовых координатах на линии бесконечной длины	21

В. А. Атряхин, П. А. Шаманаев	
К вопросу об использовании систем дифференциальных уравнений с запаздыванием в прогнозировании динамики социально-экономических процессов	29
1. Введение	29
2. Описание алгоритмов решения системы дифференциальных уравнений с отклоняющимся аргументом	30
3. Численный эксперимент	32

И. В. Ахметов, И. М. Губайдуллин	
Построение кинетических моделей химических реакций на основе многоядерных систем	38
1. Введение	38
2. Математическое описание	38
3. Алгоритм распараллеливания	39
4. Результаты вычислительного эксперимента	40

А. В. Балаев, Д. А. Дель Торо Фонсека

Построение кинетической модели гидрокрекинга тяжелых неф- тяных остатков на основе групповых компонентов	43
---	----

Д. В. Берзина, С. А. Мустафина

Учет дезактивации катализатора при построении математическо- го описания химического процесса	48
1. Введение	48
2. Учет дезактивации катализатора на примере процесса дегидрирования цик- логексана	49

Е. В. Жужома, Н. В. Исаенкова

О внутренней динамике диффеоморфизмов Смейла-Виеториса . .	52
--	----

А. Р. Кабирова

Прогнозирование осложнений при бурении нефтегазовых сква- жин с использованием нейронных сетей	59
1. Введение	59
2. Используемые методы решения	60
3. Распараллеливание вычислительного процесса.	61
4. Заключение	62

Е. А. Лазарев

Адаптация метода ветвей и границ для решения многокритери- альных задач структурной оптимизации	64
1. Введение	64
2. Математическая модель	64
3. Постановка задачи	65
4. Адаптированный метод ветвей и границ	66
4.1. Описание метода	66
4.2. Анализ алгоритма	67
4.3. Пример	68
5. Заключение	73

О.В. Починка, А.А. Романов

Бифуркация удвоения периода на простой дуге, соединяющей диффеоморфизмы Пикстона	74
1. Введение	74
2. Формулировка результатов	75
3. Построение простой дуги между диффеоморфизмом $f \in \mathcal{P}_-$ и некоторым диффеоморфизмом из класса J	77

Е. В. Степашина, С. А. Мустафина

Поиск оптимального температурного режима процесса димери- зации α -метилстирола на основе генетических алгоритмов	80
1. Введение	80
2. Постановка задачи	81

3.	Вычислительный эксперимент	82
4.	Результаты	84

Е. А. Черноиванова

Решение задачи Коши для дифференциальных уравнений электрических цепей численным методом	86
--	----

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Ю. Б. Малыханов, И. Н. Еремкин, М. В. Горшунов, С. В. Евсеев, Р. М. Чадин

Высокоточный расчет энергии атомов в приближении Рутана—Хартри—Фока	90
1. Введение	90
2. Применение методов минимизации для решения уравнения Рутана—Хартри—Фока	91
3. Результаты и выводы	91

С. В. Зубов

Условия возникновения хаотического движения в динамической системе	94
1. Введение	94
2. Построение в аналитическом виде функции	94

Правила оформления рукописей для публикации в журнале «Журнал СВМО»	96
---	----

Алфавитный указатель	98
--------------------------------	----

ОТ РЕДАКЦИИ

Третий номер 14-го тома содержит работы, в основном, участников объединённого семинара Средневолжского математического общества и кафедры прикладной математики Мордовского государственного университета им. Н. П. Огарёва. Результаты, содержащиеся в этих работах, развивают теоретические положения и содержат решения задач, обсуждавшихся на X конференции «Дифференциальные уравнения и их приложения в математическом моделировании» с участием зарубежных ученых (г. Саранск, 27 – 29 августа 2012 года), проводившейся при поддержке РФФИ, грант № 12-01-06069-г.

Редакция журнала искренне желает авторам крепкого здоровья и творческих успехов!

УДК 51.7:532.546

Математическое моделирование автоколебательных режимов формирования месторождений нефти и газа

© Г. И. Казакевич¹, Л. В. Клочкова², Ю. А. Повещенко³, В.Ф. Тишкин⁴

Аннотация. Численное моделирование движения флюидов при формировании залежей углеводородов позволило исследовать сложные автоколебательные режимы этого процесса. В данной работе излагаются результаты вычислительных экспериментов для этих режимов, проведенных на основании эмпирических данных по ряду регионов, и сделанное на этом основании заключение об их характерных свойствах.

Ключевые слова: математическое моделирование, автоколебательные процессы, формирование залежей углеводородов.

1. Введение

Численное моделирование движения флюидов при формировании залежей углеводородов позволило выявить сложные автоколебательные режимы этого процесса ([1]–[3]). В данной работе излагаются результаты дальнейшего вычислительного анализа этих режимов, проведенного для ряда регионов, и сделанное на этом основании выявление их характерных свойств. Согласно современным представлениям, формирование месторождений углеводородов происходит в результате взаимодействия ряда процессов, каждый из которых обладает своим пространственно–временным масштабом. Одним из таких процессов является вторичная миграция нефти и газа, то есть их фильтрация в пластах, которая — при наличии соответствующих геологических условий — может приводить к образованию месторождений.

2. Математическая модель движения флюидов

Для описания движения жидкостей и газов в пористой среде в работе использованы уравнения фильтрации в предположении выполнения закона Дарси, не смешиваемости фаз (например, газ–вода), изотермичности и при пренебрежении капиллярными силами. В двухфазном случае эти уравнения имеют вид [4]:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}(m\rho_w S_w) &= \operatorname{div} \left[(kK_{rw}\rho_w/\mu_w) \left(\operatorname{grad} P - g\rho_w \vec{k} \right) \right] - q_w \\ \frac{\partial}{\partial t}(m\rho_g(1 - S_w)) &= \operatorname{div} \left[(kK_{rg}\rho_g/\mu_g) \left(\operatorname{grad} P - g\rho_g \vec{k} \right) \right] - q_g.\end{aligned}$$

Здесь $\vec{r}$ — радиус–вектор, g — ускорение силы тяжести, $\vec{k}$ — орт, направленный вертикально вниз, P — давление, S_w — насыщенность водой, q_w и q_g — массовые расходы

¹ Старший научный сотрудник Института океанологии им. П.П. Ширшова РАН, г. Москва; gkazakevich@yandex.ru.

² Старший научный сотрудник Института прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН, г. Москва; klud@imamod.ru.

³ Ведущий научный сотрудник Института прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН, г. Москва; poveshchenko@keldysh.ru.

⁴ Заместитель директора Института прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН, г. Москва; tishkin@imamod.ru.

воды и газа на единицу объема пласта в единицу времени, $k(\vec{r})$ — тензор абсолютной проницаемости, $K_{rw}(S_W)$ и $K_{rg}(S_W)$ — фазовые проницаемости воды и газа соответственно, $\mu_w(P)$, $\mu_g(P)$ — динамические вязкости флюидов, $m(\vec{r}, P)$ — пористость пласта, $\rho_w(P)$, $\rho_g(P)$ — плотности флюидов.

Это сложная система нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных. По одной из переменных — давлению — она обладает свойствами, близкими к уравнениям параболического типа, по другой — насыщенности — гиперболическими свойствами, в том числе — образованием поверхностей разрыва — скачков насыщенности [5].

Область, в которой решается система, обычно обладает высокой степенью неоднородности, состоит из слоев с различными коллекторными свойствами (пористостью, проницаемостью), разрывными нарушениями, литологическими неоднородностями и другими особенностями, усложняющими как сами фильтрационные процессы, так и их численное моделирование. Для изучения подобных задач большие возможности предоставляет метод опорных операторов, позволяющий использовать неструктурированную сетку с ячейками, размеры которых могут отличаться на несколько порядков [6]. Применение его к задачам фильтрации было начато в работах [7],[8].

При численном исследовании этим методом выяснилось, что в задачах, соответствующих процессам миграции углеводородов при образовании месторождений, могут возникать автоколебательные гравитационно-реверсивные режимы. Характерный цикл протекает следующим образом: давление накопившегося газа под плохо проницаемой крышкой в некоторый момент времени может превысить некоторое критическое значение. Тогда происходит прорыв газа, причем, если это критическое давление ниже предела прочности породы, то прорыв происходит не в результате образования трещин, а вследствие быстрого продвижения газа через участок с плохими коллекторными свойствами вследствие фильтрационной неустойчивости. Газ устремляется вверх, давление в данной области падает, возникает депрессионная воронка, что вызывает новый приток газа — до следующего достижения критического давления. В результате неравномерного продвижения газа может произойти защемление части пластовой воды в насыщенной газом области [1] и наоборот — появление довольно крупных насыщенных газом объемов в зонах, не связанных ни с каким типом ловушек. Эти «газовые пузыри» могут возникать, существовать длительное время в пульсирующем режиме, мигрировать и исчезать [9]. В них могут быть заключены достаточно крупные, промышленно значимые запасы газа. А защемленная в насыщенной газом области вода может приводить к осложнениям при бурении скважин, при разработке месторождений, при определении флюидодинамической структуры региона.

3. Результаты вычислительных экспериментов, проведенных на основании эмпирических данных по ряду регионов

В процессе расчета автоколебательных режимов миграции выяснилось, что в фильтрационном потоке возникают зоны резких изменений свойств течения. Это могут быть области повышенной концентрации углеводородов, соответствующие месторождениям, зоны прорыва газа в виде струйных потоков с достаточно небольшим поперечным сечением струи. Поэтому для более детального исследования необходимо проводить повторные расчеты с измельчением сетки именно в этих областях. Программы автоматического локального измельчения сетки также включены в разработанную вычислительную систему.

Математическое моделирование вторичной миграции углеводородов было проведено для целого ряда регионов различного происхождения и геологического строения. Основные свойства автоколебательных процессов были примерно одинаковы, но численное экс-

периментирование с варьированием ряда параметров позволило оценить влияние геологических особенностей региона и скоростей поступления углеводородов. История развития многих осадочных бассейнов приводит к образованию в некоторых участках зон с очень высокой проницаемостью, трещиноватостью. Например, в Лено-Вилюйском регионе — это зона поддвига литосферных плит. В других регионах подобные зоны могут быть связаны со сдвиговыми нарушениями разных типов, солянокупольной тектоникой и т.д. Расчеты показали, что при достаточно высоких темпах поступления углеводородов в регион интенсивность вертикальных течений будет намного превосходить горизонтальные, критические давления будут достигаться достаточно быстро — и колебательный характер процесса будет резко выраженным. При более медленном поступлении углеводородов усилится роль участков с повышенной проницаемостью, куда начнет устремляться значительная часть газа. В результате такого перераспределения фильтрационных потоков критическое давление будет достигаться медленнее, и зависимость периода колебаний от скорости поступления углеводородов будет иметь нелинейный характер и представляться выпуклой возрастающей функцией. А при достаточно медленных процессах возможен и уход всего газа через высокопроницаемые участки.

Согласно современным представлениям процесс генерации углеводородов и их поступления в осадочные бассейны также имеет автоколебательный характер. Механизмы этих колебаний сейчас дискутируются, но общее представление таково: есть периоды медленно-го поступления углеводородов в осадочный бассейн, а есть периоды быстрого их прорыва. Таким образом, для одного и того же региона в зависимости от того, на какой стадии процесса первичной миграции он находится, будет меняться и характер вторичной миграции, периоды колебаний, направление движения углеводородов. Следовательно, сложный нелинейный автоколебательный режим движения флюидов в осадочном пласте является важным элементом общей системы процессов массо- и теплообмена в коре и верхней мантии.

Проведение серии расчетов фильтрации в данном регионе при различных скоростях поступления углеводородов дает возможность ретроспективного анализа поведения флюидодинамической системы в прошлом, а также получение прогнозных оценок с учетом характерных периодов циклов разного масштаба, связанных с тектоническими, гидродинамическими, геохимическими и другими факторами. Проведение подобных расчетов может позволить построить бифуркационную диаграмму системы, определяющую области устойчивости и неустойчивости, смену режима течения. А сравнение с имеющейся геологической, геофизической, геохимической, промысловой информацией поможет определить, на каком этапе цикла находится исследуемый регион, где можно искать промышленные скопления газа; где могут находиться заземленные водонасыщенные области. Оно также позволит спрогнозировать опасность возникновения неустойчивости и резкой перестройки структуры флюидодинамической системы, способных привести к крупным выбросам углеводородов — или, наоборот — их уходу в нижележащие горизонты, к катастрофическому обводнению ряда скважин и т.д. — т.е. к тяжёлым экологическим и экономическим последствиям. Чтобы этого избежать, необходимо в подобных регионах проводить проектирование разработки месторождений углеводородов с учётом не стационарности фонового гидродинамического режима.

4. Заключение

Дальнейшее исследование нелинейных режимов миграции углеводородов должно включать учет капиллярных эффектов, растворенного газа, температурных эффектов,

многофазности, многокомпонентности, физико-химических превращений и т.д. Разработанные численные схемы на базе метода опорных операторов позволяют провести исследование этих явлений в рамках единой вычислительной системы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Казакевич Г.И., Минервина Е.А., Повещенко Ю.А., “Миграция углеводородов в процессе формирования месторождений: численное моделирование нелинейных эффектов”, *Докл. РАН.*, **383**:1 (2002), 103–105.
2. Казакевич Г.И., Повещенко Ю.А., “Автоколебательные режимы формирования месторождений нефти и газа”, *Эволюция Вселенной и общие законы строения материи.*, Материалы Международной научной конференции (Москва, 2003), 57–59.
3. Ключкова Л.В., Повещенко Ю.А., Тишкин В.Ф., “Флюидодинамическая модель автоколебательных процессов”, *Журнал Средневолжского математического общества*, **14**:2 (2012).
4. Азиз Х., Сеттари Э., *Математическое моделирование пластовых систем*, Недра, М., 1982, 407 с.
5. Баренблатт Г.И., Ентов В.М., Рыжик В.М., *Движение жидкостей и газов в природных пластах*, Недра, М., 1984.
6. Самарский А.А., Колдоба А.В., Повещенко Ю.А., Тишкин В.Ф., Фаворский А.П., *Разностные схемы на нерегулярных сетках*, Минск, 1996, 273 с.
7. Дмитриевский А.Н., Лобковский Л.И., Казакевич Г.И., Повещенко Ю.А. и др., “Численное моделирование движения флюидов в процессе формирования залежей углеводородов на примере Предверхооянского прогиба”, *Геология, геофизика и разработка нефтяных месторождений*, 1995, № 7, 2–6.
8. Казакевич Г.И., Лобковский Л.И., Пергамент А.Х., Повещенко Ю.А. и др., “Математическое моделирование процессов фильтрации углеводородов в осадочных бассейнах”, *ДАН*, **352**:4 (1997), 527–531.
9. Казакевич Г.И., Повещенко Ю.А., “Нелинейные эффекты двухфазной фильтрации при образовании месторождений углеводородов”, *Материалы Международной конференции "Современное состояние наук о Земле посвященной памяти В.Е. Хаина* (Москва), 2011, 802.

Mathematical modelling of self-oscillatory oil and gas fields formation modes

© G.I. Kazakevich⁵, L.V Klochkova⁶, J.A. Poveschenko⁷, V.F. Tishkin⁸

Abstract. Numerical modeling of fluids movement at formation of hydrocarbons deposits allowed study composite self-oscillatory modes of this process. In this work results of computing experiments for these modes which have been carried out on the basis of empirical data on a number of regions, and made on this basis the conclusion about their characteristic properties are stated.

Key Words: mathematical modeling, self-oscillating, the formation of deposits hydrocarbons.

⁵ Senior Researcher of the Institute of oceanology by name P.P.Shirshov of RAS, Moscow; gkazakevich@yandex.ru.

⁶ Senior Researcher of the Institute of applied mathematics by name M.V.Keldysh of RAS, Moscow; klud@imamod.ru.

⁷ Senior Researcher Officer of the Institute of applied mathematics by name M.V.Keldysh of RAS, Moscow; poveschenko@keldysh.ru.

⁸ Deputy Director of the Institute of applied mathematics by name M.V.Keldysh of RAS, Moscow; tishkin@imamod.ru.

УДК 517.9

Критерии устойчивости решений дифференциальных уравнений в частных производных параболического типа

© И. В. Бойков¹, В. А. Рязанцев²

Аннотация. В работе получены достаточные условия устойчивости решения системы параболических уравнений с коэффициентами, зависящими от времени.

Ключевые слова: уравнения в частных производных, устойчивость тривиального решения, логарифмическая норма.

1. Введение

Проблема устойчивости решений уравнений в частных производных является актуальной как с теоретической точки зрения, так и в связи с большим количеством приложений таких уравнений в естествознании и технике. Этим проблемам посвящена обширная литература, в которой нужно отметить монографии [1], [2] и [3], содержащие большую библиографию, а также обзор [4].

Основным аппаратом исследования устойчивости нелинейных уравнений в частных производных является применение преобразования Фурье и построение обобщенных функционалов Ляпунова. В настоящей работе исследование устойчивости решений систем параболических уравнений проводится методом, основанным на оценках решений операторных уравнений логарифмическими нормами. Логарифмическая норма $\Lambda(A)$ оператора A определяется как [8]

$$\lim_{h \downarrow 0} \frac{\|I + hA\| - 1}{h}$$

Если A – вещественная матрица размерности $n \times n$, то в векторных пространствах элементов $x = (x_1, \dots, x_n)$ логарифмическая норма $\Lambda(A)$ вычисляется по формулам [5], [6]

$$\Lambda(A) = \sup_{j=\overline{1,n}} \left(a_{jj} + \sum_{k=1, k \neq j}^n |a_{jk}| \right) \quad (1.1)$$

с нормами $\|x\| = \max_{k=\overline{1,n}} |x_k|$, $\|A\| = \max_{j=\overline{1,n}} \sum_{k=1}^n |a_{jk}|$, и

$$\Lambda(A) = \sup_{j=\overline{1,n}} \left(a_{jj} + \sum_{k=1, k \neq j}^n |a_{kj}| \right) \quad (1.2)$$

с нормами $\|x\| = \sum_{k=1}^n |x_k|$, $\|A\| = \max_{j=\overline{1,n}} \sum_{k=1}^n |a_{kj}|$.

¹ Заведующий кафедрой высшей и прикладной математики, Пензенский государственный университет, г. Пенза; boikov@puzgu.ru.

² Аспирант кафедры высшей и прикладной математики, Пензенский государственный университет, г. Пенза; ryazantsevv@mail.ru.

В настоящей работе получены достаточные условия устойчивости решений n -мерных параболических уравнений, а также систем параболических уравнений на плоскости, выраженные через логарифмические нормы соответствующих матриц.

2. Устойчивость решения линейного n -мерного параболического уравнения

Рассмотрим задачу Коши для n -мерного параболического уравнения

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sum_{k=1}^n \left(a_k(t) \frac{\partial^2 u}{\partial x_k^2} + a_{n+k}(t) \frac{\partial u}{\partial x_k} \right) + a_{2n+1}(t)u, \quad (2.1)$$

$$u(t_0, x_1, \dots, x_n) = u_0(x_1, x_2, \dots, x_n). \quad (2.2)$$

Исследование устойчивости решения задачи Коши (2.1)-(2.2) будем проводить в банаховом пространстве функций $f(x)$, $x = (x_1, \dots, x_n)$, с нормой

$$\|f\| = \left[\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx_1 \dots dx_n \right]^{1/2}.$$

При каждом фиксированном значении t норма функции $u(t, x)$ определяется формулой

$$\|u(t, x)\| = \left[\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} |u(t, x)|^2 dx_1 \dots dx_n \right]^{1/2}.$$

Введем матрицу

$$C(t, \omega_1, \dots, \omega_n) = \begin{pmatrix} a_{2n+1}(t) - \sum_{k=1}^n a_k(t)\omega_k^2 & - \sum_{k=1}^n a_{n+k}(t)\omega_k \\ \sum_{k=1}^n a_{n+k}(t)\omega_k & a_{2n+1}(t) - \sum_{k=1}^n a_k(t)\omega_k^2 \end{pmatrix},$$

где $-\infty < \omega_i < \infty$, $i = \overline{1, n}$.

Т е о р е м а 2.1. Пусть выполнены условия:

- 1) функции $a_k(t)$ ($k = \overline{1, 2n+1}$) непрерывны по переменной t ;
- 2) при любых фиксированных значениях (t, ω) , где $\omega = (\omega_1, \dots, \omega_n)$, $-\infty < \omega_i < \infty$, $i = \overline{1, n}$, $t \geq t_0$, логарифмическая норма матрицы $C(t, \omega)$, вычисляемая по формуле (1.1), удовлетворяет неравенству

$$\Lambda(C(t, \omega)) < -\alpha(\omega), \quad \alpha(\omega) > 0. \quad (2.3)$$

Тогда тривиальное решение уравнения (2.1) устойчиво.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Будем считать, что решение $u(t, x)$ задачи Коши (2.1)-(2.2) существует при всех $t \geq t_0$ и вместе со своей производной $\partial u / \partial t$ суммируемо с квадратом по пространственным переменным. Пусть функция $u_0(x)$ непрерывна и удовлетворяет неравенству $\|u_0(x)\| \leq \varepsilon_1$.

Для прямого и обратного преобразований Фурье используем следующие обозначения [7]:

$$U(t, \omega) = F u(t, x) = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^{n/2} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} u(t, x) \exp \left(-i \sum_{k=1}^n \omega_k x_k \right) dx_1 \dots dx_n,$$

$$u(t, x) = F^{-1} U(t, \omega) = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^{n/2} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} U(t, \omega) \exp \left(i \sum_{k=1}^n \omega_k x_k \right) d\omega_1 \dots d\omega_n.$$

Применим к задаче (2.1)-(2.2) преобразование Фурье по пространственным переменным, имея в виду [7], что $F \left(\frac{\partial^j u(t, x)}{\partial x_k^j} \right) = (i\omega_k)^j U(t, \omega)$. В результате получаем задачу Коши

$$\frac{\partial U}{\partial t} = - \left(\sum_{k=1}^n a_k(t) \omega_k^2 \right) U + i \left(\sum_{k=1}^n a_{n+k}(t) \omega_k \right) U + a_{2n+1}(t) U, \quad (2.4)$$

$$U(t_0, \omega) = U_0(\omega). \quad (2.5)$$

Справедливо представление $U(t, \omega) = U_1(t, \omega) + iU_2(t, \omega)$, где $U_1(t, \omega), U_2(t, \omega)$ – вещественные функции. Подставив эти представления в задачу (2.4)-(2.5), приходим к задаче

$$\begin{cases} \frac{\partial U_1}{\partial t} = \left(a_{2n+1}(t) - \sum_{k=1}^n a_k(t) \omega_k^2 \right) U_1 - \left(\sum_{k=1}^n a_{n+k}(t) \omega_k \right) U_2, \\ \frac{\partial U_2}{\partial t} = \left(\sum_{k=1}^n a_{n+k}(t) \omega_k \right) U_1 + \left(a_{2n+1}(t) - \sum_{k=1}^n a_k(t) \omega_k^2 \right) U_2, \end{cases} \quad (2.6)$$

$$U_1(t_0, \omega) = U_{01}(\omega), U_2(t_0, \omega) = U_{02}(\omega). \quad (2.7)$$

Введем обозначения $\tilde{U}(t, \omega) = (U_1(t, \omega), U_2(t, \omega))^T$ и $\tilde{U}_0(\omega) = (U_{01}(\omega), U_{02}(\omega))^T$. При каждом фиксированном $\omega \in \mathbb{R}^n$ норма вектор-функции $\tilde{U}(t, \omega)$ вычисляется по формуле $\|\tilde{U}(t, \omega)\|_1 = \max_{i=1,2} |U_i(t, \omega)|$. Справедливы следующие неравенства:

$$\|\tilde{U}(t, \omega)\|_1 = \max_{i=1,2} |U_i(t, \omega)| = \sqrt{\left(\max_{i=1,2} |U_i(t, \omega)| \right)^2} \leq \sqrt{U_1^2(t, \omega) + U_2^2(t, \omega)} = |U(t, \omega)|,$$

$$|U(t, \omega)| = \sqrt{U_1^2(t, \omega) + U_2^2(t, \omega)} \leq \sqrt{\left(\max_{i=1,2} |U_i(t, \omega)| \right)^2 + \left(\max_{i=1,2} |U_i(t, \omega)| \right)^2} \leq \sqrt{2} \|\tilde{U}(t, \omega)\|_1.$$

Тем самым, имеем оценку

$$\|\tilde{U}(t, \omega)\|_1 \leq |U(t, \omega)| \leq \sqrt{2} \|\tilde{U}(t, \omega)\|_1. \quad (2.8)$$

Введем обозначение $B[a, r]$ для замкнутого шара в пространстве $\mathbb{R}^n$ радиуса r с центром в точке a . Докажем, что при всяком фиксированном $\omega \in \mathbb{R}^n$ траектория $\tilde{U}(t, \omega)$ задачи Коши (2.6)-(2.7) при $t_0 \leq t < \infty$ не покидает шара $B[0, \delta_0]$, где $\delta_0 = \|\tilde{U}_0(\omega)\|_1$. Для доказательства предположим противное: пусть при некотором $\omega = \tilde{\omega}$ в момент времени T траектория решения системы (2.6) покидает шар $B[0, \delta_0]$. Для этого значения $\omega = \tilde{\omega}$

систему уравнений (2.6) представим следующим образом

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_1}{\partial t} = & \left(a_{2n+1}(T) - \sum_{k=1}^n a_k(T) \tilde{\omega}_k^2 \right) U_1 - \left(\sum_{k=1}^n a_{n+k}(T) \tilde{\omega}_k \right) U_2 + \\ & + \left(a_{2n+1}(t) - a_{2n+1}(T) - \sum_{k=1}^n (a_k(t) - a_k(T)) \tilde{\omega}_k^2 \right) U_1 - \\ & - \left(\sum_{k=1}^n (a_{n+k}(t) - a_{n+k}(T)) \tilde{\omega}_k \right) U_2, \end{aligned} \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_2}{\partial t} = & - \left(\sum_{k=1}^n a_{n+k}(T) \tilde{\omega}_k \right) U_1 + \left(a_{2n+1}(T) - \sum_{k=1}^n a_k(T) \tilde{\omega}_k^2 \right) U_2 - \\ & - \left(\sum_{k=1}^n (a_{n+k}(t) - a_{n+k}(T)) \tilde{\omega}_k \right) U_1 + \\ & + \left(a_{2n+1}(t) - a_{2n+1}(T) - \sum_{k=1}^n (a_k(t) - a_k(T)) \tilde{\omega}_k^2 \right) U_2, \end{aligned} \quad (2.10)$$

В операторной форме система (2.9)-(2.10) имеет вид:

$$\frac{\partial \tilde{U}(t, \tilde{\omega})}{\partial t} = C(T, \tilde{\omega}) \tilde{U}(t, \tilde{\omega}) + \Psi(t, \tilde{\omega}) \tilde{U}(t, \tilde{\omega}), \quad (2.11)$$

где $\Psi(t, \tilde{\omega}) =$

$$\begin{pmatrix} a_{2n+1}(t) - a_{2n+1}(T) - \sum_{k=1}^n (a_k(t) - a_k(T)) \tilde{\omega}_k^2 & - \sum_{k=1}^n (a_{n+k}(t) - a_{n+k}(T)) \tilde{\omega}_k \\ - \sum_{k=1}^n (a_{n+k}(t) - a_{n+k}(T)) \tilde{\omega}_k & a_{2n+1}(t) - a_{2n+1}(T) - \sum_{k=1}^n (a_k(t) - a_k(T)) \tilde{\omega}_k^2 \end{pmatrix}.$$

Решение уравнения (2.8) при $t \geq T$ может быть представлено в виде [8]

$$\tilde{U}(t, \tilde{\omega}) = e^{C(T, \tilde{\omega})(t-T)} \tilde{U}(T, \tilde{\omega}) + \int_T^t e^{C(T, \tilde{\omega})(t-s)} \Psi(s, \tilde{\omega}) \tilde{U}(s, \tilde{\omega}) ds.$$

Переходя к нормам, имеем:

$$\left\| \tilde{U}(t, \tilde{\omega}) \right\|_1 \leq \left\| e^{C(T, \tilde{\omega})(t-T)} \tilde{U}(T, \tilde{\omega}) \right\|_1 + \left\| \int_T^t e^{C(T, \tilde{\omega})(t-s)} \Psi(s, \tilde{\omega}) \tilde{U}(s, \tilde{\omega}) ds \right\|_1. \quad (2.12)$$

Оценим норму первого слагаемого. Так как по условиям теоремы логарифмическая норма $\Lambda(C(t, \omega))$ оператора $C(t, \omega)$ удовлетворяет при всех $\omega \in \mathbb{R}^n$ неравенству (2.3), то имеем следующую оценку:

$$\left\| e^{C(T, \tilde{\omega})(t-T)} \tilde{U}(T, \tilde{\omega}) \right\|_1 \leq e^{-\alpha(\tilde{\omega})(t-T)} \left\| \tilde{U}(T, \tilde{\omega}) \right\|_1. \quad (2.13)$$

Для оценки второго слагаемого отметим, что из структуры оператора $\Psi(t, \tilde{\omega})$ следует, что для любого как угодно малого $\varepsilon_2 > 0$ найдется такой промежуток времени $\Delta T(\varepsilon_2, \tilde{\omega})$,

что при $T \leq t \leq T + \Delta T(\varepsilon_2, \tilde{\omega})$ будет выполняться неравенство $\|\Psi(t, \tilde{\omega})\tilde{U}(t, \tilde{\omega})\|_1 \leq \varepsilon_2 \|\tilde{U}(t, \tilde{\omega})\|_1$

Поэтому

$$\begin{aligned} \left\| \int_T^t e^{C(T, \tilde{\omega})(t-s)} \Psi(s, \tilde{\omega}) \tilde{U}(s, \tilde{\omega}) ds \right\|_1 &\leq \int_T^t \left\| e^{C(T, \tilde{\omega})(t-s)} \Psi(s, \tilde{\omega}) \tilde{U}(s, \tilde{\omega}) \right\|_1 ds \leq \\ &\leq \int_T^t \left\| e^{C(T, \tilde{\omega})(t-s)} \right\|_1 \left\| \Psi(s, \tilde{\omega}) \tilde{U}(s, \tilde{\omega}) \right\|_1 ds \leq \varepsilon_2 \int_T^t e^{-\alpha(\tilde{\omega})(t-s)} \|\tilde{U}(s, \tilde{\omega})\|_1 ds. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Из неравенств (2.12)-(2.14) имеем

$$\|\tilde{U}(t, \tilde{\omega})\|_1 \leq e^{-\alpha(\tilde{\omega})(t-T)} \|\tilde{U}(T, \tilde{\omega})\|_1 + \varepsilon_2 \int_T^t e^{-\alpha(\tilde{\omega})(t-s)} \|\tilde{U}(s, \tilde{\omega})\|_1 ds.$$

Введем функцию $\varphi(s) = e^{-\alpha(\tilde{\omega})(t-s)} \|\tilde{U}(s, \tilde{\omega})\|_1$ и представим предыдущее неравенство в виде $\varphi(t) \leq \varphi(T) + \varepsilon_2 \int_T^t \varphi(s) ds$. Применяя неравенство Гронуолла-Беллмана и возвращаясь к нормам, получаем неравенство $\|\tilde{U}(t, \tilde{\omega})\|_1 \leq e^{[-\alpha(\tilde{\omega}) + \varepsilon_2](t-T)} \|\tilde{U}(T, \tilde{\omega})\|_1$, откуда в силу условия (2.3), выбора ε_2 и произвольности T следует неравенство $\|\tilde{U}(t, \tilde{\omega})\|_1 \leq \|\tilde{U}_0(\tilde{\omega})\|_1$. Тем самым, приходим к противоречию, обосновывающему справедливость для любого значения $\omega \in \mathbb{R}^n$ неравенства $\|\tilde{U}(t, \omega)\|_1 \leq \|\tilde{U}_0(\omega)\|_1$, из которого в силу двусторонней оценки (2.8) следует неравенство $|U(t, \omega)|^2 \leq 2|U_0(\omega)|^2$. Проинтегрировав обе его части по пространственным переменным и воспользовавшись формулой Планшереля $\|U(t, \omega)\|_2 = \|u(t, x)\|_2$, приходим к неравенству $\|u(t, x)\|^2 \leq 2\varepsilon_1^2$, из которого сразу же следует неравенство $\|u(t, x)\| \leq \sqrt{2}\varepsilon_1$, означающее устойчивость решения задачи (2.1)-(2.2).

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

Используя теорему 2.1., получим ограничения на коэффициенты $a_1(t), \dots, a_{2n+1}(t)$, достаточные для устойчивости тривиального решения задачи Коши (2.1)-(2.2). Для этого исследуем, каким условиям должны удовлетворять коэффициенты $a_1(t), \dots, a_{2n+1}(t)$, чтобы выполнялось условие (2.3).

Поскольку логарифмическая норма $\Lambda(C(t, \omega))$ вычисляется по формуле (1.1), то условие (2.3) теоремы 2.1. эквивалентно справедливости при любых $\omega \in \mathbb{R}^n$ неравенства

$$a_{2n+1}(t) - \sum_{k=1}^n a_k(t) \omega_k^2 + \left| \sum_{k=1}^n a_{n+k}(t) \omega_k \right| < 0.$$

Это неравенство можно заменить на более грубое:

$$\sum_{k=1}^n [-a_k(t) \omega_k^2 + |a_{n+k}(t)| |\omega_k|] < -a_{2n+1}(t) \quad (2.15)$$

Для того, чтобы неравенство (2.15) имело решения при любых $\omega \in \mathbb{R}^n$, необходимо потребовать, чтобы при каждом фиксированном $t \geq t_0$ выполнялись неравенства

$$a_{2n+1}(t) < 0, \quad a_k(t) > 0, k = \overline{1, n}. \quad (2.16)$$

Пусть неравенства (2.16) справедливы. Тогда условие (2.15) будет иметь место при любых $\omega \in \mathbb{R}^n$, если этому условию удовлетворяет сумма n максимумов параболических функций, стоящих в левой части (2.15). Легко убедиться, что при каждом фиксированном t максимумы достигаются в точках $\omega_k = \frac{|a_{n+k}(t)|}{2a_k(t)}$, $k = \overline{1, n}$, а неравенство (2.15) имеет вид:

$$\sum_{k=1}^n \frac{a_{n+k}^2(t)}{4a_k(t)} < -a_{2n+1}(t). \quad (2.17)$$

Т е о р е м а 2.2. Пусть функции $a_k(t)$ ($k = \overline{1, 2n+1}$) непрерывны по переменной t и при каждом фиксированном $t \geq t_0$ удовлетворяют условиям (2.16)-(2.17). Тогда тривиальное решение системы уравнений (2.1) устойчиво.

3. Устойчивость решения системы параболических уравнений

Проанализируем устойчивость тривиального решения задачи Коши для системы параболических уравнений.

$$\begin{cases} \frac{\partial u_1}{\partial t} = a_{1,1}(t) \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} + a_{1,2}(t) \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_2^2} + a_{1,3}(t) \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1^2} + a_{1,4}(t) \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2^2} + a_{1,5}(t) \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \\ \quad + a_{1,6}(t) \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + a_{1,7}(t) \frac{\partial u_2}{\partial x_1} + a_{1,8}(t) \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + a_{1,9}(t) u_1 + a_{1,10}(t) u_2, \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} = a_{2,1}(t) \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} + a_{2,2}(t) \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_2^2} + a_{2,3}(t) \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1^2} + a_{2,4}(t) \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2^2} + a_{2,5}(t) \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \\ \quad + a_{2,6}(t) \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + a_{2,7}(t) \frac{\partial u_2}{\partial x_1} + a_{2,8}(t) \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + a_{2,9}(t) u_1 + a_{2,10}(t) u_2, \end{cases} \quad (3.1)$$

$$u_1(t_0, x_1, x_2) = u_{01}(x_1, x_2), \quad u_2(t_0, x_1, x_2) = u_{02}(x_1, x_2). \quad (3.2)$$

Исследовать устойчивость решения задачи Коши (3.1)-(3.2) будем в банаховом пространстве вектор-функций $f(x_1, x_2)$ с нормой

$$\|f\| = \max_{i=1,2} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |f_i(x_1, x_2)|^2 dx_1 dx_2 \right]^{1/2}.$$

При каждом фиксированном значении t норма вектор-функции $u(t, x)$, где $x = (x_1, x_2)$, определяется формулой

$$\|u(t, x)\| = \max_{i=1,2} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |u_i(t, x)|^2 dx_1 dx_2 \right]^{1/2}.$$

Пусть решение $u(t, x) = (u_1(t, x), u_2(t, x))^T$ задачи Коши (3.1)-(3.2) существует и вместе с производной $\partial u / \partial t = (\partial u_1 / \partial t, \partial u_2 / \partial t)^T$ суммируемо с квадратом по пространственным переменным. В этих предположениях применим к задаче (3.1)-(3.2) преобразование

Фурье и получим:

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial U_1}{\partial t} &= -a_{1,1}(t)\omega_1^2 U_1 - a_{1,2}(t)\omega_2^2 U_1 - a_{1,3}(t)\omega_1^2 U_2 - a_{1,4}(t)\omega_2^2 U_2 + ia_{1,5}(t)\omega_1 U_1 + \\ &+ ia_{1,6}(t)\omega_2 U_1 + ia_{1,7}(t)\omega_1 U_2 + ia_{1,8}(t)\omega_2 U_2 + a_{1,9}(t)U_1 + a_{1,10}(t)U_2, \\ \frac{\partial U_2}{\partial t} &= -a_{2,1}(t)\omega_1^2 U_1 - a_{2,2}(t)\omega_2^2 U_1 - a_{2,3}(t)\omega_1^2 U_2 - a_{2,4}(t)\omega_2^2 U_2 + ia_{2,5}(t)\omega_1 U_1 + \\ &+ ia_{2,6}(t)\omega_2 U_1 + ia_{2,7}(t)\omega_1 U_2 + ia_{2,8}(t)\omega_2 U_2 + a_{2,9}(t)U_1 + a_{2,10}(t)U_2, \end{aligned} \right. \quad (3.3)$$

$$U_1(t_0, \omega) = U_{01}(\omega), \quad U_2(t_0, \omega) = U_{02}(\omega). \quad (3.4)$$

Справедливы представления $U_1(t, \omega) = V_1(t, \omega) + iV_2(t, \omega)$, $U_2(t, \omega) = V_3(t, \omega) + iV_4(t, \omega)$, где $V_1(t, \omega), V_2(t, \omega), V_3(t, \omega), V_4(t, \omega)$ – вещественные функции. Подставив эти представления в задачу (3.3)-(3.4), приходим к следующей задаче:

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial V_1}{\partial t} &= (a_{1,9}(t) - a_{1,1}(t)\omega_1^2 - a_{1,2}(t)\omega_2^2)V_1 - (a_{1,5}(t)\omega_1 + a_{1,6}(t)\omega_2)V_2 + \\ &+ (a_{1,10}(t) - a_{1,3}(t)\omega_1^2 - a_{1,4}(t)\omega_2^2)V_3 - (a_{1,7}(t)\omega_1 + a_{1,8}(t)\omega_2)V_4, \\ \frac{dV_2}{dt} &= (a_{1,5}(t)\omega_1 + a_{1,6}(t)\omega_2)V_1 + (a_{1,9}(t) - a_{1,1}(t)\omega_1^2 - a_{1,2}(t)\omega_2^2)V_2 + \\ &+ (a_{1,7}(t)\omega_1 + a_{1,8}(t)\omega_2)V_3 + (a_{1,10}(t) - a_{1,3}(t)\omega_1^2 - a_{1,4}(t)\omega_2^2)V_4, \\ \frac{dV_3}{dt} &= (a_{2,9}(t) - a_{2,1}(t)\omega_1^2 - a_{2,2}(t)\omega_2^2)V_1 - (a_{2,5}(t)\omega_1 + a_{2,6}(t)\omega_2)V_2 + \\ &+ (a_{2,10}(t) - a_{2,3}(t)\omega_1^2 - a_{2,4}(t)\omega_2^2)V_3 - (a_{2,7}(t)\omega_1 + a_{2,8}(t)\omega_2)V_4, \\ \frac{dV_4}{dt} &= (a_{2,5}(t)\omega_1 + a_{2,6}(t)\omega_2)V_1 + (a_{2,9}(t) - a_{2,1}(t)\omega_1^2 - a_{2,2}(t)\omega_2^2)V_2 + \\ &+ (a_{2,7}(t)\omega_1 + a_{2,8}(t)\omega_2)V_3 + (a_{2,10}(t) - a_{2,3}(t)\omega_1^2 - a_{2,4}(t)\omega_2^2)V_4, \end{aligned} \right. \quad (3.5)$$

$$V_1(t_0, \omega) = V_{01}(\omega), \quad V_2(t_0, \omega) = V_{02}(\omega),$$

$$V_3(t_0, \omega) = V_{03}(\omega), \quad V_4(t_0, \omega) = V_{04}(\omega),$$

где функции $V_{0j}(\omega), j = \overline{1, 4}$ определяются из соотношений

$$U_{01}(\omega) = V_{01}(\omega) + iV_{02}(\omega), \quad U_{02}(\omega) = V_{03}(\omega) + iV_{04}(\omega).$$

В операторном виде система (3.5) будет иметь вид:

$$\frac{\partial V(t, \omega)}{\partial t} = B(t, \omega)V(t, \omega),$$

где $V(t, \omega) = (V_1(t, \omega), V_2(t, \omega), V_3(t, \omega), V_4(t, \omega))^T$,

$$B(t, \omega) = \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix},$$

$$B_{i1} = \begin{pmatrix} a_{i9}(t) - a_{i1}(t)\omega_1^2 - a_{i2}(t)\omega_2^2 & -a_{i5}(t)\omega_1 - a_{i6}(t)\omega_2 \\ a_{i5}(t)\omega_1 + a_{i6}(t)\omega_2 & a_{i9}(t) - a_{i1}(t)\omega_1^2 - a_{i2}(t)\omega_2^2 \end{pmatrix},$$

$$B_{i2} = \begin{pmatrix} a_{i10}(t) - a_{i3}(t)\omega_1^2 - a_{i4}(t)\omega_2^2 & -a_{i7}(t)\omega_1 - a_{i8}(t)\omega_2 \\ a_{i7}(t)\omega_1 + a_{i8}(t)\omega_2 & a_{i10}(t) - a_{i3}(t)\omega_1^2 - a_{i4}(t)\omega_2^2 \end{pmatrix},$$

и $i = 1, 2$.

Достаточное условие устойчивости дается следующей теоремой.

Т е о р е м а 3.1. Пусть выполнены условия:

- 1) функции $a_{ij}(t)$, $i = \overline{1, 2}$, $j = \overline{1, 10}$ непрерывны по переменной t ;
- 2) при любых фиксированных значениях (t, ω_1, ω_2) , $t \geq t_0$, $-\infty < \omega_i < \infty$, $i = 1, 2$ логарифмическая норма матрицы $B(t, \omega_1, \omega_2)$, вычисляемая по формуле (1.1), удовлетворяет неравенству

$$\Lambda(B(t, \omega_1, \omega_2)) < -\alpha(\omega_1, \omega_2), \quad \alpha(\omega_1, \omega_2) > 0. \quad (3.6)$$

Тогда тривиальное решение задачи Коши (3.1)-(3.2) устойчиво.

Доказательство этой теоремы проводится аналогично доказательству теоремы 2.1..

Выведем ограничения на коэффициенты $a_{ij}(t)$, $i = \overline{1, 2}$, $j = \overline{1, 10}$, достаточные для выполнения условия (3.6). Это условие эквивалентно системе из двух неравенств:

$$\begin{cases} (a_{1,9}(t) - a_{1,1}(t)\omega_1^2 - a_{1,2}(t)\omega_2^2) + |a_{1,10}(t) - a_{1,3}(t)\omega_1^2 - a_{1,4}(t)\omega_2^2| + \\ + |a_{1,5}(t)\omega_1 + a_{1,6}(t)\omega_2| + |a_{1,7}(t)\omega_1 + a_{1,8}(t)\omega_2| < 0, \\ (a_{2,10}(t) - a_{2,3}(t)\omega_1^2 - a_{2,4}(t)\omega_2^2) + |a_{2,9}(t) - a_{2,1}(t)\omega_1^2 - a_{2,2}(t)\omega_2^2| + \\ + |a_{2,5}(t)\omega_1 + a_{2,6}(t)\omega_2| + |a_{2,7}(t)\omega_1 + a_{2,8}(t)\omega_2| < 0. \end{cases} \quad (3.7)$$

Имея в виду, что в этой системе два неравенства лишь формально отличны друг от друга, проанализируем только первое неравенство, а полученные результаты затем распространим на второе неравенство. Исследуем, при каких условиях при любом $\omega \in \mathbb{R}^2$ выполняется неравенство

$$(a_{1,9}(t) - a_{1,1}(t)\omega_1^2 - a_{1,2}(t)\omega_2^2) + |a_{1,10}(t) - a_{1,3}(t)\omega_1^2 - a_{1,4}(t)\omega_2^2| + \\ + |a_{1,5}(t)\omega_1 + a_{1,6}(t)\omega_2| + |a_{1,7}(t)\omega_1 + a_{1,8}(t)\omega_2| < 0.$$

Это неравенство можно заменить на более грубое

$$(a_{1,9}(t) - a_{1,1}(t)\omega_1^2 - a_{1,2}(t)\omega_2^2) + |a_{1,10}(t)| + |a_{1,3}(t)|\omega_1^2 + |a_{1,4}(t)|\omega_2^2 + \\ + (|a_{1,5}(t)| + |a_{1,7}(t)|)|\omega_1| + (|a_{1,6}(t)| + |a_{1,8}(t)|)|\omega_2| < 0. \quad (3.8)$$

Сгруппировав слагаемые, перепишем последнее неравенство следующим образом:

$$[(|a_{1,3}(t)| - a_{1,1}(t))\omega_1^2 + (|a_{1,5}(t)| + |a_{1,7}(t)|)|\omega_1|] + \\ + [(|a_{1,4}(t)| - a_{1,2}(t))\omega_2^2 + (|a_{1,6}(t)| + |a_{1,8}(t)|)|\omega_2|] < -(a_{1,9}(t) + |a_{1,10}(t)|).$$

Таким образом, левая часть неравенства (3.8) представляется в виде суммы двух параболических функций от независимых аргументов. Поскольку неравенство (3.8) должно выполняться для любых значений ω , то необходимо, чтобы обе параболы имели ветви, направленные вниз. Следовательно, при каждом фиксированном $t \geq t_0$ должны выполняться условия

$$|a_{1,3}(t)| < a_{1,1}(t), |a_{1,4}(t)| < a_{1,2}(t). \quad (3.9)$$

При условии (3.9) неравенство (3.8) будет выполняться при любых $-\infty < \omega_i < \infty$, $i = 1, 2$, если этому неравенству будет удовлетворять сумма максимумов упомянутых параболических функций. Вычисляя при каждом фиксированном $t \geq t_0$ значения параболических функций в точках максимума $\omega_1 = \frac{|a_{1,5}(t)| + |a_{1,7}(t)|}{2(a_{1,1}(t) - |a_{1,3}(t)|)}$ и $\omega_2 = \frac{|a_{1,6}(t)| + |a_{1,8}(t)|}{2(a_{1,2}(t) - |a_{1,4}(t)|)}$ соответственно, приходим к следующему условию:

$$\frac{(|a_{1,5}(t)| + |a_{1,7}(t)|)^2}{2(a_{1,1}(t) - |a_{1,3}(t)|)} + \frac{(|a_{1,6}(t)| + |a_{1,8}(t)|)^2}{2(a_{1,2}(t) - |a_{1,4}(t)|)} \leq -(a_{1,9}(t) + |a_{1,10}(t)|). \quad (3.10)$$

Распространяя полученные результаты на второе неравенство системы (3.7), получаем следующие дополнительные условия:

$$|a_{2,1}| < a_{2,3}(t), |a_{2,2}(t)| < a_{2,4}(t), \quad (3.11)$$

$$\frac{(|a_{2,5}(t)| + |a_{2,7}(t)|)^2}{2(a_{2,3}(t) - |a_{2,1}(t)|)} + \frac{(|a_{2,6}(t)| + |a_{2,8}(t)|)^2}{2(a_{2,4}(t) - |a_{2,2}(t)|)} \leq -(a_{2,10}(t) + |a_{2,9}(t)|). \quad (3.12)$$

Приведенные рассуждения позволяют нам сформулировать теорему.

Т е о р е м а 3.2. Пусть функции $a_{ij}(t), i = \overline{1, 2}, j = \overline{1, 10}$ при $t \geq t_0$ непрерывны по переменной t и при каждом фиксированном $t \geq t_0$ удовлетворяют неравенствам (3.9)-(3.12). Тогда тривиальное решение задачи Коши (3.1)-(3.2) устойчиво.

З а м е ч а н и е 3.1. Теорема 3.1. остается справедливой, если логарифмическую норму $\Lambda(B(t, \omega))$ в ней вычислять по формуле (1.2). В этом случае требование $\Lambda(B(t, \omega)) < 0$ приводит к достаточным условиям устойчивости, отличным от сформулированных в теореме 3.2.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. А. А. Шестаков, *Обобщенный прямой метод Ляпунова для систем с распределенными параметрами*, Наука, М., 1990, 320 с.
2. Т. К. Сиразетдинов, *Устойчивость систем с распределенными параметрами*, Наука, М., 1987, 232 с.
3. Д. Хенри, *Геометрическая теория полулинейных параболических уравнений*, Мир, М., 1985, 376 с.
4. С. Г. Крейн, М. И. Хазан, "Дифференциальные уравнения в банаховом пространстве", *Итоги науки и техники. Математический анализ*, **21**, ВИНТИ, М., 1983, 130–264.
5. И. В. Бойков, *Устойчивость решений дифференциальных уравнений*, Изд-во Пенз. гос. ун-та, Пенза, 2008, 244 с.
6. К. Деккер, *Устойчивость методов Рунге-Кутты для жестких нелинейных дифференциальных уравнений*, Мир, М., 1988, 334 с.
7. И. Снеддон, *Преобразования Фурье*, Изд-во иностр. лит., М., 1955, 667 с.
8. Ю. Л. Далецкий, М. Г. Крейн, *Устойчивость решений дифференциальных уравнений в банаховом пространстве*, Наука, М., 1970, 536 с.

Stability criteria for the solutions of partial differential equations of parabolic type

© I. V. Boykov³, V. A. Ryazantsev⁴

Abstract. In the work we obtained some sufficient conditions of solutions stability for systems of parabolic differential equations with time-dependent coefficients.

Key Words: partial differential equations, Liapunov stability, logarithmic norm

³ Head of Higher and Applied Mathematics Chair, Penza State University, Penza; boikov@pnzgu.ru.

⁴ Post-graduate student of Higher and Applied Mathematics Chair, Penza State University, Penza; ryazantsevv@mail.ru

В СРЕДНЕВОЛЖСКОМ МАТЕМАТИЧЕСКОМ ОБЩЕСТВЕ

УДК 517.9

Дифференциальное уравнение в частных производных первого порядка общего вида с начальными данными в декартовых координатах на линии бесконечной длины

© С. Н. Алексеенко¹, Л. Е. Платонова²

Аннотация. Для квазилинейного уравнения в частных производных первого порядка с начальными условиями, заданными в декартовых координатах, построена система из 15 интегральных уравнений, решение которой дает решение рассмотренной задачи Коши в исходных координатах. Анонсирована теорема, в которой сформулированы условия локальной разрешимости, не включающие в себя предположений о характере поведения характеристик.

Ключевые слова: квазилинейное дифференциальное уравнение первого порядка, задача Коши, метод дополнительного аргумента.

Основным объектом исследования в данной работе является квазилинейное уравнение в частных производных первого порядка

$$a_1(x_1, x_2, z)\partial_1 z + a_2(x_1, x_2, z)\partial_2 z = f(x_1, x_2, z), \quad (1.1)$$

где $\partial_i z = \frac{\partial z}{\partial x_i}$, $i = 1, 2$, a_1, a_2, f – непрерывно дифференцируемые функции. Решение ищется в некоторой окрестности линии L , которая задается уравнением $x_2 = \varphi(x_1)$, $-\infty < x_1 < +\infty$. Соответственно, задача Коши ставится следующим образом:

$$z|_L = \gamma(x_1), \quad x_1 \in (-\infty; +\infty). \quad (1.2)$$

Функции $\varphi(x_1)$, $\gamma(x_1) \in \overline{C}^2(-\infty; +\infty)$, где $\overline{C}^2(-\infty; +\infty)$ – множество дважды непрерывно дифференцируемых функций, ограниченных вместе со своими 1-ой и 2-ой производными на $(-\infty; +\infty)$. Пусть $N_\gamma = \max_{(-\infty; +\infty)} |\gamma(x_1)|$. В общих чертах схема применения метода дополнительного аргумента (далее МДА) к задаче Коши вида (1.1), (1.2) была намечена в [3]. Но в [3] резольвентная система интегральных уравнений не приведена.

В рамках данной работы рассмотрен случай, когда линия L и область определения неизвестной функции $z(x_1, x_2)$ содержится во множестве

$$\Omega_\beta = \left\{ (x_1, x_2) : -\infty < x_1 < +\infty, \min_{(-\infty; +\infty)} (\varphi(x_1) - \beta_0) \leq x_2 \leq \max_{(-\infty; +\infty)} (\varphi(x_1) + \beta_0) \right\}, \beta_0 \in \mathbb{R}.$$

Принципиальная особенность изучаемой задачи состоит в том, что наряду с поиском неизвестной функции $z(x_1, x_2)$ ищется и область определения решения. Соответственно, постоянная β_0 должна быть достаточно велика, чтобы искомая область определения $z(x_1, x_2)$ входила в Ω_β . Обозначим эту заранее неизвестную область определения

¹ Профессор кафедры прикладной математики, Нижегородский государственный технический университет имени Р. Е. Алексеева, г. Н.Новгород; sn-alekseenko@yandex.ru

² Ассистент кафедры математического анализа, Нижегородский государственный педагогический университет имени К.Минина, г. Н.Новгород; fluff13@yandex.ru

решения задачи (1.1), (1.2) через Ω_ε . Так как в данной статье речь идет о локальной разрешимости, то область Ω_ε представляет собой некоторую окрестность кривой L . Примем для определенности, что все заданные функции a_1, a_2, f определены в области $Q_\rho = \Omega_\beta \times [-\rho N_\gamma, \rho N_\gamma]$, где коэффициент ρ выбирается исходя из вида функций a_1, a_2, f . Сформулируем условия на L , при выполнении которых справедливы нижеприведенные выкладки и утверждения.

Область определения решения Ω_ε будем искать в виде полосы шириной ε в направлении Ox_2 , прилегающей к L с одной стороны, точнее

$$\Omega_\varepsilon = \{(x_1, x_2) : -\infty < x_1 < +\infty, \varphi(x_1) \leq x_2 \leq \varphi(x_1) + \varepsilon\}, \Omega_\varepsilon \subset \Omega_\beta.$$

Параметр ε подлежит определению, ограничение на величину ε является одним из основных условий разрешимости задачи (1.1), (1.2). А возможность определения ε «конструктивно», исходя из данных задачи, представляет собой одно из основных преимуществ МДА.

В рамках метода дополнительного аргумента [3] запишем для задачи Коши (1.2) расширенную характеристическую систему:

$$\frac{d\eta_1}{ds} = a_1(\eta_1, \eta_2, u), \quad (1.3)$$

$$\frac{d\eta_2}{ds} = a_2(\eta_1, \eta_2, u), \quad (1.4)$$

$$\frac{du}{ds} = f(\eta_1, \eta_2, u) \quad (1.5)$$

с начальными данными

$$\eta_1|_{s=\omega(x_1, x_2)} = x_1, \eta_2|_{s=\omega(x_1, x_2)} = x_2, u|_L = \gamma(x_1). \quad (1.6)$$

Здесь $\omega(x_1, x_2), \eta_1(s, x_1, x_2), \eta_2(s, x_1, x_2), u(s, x_1, x_2)$ — новые неизвестные функции, непрерывно дифференцируемые по всем переменным, s — дополнительный аргумент, $0 \leq s \leq \omega(x_1, x_2)$.

Значение ω на кривой, заданной уравнением $x_2 = \varphi(x_1)$ полагаем равной нулю, то есть $\omega(x_1, \varphi(x_1)) = 0$. Для получения решения в исходных координатах решения уравнений (1.3), (1.4) должны иметь возможность быть представленными в виде:

$$\begin{aligned} \eta_1 &= x_1 - \int_s^{\omega(x_1, x_2)} a_1(\eta_1(\delta, x_1, x_2), \eta_2(\delta, x_1, x_2), u(\delta, x_1, x_2)) d\delta, \\ \eta_2 &= x_2 - \int_s^{\omega(x_1, x_2)} a_2(\eta_1(\delta, x_1, x_2), \eta_2(\delta, x_1, x_2), u(\delta, x_1, x_2)) d\delta. \end{aligned} \quad (1.7)$$

Представление (1.7) оправдано, если можно определить новую заранее неизвестную функцию $\theta(x_1, x_2)$, для которой в некоторой области изменения ее аргументов были бы справедливы соотношения:

$$\begin{aligned} \theta(x_1, x_2) &= x_1 - \int_0^{\omega(x_1, x_2)} a_1(\eta_1(\delta, x_1, x_2), \eta_2(\delta, x_1, x_2), u(\delta, x_1, x_2)) d\delta, \\ \varphi(\theta(x_1, x_2)) &= x_2 - \int_0^{\omega(x_1, x_2)} a_2(\eta_1(\delta, x_1, x_2), \eta_2(\delta, x_1, x_2), u(\delta, x_1, x_2)) d\delta. \end{aligned} \quad (1.8)$$

Из соотношений (1.5)–(1.6) при допустимости (1.7):

$$u(s, x_1, x_2) = \gamma(\theta(x_1, x_2)) + \int_0^s f(\eta_1(\delta, x_1, x_2), \eta_2(\delta, x_1, x_2), u(\delta, x_1, x_2)) d\delta. \quad (1.9)$$

Л е м м а 1.1. Непрерывно дифференцируемое решение системы интегральных уравнений (1.6), (1.7), (1.9) дает решение задачи Коши (1.1)–(1.2).

При доказательстве леммы в работе [4] было выведено основное условие разрешимости. Для вывода этого условия проведем следующие выкладки: продифференцируем первое и второе уравнение (1.8) по x_1 и x_2 . Получим:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta}{\partial x_1} &= 1 - a_1 \frac{\partial \omega}{\partial x_1} - \int_0^{\omega(x_1, x_2)} \left(\frac{\partial a_1}{\partial \eta_1} \frac{\partial \eta_1}{\partial x_1} + \frac{\partial a_1}{\partial \eta_2} \frac{\partial \eta_2}{\partial x_1} + \frac{\partial a_1}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial x_1} \right) d\delta, \\ \frac{\partial \theta}{\partial x_2} &= -a_1 \frac{\partial \omega}{\partial x_2} - \int_0^{\omega(x_1, x_2)} \left(\frac{\partial a_1}{\partial \eta_1} \frac{\partial \eta_1}{\partial x_2} + \frac{\partial a_1}{\partial \eta_2} \frac{\partial \eta_2}{\partial x_2} + \frac{\partial a_1}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial x_2} \right) d\delta. \end{aligned} \quad (1.10)$$

$$\begin{aligned} \varphi' \frac{\partial \theta}{\partial x_1} &= -a_2 \frac{\partial \omega}{\partial x_1} - \int_0^{\omega(x_1, x_2)} \left(\frac{\partial a_2}{\partial \eta_1} \frac{\partial \eta_1}{\partial x_1} + \frac{\partial a_2}{\partial \eta_2} \frac{\partial \eta_2}{\partial x_1} + \frac{\partial a_2}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial x_1} \right) d\delta, \\ \varphi' \frac{\partial \theta}{\partial x_2} &= 1 - a_2 \frac{\partial \omega}{\partial x_2} - \int_0^{\omega(x_1, x_2)} \left(\frac{\partial a_2}{\partial \eta_1} \frac{\partial \eta_1}{\partial x_2} + \frac{\partial a_2}{\partial \eta_2} \frac{\partial \eta_2}{\partial x_2} + \frac{\partial a_2}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial x_2} \right) d\delta. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Умножим первое уравнение системы (1.10) на a_1 , второе – на a_2 , затем сложим полученные выражения. Будем иметь:

$$\begin{aligned} \left(a_1 \frac{\partial \theta}{\partial x_1} + a_2 \frac{\partial \theta}{\partial x_2} \right) + a_1 \left(a_1 \frac{\partial \omega}{\partial x_1} + a_2 \frac{\partial \omega}{\partial x_2} - 1 \right) &= - \int_0^{\omega(x_1, x_2)} \left(\frac{\partial a_1}{\partial \eta_1} \left(a_1 \frac{\partial \eta_1}{\partial x_1} + a_2 \frac{\partial \eta_1}{\partial x_2} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial a_1}{\partial \eta_2} \left(a_1 \frac{\partial \eta_2}{\partial x_1} + a_2 \frac{\partial \eta_2}{\partial x_2} \right) + \frac{\partial a_1}{\partial u} \left(a_1 \frac{\partial u}{\partial x_1} + a_2 \frac{\partial u}{\partial x_2} \right) \right) d\delta. \end{aligned} \quad (1.12)$$

Умножим первое уравнение системы (1.11) на a_1 , второе – на a_2 , затем сложим полученные выражения. Получим:

$$\begin{aligned} \varphi' \left(a_1 \frac{\partial \theta}{\partial x_1} + a_2 \frac{\partial \theta}{\partial x_2} \right) + a_2 \left(a_1 \frac{\partial \omega}{\partial x_1} + a_2 \frac{\partial \omega}{\partial x_2} - 1 \right) &= - \int_0^{\omega(x_1, x_2)} \left(\frac{\partial a_2}{\partial \eta_1} \left(a_1 \frac{\partial \eta_1}{\partial x_1} + a_2 \frac{\partial \eta_1}{\partial x_2} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial a_2}{\partial \eta_2} \left(a_1 \frac{\partial \eta_2}{\partial x_1} + a_2 \frac{\partial \eta_2}{\partial x_2} \right) + \frac{\partial a_2}{\partial u} \left(a_1 \frac{\partial u}{\partial x_1} + a_2 \frac{\partial u}{\partial x_2} \right) \right) d\delta. \end{aligned} \quad (1.13)$$

Обозначим

$$W(\zeta) = a_1 \frac{\partial \zeta}{\partial x_1} + a_2 \frac{\partial \zeta}{\partial x_2}.$$

Мы получим следующую систему:

$$\begin{aligned} W(\theta) + a_1 \left(a_1 \frac{\partial \omega}{\partial x_1} + a_2 \frac{\partial \omega}{\partial x_2} - 1 \right) &= - \int_0^{\omega(x_1, x_2)} \left(\frac{\partial a_1}{\partial \eta_1} W(\eta_1) + \frac{\partial a_1}{\partial \eta_2} W(\eta_2) + \frac{\partial a_1}{\partial u} W(u) \right) d\delta, \\ \varphi' W(\theta) + a_2 \left(a_1 \frac{\partial \omega}{\partial x_1} + a_2 \frac{\partial \omega}{\partial x_2} - 1 \right) &= - \int_0^{\omega(x_1, x_2)} \left(\frac{\partial a_2}{\partial \eta_1} W(\eta_1) + \frac{\partial a_2}{\partial \eta_2} W(\eta_2) + \frac{\partial a_2}{\partial u} W(u) \right) d\delta. \end{aligned} \quad (1.14)$$

Система (1.14) разрешима, когда

$$J = \begin{vmatrix} 1 & a_1 \\ \varphi' & a_2 \end{vmatrix} \neq 0. \quad (1.15)$$

Введем обозначения:

$$\begin{aligned} \omega_{xi} &= \frac{\partial \omega}{\partial x_i}, \quad \theta_{xi} = \frac{\partial \theta}{\partial x_i}, \quad u_{xi} = \frac{\partial u}{\partial x_i}, \quad \eta_{ixj} = \frac{\partial \eta_i}{\partial x_j}, \quad a_{ij} = \frac{\partial a_i}{\partial \eta_j}, \quad a_{iu} = \frac{\partial a_i}{\partial u}, \quad f_u = \frac{\partial f}{\partial u}, \quad f_i = \frac{\partial f}{\partial \eta_i}, \\ (i, j &= 1, 2). \end{aligned}$$

Далее запишем систему уравнений с использованием таких обозначений:

$$u(s, x_1, x_2) = \gamma(\theta(x_1, x_2)) + \int_0^s f(\eta_1(\delta, x_1, x_2), \eta_2(\delta, x_1, x_2), u(\delta, x_1, x_2)) d\delta, \quad (1.16)$$

$$u_{xj} = \gamma'(\theta(x_1, x_2)) \theta_{xj} + \int_0^s \left(\sum_{i=1}^2 f_i \eta_{ixj} + f_u u_{xj} \right) d\delta, \quad (1.17)$$

$$\eta_j = x_j - \int_s^{\omega(x_1, x_2)} a_j(\eta_1(\delta, x_1, x_2), \eta_2(\delta, x_1, x_2), u(\delta, x_1, x_2)) d\delta, \quad (1.18)$$

$$\eta_{lxk} = \delta_k^l - a_l \omega_{xk} - \int_s^{\omega(x_1, x_2)} \left(\sum_{i=1}^2 a_{li} \eta_{ixk} + a_{lu} u_{xk} \right) d\delta, \quad (1.19)$$

$$\omega = \int_{\varphi(x_1)}^{x_2} \omega_{x2} dx_2, \quad (1.20)$$

$$\omega_{x1} = J^{-1} \left(-\varphi' + \int_0^{\omega(x_1, x_2)} \left(\varphi' \left(\sum_{i=1}^2 a_{1i} \eta_{ix1} + a_{1u} u_{x1} \right) - \left(\sum_{i=1}^2 a_{2i} \eta_{ix1} + a_{2u} u_{x1} \right) \right) d\delta \right), \quad (1.21)$$

$$\omega_{x2} = J^{-1} \left(1 + \int_0^{\omega(x_1, x_2)} \left(\varphi' \left(\sum_{i=1}^2 a_{1i} \eta_{ix2} + a_{1u} u_{x2} \right) - \left(\sum_{i=1}^2 a_{2i} \eta_{ix2} + a_{2u} u_{x2} \right) \right) d\delta \right), \quad (1.22)$$

$$\theta = x_1 - \int_0^{\omega(x_1, x_2)} a_1(\eta_1(\delta, x_1, x_2), \eta_2(\delta, x_1, x_2), u(\delta, x_1, x_2)) d\delta, \quad (1.23)$$

$$\theta_{xj} = J^{-1} \left((-1)^{j+1} a_{3-j} + \int_0^{\omega(x_1, x_2)} \left(a_1 \left(\sum_{i=1}^2 a_{2i} \eta_{ixj} + a_{2u} u_{xj} \right) - a_2 \left(\sum_{i=1}^2 a_{1i} \eta_{ixj} + a_{1u} u_{xj} \right) \right) d\delta \right), \quad (1.24)$$

где $j, l, k = 1, 2$, δ_k^l – символ Кронекера. Уравнение (1.16) получено интегрированием уравнения (1.5) в пределах от 0 до s с учетом начальных данных (1.6). Уравнения (1.17) получены дифференцированием уравнения (1.9) по x_1 и x_2 , соответственно. Уравнения (1.18) получены интегрированием уравнений (1.3) и (1.4) соответственно в пределах от s до $\omega(x_1, x_2)$. Уравнения (1.19) получены дифференцированием первого и второго уравнений (1.7) по x_1 и x_2 , соответственно. Уравнение (1.20) получено интегрирование равенства $\omega_{x2} = \frac{\partial \omega}{\partial x_2}$ по Ox_2 от $\varphi(x_1)$ до x_2 . Уравнения (1.21) и (1.24) при $j = 1$ получены решением системы уравнений относительно ω_{x1} и θ_{x1} , состоящей из первого уравнения (1.10) и первого уравнения (1.11). Уравнения (1.22) и (1.24) при $j = 2$ получены решением системы уравнений относительно ω_{x2} и θ_{x2} , состоящей из второго уравнения (1.10) и второго уравнения (1.11). Уравнение (1.23) – первое уравнение (1.8).

Так как при доказательстве существования решения системы интегральных уравнений (1.16) – (1.24), производные рассматриваются как новые неизвестные функции, введем соответствующие обозначения:

$$u(s, x_1, x_2) = U(s, x_1, x_2), \omega = W_1, \theta = W_2, \theta_{xi} = W_{2i}, u_{xi} = U_i, \omega_{xi} = W_{1i}, \eta_i = H_i,$$

$$\eta_{ixj} = H_{ij}, \mu_1 = x_1 - H_1, \mu_2 = x_1 - W_2, \mu_{ixj} = \mu_{ij}, (i, j = 1, 2).$$

С ними основная резольвентная система запишется следующим образом:

$$U(s, x_1, x_2) = \gamma(W_2(x_1, x_2)) + \int_0^s f(x_1 - \mu_1, H_2(\delta, x_1, x_2), U(\delta, x_1, x_2)) d\delta, \quad (1.25)$$

$$U_1 = \gamma'(W_2(x_1, x_2)) W_{21} + \int_0^s (f_1(1 - \mu_{11}) + f_2 H_{21} + f_U U_1) d\delta, \quad (1.26)$$

$$U_2 = \gamma'(W_2(x_1, x_2)) W_{22} + \int_0^s (f_1(-\mu_{12}) + f_2 H_{22} + f_U U_2) d\delta, \quad (1.27)$$

$$\mu_1 = \int_s^{W_1(x_1, x_2)} a_1(x_1 - \mu_1, H_2, U(\delta, x_1, x_2)) d\delta, \quad (1.28)$$

$$H_2 = x_2 - \int_s^{W_1(x_1, x_2)} a_2(x_1 - \mu_1, H_2, U(\delta, x_1, x_2)) d\delta, \quad (1.29)$$

$$\mu_{11} = a_1 W_{11} + \int_s^{W_1(x_1, x_2)} (a_{11}(1 - \mu_{11}) + a_{12}H_{21} + a_{1U}U_1) d\delta, \quad (1.30)$$

$$\mu_{12} = a_1 W_{12} + \int_s^{W_1(x_1, x_2)} (a_{11}(-\mu_{12}) + a_{12}H_{22} + a_{1U}U_2) d\delta, \quad (1.31)$$

$$H_{21} = -a_2 W_{11} - \int_s^{W_1(x_1, x_2)} (a_{21}(1 - \mu_{11}) + a_{22}H_{21} + a_{2U}U_1) d\delta, \quad (1.32)$$

$$H_{22} = 1 - a_2 W_{12} - \int_s^{W_1(x_1, x_2)} (a_{21}(-\mu_{12}) + a_{22}H_{22} + a_{2U}U_2) d\delta, \quad (1.33)$$

$$W_1 = \int_{\varphi(x_1)}^{x_2} W_{12} dx_2, \quad (1.34)$$

$$\mu_2 = \int_0^{W_1(x_1, x_2)} a_1(x_1 - \mu_1, H_2, U(\delta, x_1, x_2)) d\delta, \quad (1.35)$$

$$W_{11} = J^{-1} \left(-\varphi' + \int_0^{W_1(x_1, x_2)} \left(\varphi' (a_{11}(1 - \mu_{11}) + a_{12}H_{21} + a_{1U}U_1) - \right. \right. \\ \left. \left. - (a_{21}(1 - \mu_{11}) + a_{22}H_{21} + a_{2U}U_1) \right) d\delta \right), \quad (1.36)$$

$$W_{12} = J^{-1} \left(1 + \int_0^{W_1(x_1, x_2)} \left(\varphi' (a_{11}(-\mu_{12}) + a_{12}H_{22} + a_{1U}U_2) - \right. \right. \\ \left. \left. - (a_{21}(-\mu_{12}) + a_{22}H_{22} + a_{2U}U_2) \right) d\delta \right), \quad (1.37)$$

$$1 - \mu_{21} = J^{-1} \left(a_2 + \int_0^{W_1(x_1, x_2)} \left(a_1 (a_{21}(1 - \mu_{11}) + a_{22}H_{21} + a_{2U}U_1) - \right. \right. \\ \left. \left. - a_2 (a_{11}(1 - \mu_{11}) + a_{12}H_{21} + a_{1U}U_1) \right) d\delta \right), \quad (1.38)$$

$$- \mu_{22} = J^{-1} \left(-a_1 + \int_0^{W_1(x_1, x_2)} \left(a_1 (a_{21}(-\mu_{12}) + a_{22}H_{22} + a_{2U}U_2) - \right. \right. \\ \left. \left. - a_2 (a_{11}(-\mu_{12}) + a_{12}H_{22} + a_{1U}U_2) \right) d\delta \right). \quad (1.39)$$

В системе (1.25) – (1.39) $U, U_1, U_2, \mu_1, H_2, \mu_{11}, \mu_{12}, H_{21}, H_{22}, W_1, W_{11}, W_{12}, \mu_2, \mu_{21}, \mu_{22}$ новые неизвестные функции.

Несмотря на достаточно сложный вид, резольвентная система (1.25) – (1.39) может быть исследована с помощью классического метода последовательных приближений. Принципиальным преимуществом этой системы является то, что в ней явно выписаны все взаимосвязи между известными и неизвестными величинами. А, следовательно, непосредственные оценки дают конкретное выражение для величины ε , характеризующей область определения решения. Весь набор условий, обеспечивающих существование решения задачи (1.1) – (1.2) в исходных координатах, сформулирован в нижеследующей теореме. При этом, кроме введенных выше, использовано обозначение:

$$X_2 = \max_{x_1 \in (-\infty; +\infty)} \{|\varphi(x_1) - \beta_0|, |\varphi(x_1) + \beta_0|\}.$$

Т е о р е м а 1.3. Пусть $a_1(x_1, x_2, z), a_2(x_1, x_2, z), f(x_1, x_2, z)$ непрерывно дифференцируемые функции по всем аргументам в области $Q_\rho; L$ — линия, несущая начальные данные: $x_2 = \varphi(x_1); \varphi(x_1), \gamma(x_1) \in \overline{C}^2(-\infty; +\infty)$; выполнено основное условие разрешимости $|J| \geq K_J$. Тогда существует такое число $\varepsilon_0 > 0$, что при $0 \leq \varepsilon \leq \varepsilon_0$, задача Коши (1.1), (1.2) имеет единственное решение $z \in C^1(\Omega_\varepsilon)$, которое при $s = \omega$ совпадает с функцией $u(s, x_1, x_2) = U(s, x_1, x_2)$, определяемой из резольвентной системы (1.25) – (1.39).

З а м е ч а н и е 1.2. Число ε_0 определяется алгебраическим образом через известные и заданные функции.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Алексеенко С. Н., “Применение метода дополнительного аргумента к исследованию разрешимости "одноосной" задачи Коши для квазилинейных уравнений в частных производных первого порядка”, *Математический вестник педвузов и университетов Волго-Вятского региона*, 2009, № 11, 40–49.
2. Алексеенко С. Н., “Доказательство сходимости последовательных приближений, построенных с помощью метода дополнительного аргумента в "одноосной" задаче Коши для квазилинейных уравнений в частных производных первого порядка”, *Математический вестник педвузов и университетов Волго-Вятского региона*, 2010, № 12, 51–57.
3. Иманалиев М. И., Алексеенко С. Н., “Условия целесообразности применения метода дополнительного аргумента к квазилинейным дифференциальным уравнениям первого порядка в частных производных общего вида”, *Асимптотические топологические и компьютерные методы в математике*, Труды межд. научн. конф. посвящ. 70-летию академика М. И. Иманалиева (Бишкек, КГНУ), Сер.3. Естеств. и техн. науки, Матем. науки. Информ. и инф. технологии, Вестник КГНУ, 2001, 6–7.
4. Алексеенко С. Н., Платонова Л. Е., “Построение основной разрешающей системы интегральных уравнений для квазилинейного уравнения в частных производных первого порядка в случае параметрического задания начальных данных”, *Математический вестник педвузов и университетов Волго-Вятского региона*, 2011, № 13, 61–70.

5. Иманалиев М. И., Алексеенко С. Н., “К теории нелинейных уравнений с дифференциальным оператором типа полной производной по времени”, *Докл. АН*, **329**:5 (1993), 543–546.
6. Иманалиев М. И., Алексеенко С. Н., “К теории нелинейных уравнений с дифференциальным оператором типа полной производной по времени”, *Докл. РАН*, **379**:1 (2001), 16–21.
7. Иманалиев М. И., Панков П. С., Алексеенко С. Н., “Метод дополнительного аргумента”, *Вестник КазНУ. Серия математика, механика, информатика. Специальный выпуск*, 2006, № 1, 60–64.

A first-order partial differential equation of the common type with initial data in Cartesian coordinates on an infinite length line

© S. N. Alekseenko³, L. E. Platonova⁴

Abstract. The Cauchy problem for a quasi-linear first order partial differential equation is studied in case when initial data is given on an infinite length smooth line with non-vertical gradient. A system in 15 integral equations, a solution of which gives a solution of the considered Cauchy problem in original coordinates, is constructed. Local solvability conditions, which do not include in itself assumptions about behavior of the characteristic lines, are presented in a theorem announced here.

Key Words: quasi-linear first order partial differential equation, Cauchy problem, method of an additional argument.

³ The professor of the applied mathematics chair, Nizhniy Novgorod State Technical University, Nizhniy Novgorod; sn-alekseenko@yandex.ru

⁴ The assistant lecture of the mathematical analysis chair, Nizhniy Novgorod State Pedagogical University, Nizhniy Novgorod; fluff13@yandex.ru

УДК 517.929

К вопросу об использовании систем дифференциальных уравнений с запаздыванием в прогнозировании динамики социально-экономических процессов

© В. А. Атряхин¹, П. А. Шаманаев²

Аннотация. В работе описываются три подхода к решению систем дифференциальных уравнений с запаздыванием. Предлагаются примеры использования предлагаемых механизмов для прогнозирования динамики воспроизводства научных кадров. Приводятся результаты построения прогноза.

Ключевые слова: система дифференциальных уравнений с отклоняющимся аргументом, метод наименьших квадратов, задача Коши

1. Введение

В статье рассматривается математическая модель, описывающая процесс воспроизводства научных кадров на этапе поступления в аспирантуру с использованием системы обыкновенных дифференциальных уравнений с запаздывающим аргументом. В работе [1] предложен механизм отыскания неизвестных параметров настоящей математической модели на основе известных статистических данных за промежуток времени, предшествующий прогнозируемому.

В качестве математической модели рассмотрим систему дифференциальных уравнений с отклоняющимся аргументом:

$$\begin{cases} \dot{y}(t) = aw(t) + by(t - \delta) + cz(t - \delta), \\ \dot{z}(t) = kw(t) + dy(t - \delta) + sz(t - \delta), \\ \dot{w}(t) = y(t) - z(t). \end{cases} \quad (1.1)$$

где $w(t)$ – численность претендентов на поступление в аспирантуру для фиксированного потока студентов в момент времени t ; $y(t)$ – численность потока присоединяющихся к группе претендентов на поступление в аспирантуру по результатам выбранной сессии в момент времени t ; $z(t)$ – численность потока выбывающих из группы претендентов на поступление в аспирантуру по результатам выбранной сессии в момент времени t ; – промежуток времени, разделяющий моменты поступления в вуз соседних потоков, в нашем случае равный одному году.

В работе [1] система (1.1) свелась к системе конечно-разностных уравнений:

$$\begin{cases} y_m^l = \frac{1}{2}\hat{a}(y_m^l + y_{m-1}^l) + \hat{b}y_m^{l-1} + \hat{c}z_m^{l-1}, \\ z_m^l = \frac{1}{2}\hat{k}(y_m^l + y_{m-1}^l) + \hat{d}y_m^{l-1} + \hat{s}z_m^{l-1}, \\ w_m^l = w_{m-1}^l + y_m^l - z_m^l. \end{cases} \quad (1.2)$$

где y_m^l – количество студентов l -го потока, присоединяющихся к группе претендентов на поступление в аспирантуру после m -ой сессии, z_m^l – количество студентов l -ого потока,

¹ Ассистент кафедры прикладной математики, Мордовский государственный университет им. Н. П. Огарева, г. Саранск; atrvol@rambler.ru.

² Заведующий кафедрой прикладной математики, Мордовский государственный университет им. Н. П. Огарева, г. Саранск; korspa@yandex.ru.

выбывающих из группы претендентов на поступление в аспирантуру после m -ой сессии, w_m^l – численность группы претендентов на поступление в аспирантуру l -ого потока студентов после m -ой сессии.

2. Описание алгоритмов решения системы дифференциальных уравнений с отклоняющимся аргументом

Рассмотрим алгоритм проведения вычислений по полученной разностной схеме с учетом известных статистических данных по N потокам. Предполагается, что известна статистическая информация в разрезе девяти сессий по N потокам, предшествующим прогнозируемому $N + 1$ -ому потоку: $y_m^l, z_m^l, w_m^l, l = \overline{1, N}, m = \overline{2, 9}$ – и данные о результатах первой сессии $N + 1$ -го потока – w_{N+1}^1 . Цель вычислений – найти количество студентов $N + 1$ -го потока, которые будут в группе претендентов на поступление в аспирантуру после девятой сессии, – w_{N+1}^9 . Численный алгоритм состоит из двух этапов. На первом этапе для каждой l -ой сессии вычисляются неизвестные параметры системы (1.2). Обозначим их $\hat{a}^l, \hat{b}^l, \hat{c}^l, \hat{k}^l, \hat{d}^l, \hat{s}^l, l = \overline{2, 9}$.

На втором этапе численного алгоритма, используя найденные коэффициенты находятся прогнозируемые численности группы претендентов на поступление в аспирантуру $w_{N+1}^l, l = \overline{2, 9}$.

Рассмотрим три варианта отыскания значений $w_{N+1}^l, l = \overline{2, 9}$. Первый вариант сводится к использованию для нахождения значений $w_{N+1}^l, l = \overline{2, 9}$ итерационной формулы.

Подставляя в третье уравнение системы (2) вместо y_m^l правую часть первого уравнения и вместо z_m^l правую часть второго уравнения, и выражая w_{N+1}^l , получаем итерационную формулу:

$$w_{N+1}^l = \frac{(1 + \hat{a}^l/2 - \hat{k}^l/2)w_{N+1}^{l-1} + (\hat{b}^l - \hat{d}^l)y_m^l + (\hat{c}^l - \hat{s}^l)z_N^l}{1 + \hat{k}^l/2 - \hat{a}^l/2} \quad (2.1)$$

Второй вариант отыскания значений $w_{N+1}^l, l = \overline{2, 9}$ заключается в использовании аналитического решения системы (1.1) с известными коэффициентами. Введем обозначение

$$X_k(t) = \begin{pmatrix} y_k(t) \\ z_k(t) \\ w_k(t) \end{pmatrix}, l = \overline{2, 9}.$$

Для нахождения решения воспользуемся теоремой [3]:

Т е о р е м а 2.1. Пусть λ_k – корень уравнения $\Delta A(\lambda) = 0$. Тогда комплексному числу λ_k отвечает решение системы (1.1) вида

$$X_k(t) = P_k(t)e^{\lambda_k t},$$

где $P_k(t)$ – полином относительно t с векторными коэффициентами и степени ниже кратности корня λ_k .

Здесь $\Delta A(\lambda) = 0$ – характеристическое уравнение. В развернутом виде характеристическое уравнение для системы (1.1) примет следующий вид:

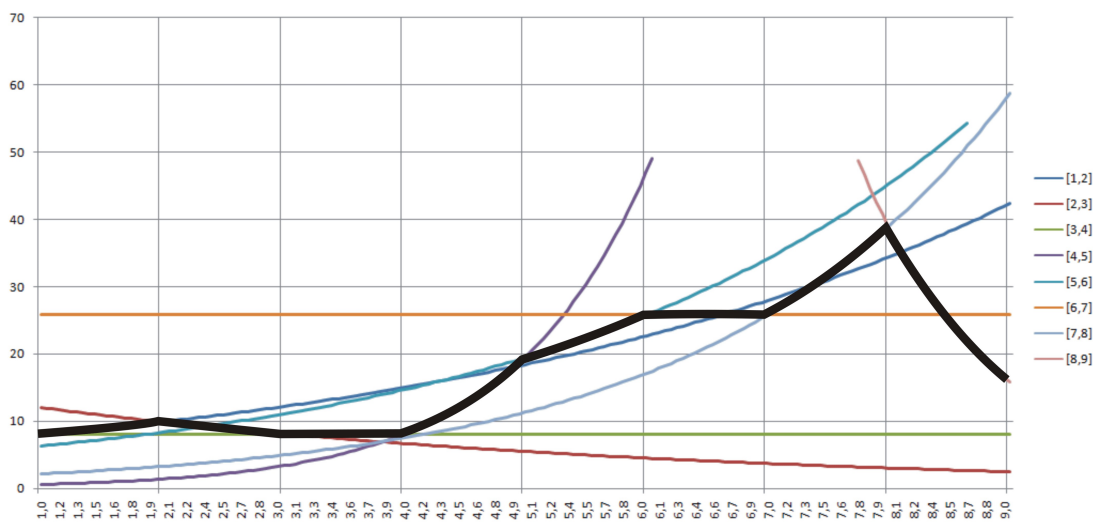
$$\det \left[\lambda E - \begin{pmatrix} 0 & 0 & a \\ 0 & 0 & k \\ -1 & 1 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} b & c & 0 \\ d & s & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} e^{-h\lambda} \right] = 0$$

Кратность корней $\lambda_k = 1$. А значит, решение системы (1.1) примет вид:

$$X_k(t) = \begin{pmatrix} d_1^l e^{\lambda_k t} \\ d_2^l e^{\lambda_k t} \\ d_3^l e^{\lambda_k t} \end{pmatrix}, l = \overline{2, 9}.$$

На первом этапе построения прогноза нам известно значение w_{N+1}^l . Для построения функции w_{N+1}^i , $i = \overline{2, 9}$ воспользуемся итерационной формулой $w_{N+1}^{l-1} = d_3^l e^{(l-1)\lambda_k}$, $l = \overline{2, 9}$. В итоге на каждом отрезке $t \in [i-1, i]$, $i = \overline{2, 9}$ будет построена экспоненциальная функция, причем значение функции в конечной точке отрезка будет начальной точкой для функции, построенной на следующем отрезке. Значение w_{N+1}^9 будет итогом построения прогноза.

Графическое представление аналитического решения системы (1.1) схематически представлено на рисунке:



Р и с у н о к 2.1

Графическое представление аналитического решения системы (1.1), удовлетворяющего заданным начальным данным

Третьим вариантом отыскания значений w_{N+1}^l , $l = \overline{2, 9}$ является численное решение системы (1.1). Для этого положим $\delta = 1$ и получим систему:

$$\begin{cases} \dot{y}(t) = aw(t) + by(t-1) + cz(t-1), \\ \dot{z}(t) = kw(t) + ly(t-1) + mz(t-1), \\ \dot{w}(t) = y(t) - z(t). \end{cases} \quad (2.2)$$

Значения функций $w(t), y(t), z(t)$ являются известными при $t \in [0, 1]$. Поэтому, решая систему (2.2) на отрезке $t \in [i, i+1]$, вместо $w(t-1), y(t-1), z(t-1)$ подставим значения функций $w(t), y(t), z(t)$ на отрезке $t \in [i-1, i]$. В итоге получим систему обыкновенных дифференциальных уравнений следующего вида:

$$\begin{cases} \dot{y}(t) = aw(t) + q_1, \\ \dot{z}(t) = kw(t) + q_2, \\ \dot{w}(t) = y(t) - z(t). \end{cases} \quad (2.3)$$

Данная система решается методом Рунге-Кутты 4-го порядка точности.

3. Численный эксперимент

Апробацию предложенной модели проведем на основе статистических данных об успеваемости одной группы студентов очной формы обучения специальности «Прикладная математика и информатика» математического факультета МГУ им. Н.П.Огарева, поступивших в университет с 2000 по 2006 год.

Примем за критерий включения в группу претендентов на поступление в аспирантуру величину среднего балла по итогам последней сессии большую или равную 4,2. Анализируя статистические данные, составим таблицу численности претендентов на поступление в аспирантуру (табл. 1), таблицу вливающих в группу претендентов на поступление в аспирантуру (табл. 2) и таблицу выбывающих из группы претендентов на поступление в аспирантуру (табл. 3) в разрезе семи потоков студентов и сессий за 2000 – 2006 годы.

	<i>Номер сессии</i>								
<i>Номер потока</i>	<i>1</i>	<i>2</i>	<i>3</i>	<i>4</i>	<i>5</i>	<i>6</i>	<i>7</i>	<i>8</i>	<i>9</i>
<i>2006</i>	7	7	7	4	7	15	11	16	10
<i>2005</i>	8	13	8	4	14	19	16	19	11
<i>2004</i>	9	10	9	2	7	10	12	13	12
<i>2003</i>	12	9	10	4	11	11	13	15	11
<i>2002</i>	9	14	12	7	16	19	20	20	21
<i>2001</i>	6	6	8	6	8	18	21	21	19
<i>2000</i>	5	8	8	4	6	14	15	15	12

Таблица 1: Численность претендентов на поступление в аспирантуру

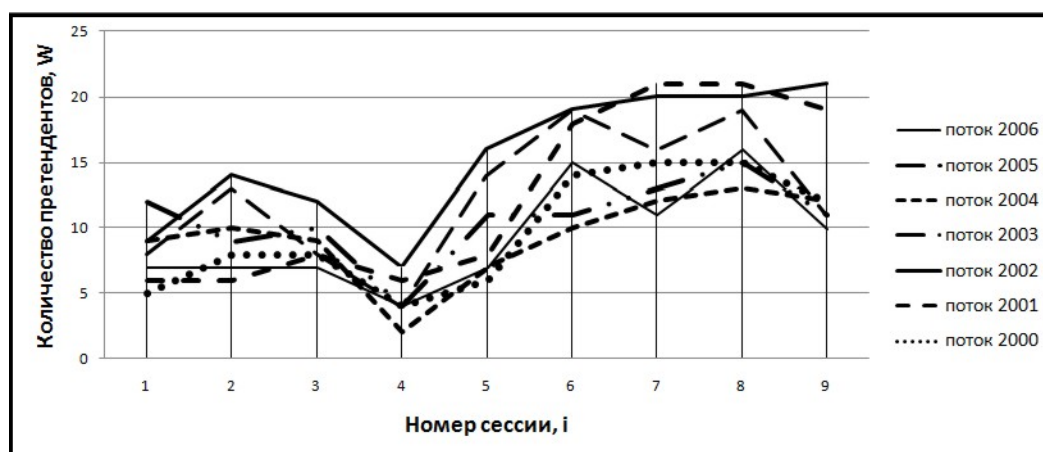
	<i>Номер сессии</i>								
<i>Номер потока</i>	<i>1</i>	<i>2</i>	<i>3</i>	<i>4</i>	<i>5</i>	<i>6</i>	<i>7</i>	<i>8</i>	<i>9</i>
<i>2006</i>	0	0	0	0	3	8	1	5	0
<i>2005</i>	0	5	0	0	10	5	0	4	0
<i>2004</i>	0	1	0	0	5	4	2	1	2
<i>2003</i>	0	1	2	0	7	3	4	3	3
<i>2002</i>	0	5	1	0	9	3	2	1	2
<i>2001</i>	0	1	3	2	4	11	4	2	4
<i>2000</i>	0	5	3	0	3	8	4	2	1

Таблица 2: Численность вливающих в группу претендентов на поступление в аспирантуру

Номер потока	Номер сессии								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
2006	0	0	0	3	0	0	5	0	10
2005	0	0	5	4	0	0	3	1	8
2004	0	0	1	7	0	1	0	0	3
2003	0	4	1	6	0	3	2	1	7
2002	0	0	3	5	0	0	1	1	1
2001	0	1	1	4	2	1	1	2	6
2000	0	2	3	4	1	0	3	2	4

Таблица 3: Численность выбывающих из группы претендентов на поступление в аспирантуру

График, построенный на основании данных по численности группы претендентов на поступление в аспирантуру (рис. 3.1), подтверждает предположение о том, что изменение количественного состава группы претендентов по разным потокам в разрезе сессий сохраняет общие тенденции.



Р и с у н о к 3.1

Изменение численностей групп претендентов на поступление в аспирантуру для потоков 2000-2006 в разрезе сессий

На основании исходных статистических данных были получены следующие значения коэффициентов системы дифференциальных уравнений с отклоняющимся аргументом (1.1):

	<i>Номер сессии</i>							
<i>Коэф.</i>	<i>2</i>	<i>3</i>	<i>4</i>	<i>5</i>	<i>6</i>	<i>7</i>	<i>8</i>	<i>9</i>
<i>a</i>	0.453	-0.071	0.35	1.292	0.338	-0.007	0.206	0.18
<i>b</i>	-0.512	0.675	-0.988	-0.316	0.215	0.488	0.726	0.044
<i>c</i>	0.437	-0.28	0.339	2.655	0.481	-0.557	1.975	0.223
<i>k</i>	0.029	0.395	0.336	0.023	0.122	0.289	0.08	0.51
<i>l</i>	-0.207	-0.498	0.523	0.288	-0.059	0.314	0.297	0.205
<i>m</i>	-0.305	0.498	0.141	0.012	0.15	1.162	0.373	1.833

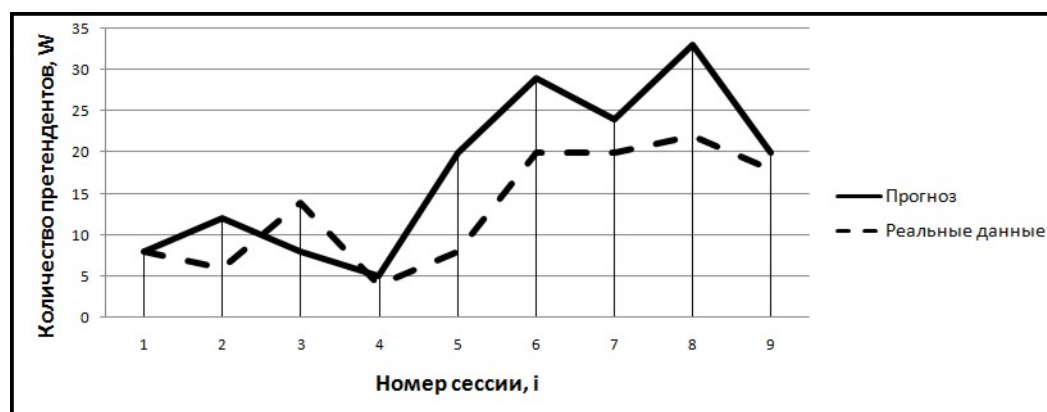
Таблица 4: Найденные значения коэффициентов для сессий со 2-ой по 9-ю

Итог построения прогноза по итерационной формуле (2.1) приведен в таблице 5 вместе с реальными статистическими данными за тот же промежуток времени.

	<i>Номер сессии</i>								
	<i>1</i>	<i>2</i>	<i>3</i>	<i>4</i>	<i>5</i>	<i>6</i>	<i>7</i>	<i>8</i>	<i>9</i>
<i>Прогноз</i>	8	12	8	5	20	29	24	33	20
<i>Стат. данные</i>	8	6	14	4	8	20	20	22	18

Таблица 5: Результаты прогнозирования количества претендентов на поступление в аспирантуру для 2007 потока в разрезе сессий по итерационной формуле (2.1)

Графически эти результаты представлены на рисунке:



Р и с у н о к 3.2

Результаты прогнозирования количества претендентов на поступление в аспирантуру для 2007 потока в разрезе сессий по итерационной формуле

Для приведенных коэффициентов были получены следующие аналитические решения систем:

	Номер сессии			
Решение	2	3	4	5
$y(t)$	$-6.07e^{-0.87t}$	$0.97e^{0.4t}$	$-5.29e^{-0.1t}$	$1.16e^{0.26t}$
$z(t)$	$10.34e^{-0.87t}$	$0.36e^{0.4t}$	$-4.6e^{-0.1t}$	$0.74e^{0.26t}$
$w(t)$	$18.99e^{-0.87t}$	$1.49e^{0.4t}$	$6.85e^{-0.1t}$	$1.63e^{0.26t}$

Таблица 6: Компоненты вектора $X(t)$ для сессий со 2-ой по 5-ю

	Номер сессии			
Решение	6	7	8	9
$y(t)$	$0.23e^{0.58t}$	$0.48e^{0.34t}$	$0.06e^{0.74t}$	$9898.3e^{-0.8t}$
$z(t)$	$0.4e^{0.58t}$	$0.01e^{0.34t}$	$-0.01e^{0.74t}$	$24642.48e^{-0.8t}$
$w(t)$	$0.33e^{0.58t}$	$1.39e^{0.34t}$	$0.08e^{0.74t}$	$18473.95e^{-0.8t}$

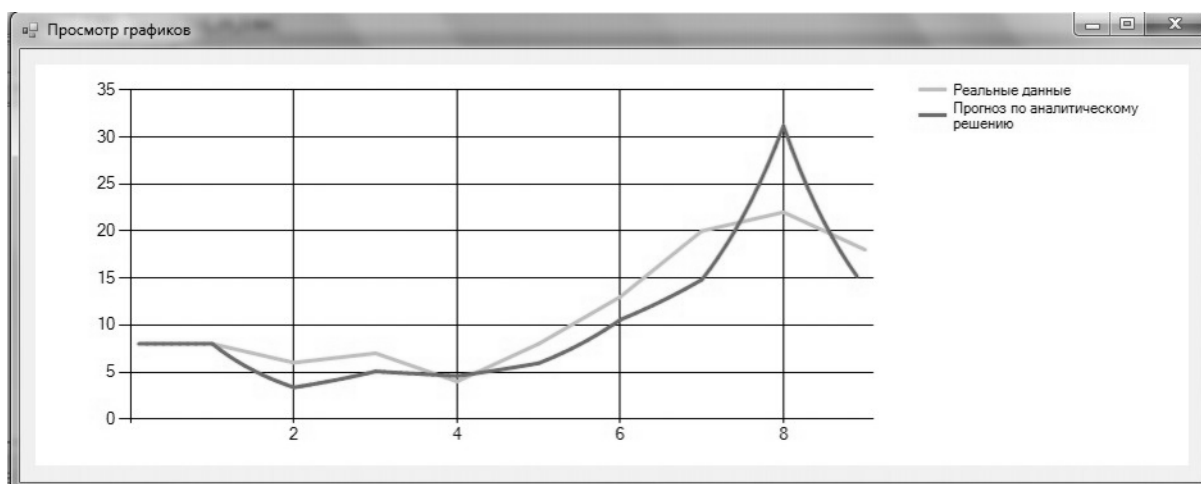
Таблица 7: Компоненты вектора $X(t)$ для сессий со 6-ой по 9-ю

Итог построения прогноза с использованием аналитического решения системы (1.1) приведен в таблице (табл. 8) вместе с реальными статистическими данными за тот же промежуток времени.

	Номер сессии								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Прогноз	8	3	5	5	6	11	15	30	15
Стат. данные	8	6	7	4	7	13	20	22	18

Таблица 8: Результаты прогнозирования количества претендентов на поступление в аспирантуру для 2007 потока в разрезе сессий по аналитическому решению системы

Графически эти результаты представлены на рисунке:



Р и с у н о к 3.3

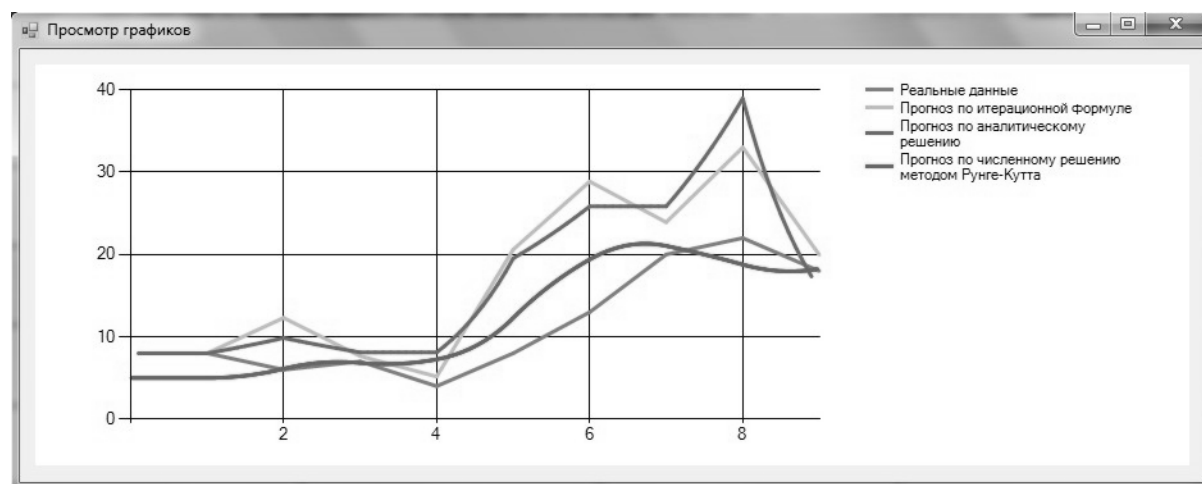
Результаты прогнозирования количества претендентов на поступление в аспирантуру для 2007 потока в разрезе сессий по аналитическому решению системы (1.1)

Итог построения прогноза с использованием численного решения системы (1.1) методом Рунге-Кутты 4-го порядка точности приведен в таблице (табл. 9) вместе с реальными статистическими данными за тот же промежуток времени.

	Номер сессии								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Прогноз	8	6	7	8	13	19	20	18	18
Стат. данные	8	6	7	4	7	13	20	22	18

Таблица 9: Результаты прогнозирования количества претендентов на поступление в аспирантуру для 2007 потока в разрезе сессий по численному решению системы (1.1) методом Рунге-Кутты

Графически результаты построения прогноза тремя рассмотренными методами представлены на рисунке:



Р и с у н о к 3.4

Результаты прогнозирования количества претендентов на поступление в аспирантуру для 2007 потока в разрезе сессий

Среднеквадратичное отклонение прогнозируемых данных от реальной статистики для каждого из рассмотренных методов не превышает 23%, что говорит о том, что точность полученных результатов допустима с точки зрения математического моделирования в социологических исследованиях. Таким образом, построенная математическая модель позволяет прогнозировать динамику численности претендентов на поступление в аспирантуру на основе статистических данных за несколько лет, предшествующих прогнозируемому отрезку времени.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Атряхин В. А., Шаманаев П. А., "Моделирование динамики кадров с использованием дифференциальных уравнений с отклоняющимся аргументом", *Журнал Средневолжского математического общества*, **14**:1 (2012), 53-58.
2. Прасолов А. В., *Динамические модели с запаздыванием и их приложения в экономике и инженерии*, Издательство «Лань», СПб., 2010, 192 с.

On the use of systems of differential equations with delay in predicting the dynamics of socio-economic processes

© V.A. Atryahin³, P.A. Shamanaev⁴

Abstract. This paper describes three approaches to solving systems of differential equations with delay. Offered examples of the use of the proposed mechanisms for predicting the dynamics of reproduction of scientific personnel. The results of the forecast is in this article.

Key Words: the system of differential equations with deviating argument, the method of least squares, the Cauchy problem

³ Assistant of Applied Mathematics Chair, Mordovian State University after N. P. Ogarev, Saransk; atrvol@rambler.ru.

⁴ Chief of Applied Mathematics Chair, Mordovian State University after N. P. Ogarev, Saransk; korspa@yandex.ru.

УДК 541.127

Построение кинетических моделей химических реакций на основе многоядерных систем

© И. В. Ахметов¹, И. М. Губайдуллин²

Аннотация. Построена кинетическая модель реакции получения метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты с использованием параллельных вычислений на многоядерных системах. Решены следующие задачи: разработка и анализ математической модели; определение численных значений кинетических параметров, описывающих экспериментальные данные; распараллеливание обратной задачи. В результате вычислительного эксперимента найдены кинетические параметры. На основе стандарта OpenMP разработан пакет прикладных программ для решения обратных задач химической кинетики. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 12-07-00324).

Ключевые слова: кинетическая модель, обыкновенные нелинейные дифференциальные уравнения, вычислительный эксперимент, многоядерные системы, OpenMP

1. Введение

Обратные задачи химической кинетики относятся к таким физико-химическим задачам, которые предполагают значительный объем вычислений [1]. Сегодня уже предложены решения данной проблемы с использованием различных методов распараллеливания: кластерные системы и видеокарты [2]-[3]. В то же время доступ к суперкомпьютерам в наше время ограничен. С другой стороны возрастает распространенность вычислительных машин с многоядерными процессорами, что увеличивает их применение в научных исследованиях. Использование многоядерных систем в физико-химических расчетах является на сегодня весьма актуальной задачей.

Целью настоящей работы является разработка методологии построения кинетических моделей с использованием параллельных вычислений на многоядерных системах. В качестве объекта исследования выбрана реакция получения метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты. При решении поставленной проблемы возникают следующие задачи: построение и анализ математической модели; определение численных значений кинетических параметров, описывающих экспериментальные данные; распараллеливание обратной задачи химической кинетики.

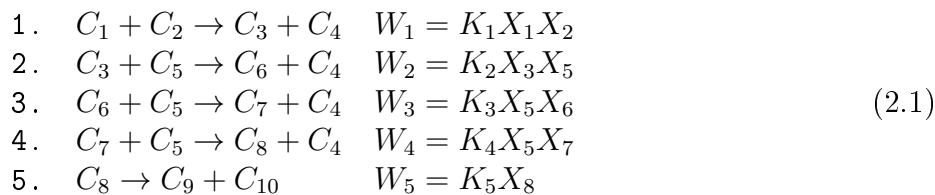
2. Математическое описание

На основе анализа экспериментальных данных предложен следующий механизм протекания реакции образования метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты

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

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

[4]:



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

Кинетические уравнения схемы превращений (2.1) проанализированы в рамках закона действующих масс. Корректным описанием лабораторного реактора является модель идеального смешения, уравнения материального баланса которой представляются системой (2.2)-(2.3):

$$\frac{d\bar{N}}{dt} = F_N, \quad F_N = \frac{1}{V_o} \sum_{j=1}^5 \delta_j \omega_j, \quad \delta_j = \sum_{i=1}^{10} \nu_{ij}, \tag{2.2}$$

$$\frac{dX_i}{dt} = \frac{F_i - X_i F_N}{\bar{N}}, \quad F_i = \frac{1}{V_o} \sum_{j=1}^5 \nu_{ij} \omega_j. \tag{2.3}$$

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

Правые части системы (2.2)-(2.3) имеют вид:

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

3. Алгоритм распараллеливания

Расчет кинетических параметров реакции получения метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты — длительный процесс. Для ускорения решения обратной задачи была разработана программа на языке Фортран с многопоточным кодом OpenMP.

OpenMP (OpenMulti-Processing) — открытый стандарт для распараллеливания программ. Описывает совокупность директив компилятора, библиотечных процедур и переменных окружения, которые предназначены для программирования многопоточных приложений на многопроцессорных системах с общей памятью.

При решении обратной кинетической задачи генерируется набор из n исходных констант скоростей стадий. Существует 2^n вариантов изменения набора данных в сторону увеличения или уменьшения на заданный шаг. В таблице 1 приведены все возможные варианты изменения набора констант при $n = 5$.

Таблица 1. Варианты изменения набора констант при $n = 5$

$\text{№}/K_j$	K_1	K_2	K_3	K_4	K_5
1	+	+	+	+	+
2	+	+	+	+	-
3	+	+	+	-	+
4	+	+	+	-	-
5	+	+	-	+	+
6	+	+	-	+	-
7	+	+	-	-	+
8	+	+	-	-	-
9	+	-	+	+	+
10	+	-	+	+	-
11	+	-	+	-	+
12	+	-	+	-	-
13	+	-	-	+	+
14	+	-	-	+	-
15	+	-	-	-	+
16	+	-	-	-	-
17	-	+	+	+	+
18	-	+	+	+	-
19	-	+	+	-	+
20	-	+	+	-	-
21	-	+	-	+	+
22	-	+	-	+	-
23	-	+	-	-	+
24	-	+	-	-	-
25	-	-	+	+	+
26	-	-	+	+	-
27	-	-	+	-	+
28	-	-	+	-	-
29	-	-	-	+	+
30	-	-	-	+	-
31	-	-	-	-	+
32	-	-	-	-	-

Для всех комбинаций набора решается прямая кинетическая задача. Решение прямых задач распараллеливается на все доступные ядра [5].

Набор с наиболее удовлетворяющими решениями выбирается как исходный набор констант скоростей стадий. Для нового набора констант выполняют такие же операции, что и для предыдущего. Процесс поиска оптимальных кинетических параметров останавливают при достижении заданной точности. В качестве критерия отклонения расчетных и экспериментальных данных выбран следующий функционал: $EE = |X_{rasch} - X_{eksp}|$.

4. Результаты вычислительного эксперимента

При распараллеливании решения обратной кинетической задачи на 2 ядра расчеты выполняются быстрее на 35 – 40%, на 4 ядра – на 50 – 55%.

Сравнение расчетных и экспериментальных данных показано в таблице 2. Разработанная модель адекватно описывает экспериментальные наблюдения: расхождение расчетных и экспериментальных изменений концентраций во времени не превышает 7%.

Таблица 2. Сравнение расчетных и экспериментальных данных.

а) Температура опыта 105 °С

Время, ч	Опыт(X_1)	Расчет(X_1)	Опыт(X_9)	Расчет(X_9)
4	100	78,98	0	21,02
4,5	70	70	30	30
5	59,6	60,54	40,4	39,45
6	43	43	57	57

б) Температура опыта 110 °С

Время, ч	Опыт(X_1)	Расчет(X_1)	Опыт(X_9)	Расчет(X_9)
3	92,9	82,71	7,7	17,29
4	38	62,18	62	37,82
6	29	29	71	71

в) Температура опыта 115 °С

Время, ч	Опыт(X_1)	Расчет(X_1)	Опыт(X_9)	Расчет(X_9)
3	62,6	62,6	37,4	37,4
4	26,2	26,2	73,8	73,8
6	0	3,09	100	96,91

Система обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений (2.2)-(2.3) решалась с помощью модифицированного метода Кутты-Мерсона пятого порядка точности. Численные значения найденных констант и энергий активации приведены в таблице 3. Константы K_i (ч⁻¹) являются некоторыми приведенными величинами, которые имеют размерность обратного времени и связаны с истинными константами k_i (л · моль⁻¹ · ч⁻¹) соотношениями: $K_i = k_i \cdot C_o$ ($i = 1 - 4$), $K_5 = k_5$.

Таблица 3. Найденные кинетические параметры

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

Выводы:

1. Разработан метод построения кинетических моделей с использованием параллельных вычислений на многоядерных системах.
2. Построена кинетическая модель реакции получения метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты.
3. Осуществлено распараллеливание обратной кинетической задачи, при использовании 4 ядер было достигнуто 2-кратное ускорение.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Слинько М.Г., *Основы и принципы математического моделирования каталитических процессов*, Ин-т катализа им. Борескова СО РАН, Новосибирск, 2004, 488 с.
2. Линд Ю.Б., Губайдуллин И.М., Мулюков Р.А., “Методология параллельных вычислений для решения задач химической кинетики и буровой технологии”, *Системы управления и информационные технологии*, 2009, № 2(36), 44-49.
3. Юнусов А.А., Губайдуллин И.М., Файзуллин М.Р., “Анализ алгоритмов решения задач химической кинетики с использованием GPGPU”, *Журнал Средневолжского математического общества*, **12:3** (2010), 146-151.
4. Хуснутдинов Р.И., Байгузина А.Р., Мукминов Р.Р., Ахметов И.В., Губайдуллин И.М., Спивак С.И., Джемилев У.М., “Новый метод синтеза эфиров 2-пирролкарбоновой и 2,5-пирролдикарбоновой кислот реакцией пирролов с CCl_4 и алифатическими спиртами под действием Fe-содержащих катализаторов”, *Журнал органической химии*, **46:7** (2010), 1054-1060.
5. Антонов А.С., *Параллельное программирование с использованием технологии OpenMP*, Изд-во МГУ, М., 2009, 77 с.

Development of kinetic models using parallel computing on multicore systems

© I. V. Akhmetov³, I. M. Gubaydullin⁴

Abstract. It was developed of kinetic model of reaction of 5-acetyl-2-pyrrole carbonic methyl ether production using parallel computing on multicore systems.

Following tasks:

- Development and analysis of mathematical models;
- Determination of the numerical values of the kinetic parameters describing the experimental data;
- Paralleling the inverse problem.

As a result of computer simulation found kinetic parameters. Based on the OpenMP standard software package designed for the solution of inverse problems of chemical kinetics. This work are supported by RFBR grant (project № 12-07-00324).

Key Words: kinetic model, ordinary nonlinear differential equations, computational experiment, multicore systems, OpenMP

³ Graduate, Institute of Petrochemical and Catalysis, Ufa; ilnur-av@mail.ru

⁴ Senior Researcher, Institute of Petrochemical and Catalysis, Ufa; irekmars@mail.ru

УДК 547.913

Построение кинетической модели гидрокрекинга тяжелых нефтяных остатков на основе групповых компонентов

© А. В. Балаев¹, Д. А. Дель Торо Фонсека²

Аннотация. В работе предложена кинетическая модель, разработанная на основе групповых компонентов. Выбор компонентов изостроения выбирался на основе минимума энергии Гиббса. Предложено 9 групповых компонентов и соответствующая им схема химических превращений, включающая 12 реакций. При обработке экспериментальных данных, приведенных в литературе, решена обратная кинетическая задача и найдены численные значения кинетических параметров.

Ключевые слова: кинетическая модель, относительное изменение числа молей, групповые компоненты, система обыкновенных дифференциальных уравнений, кинетические параметры.

В настоящее время в процессах нефтепереработки наблюдается тенденция к переработке тяжелых, высокосмолистых и высокосернистых нефтей и нефтяных остатков, что способствует увеличению выхода моторных топлив и повышению их качества.

В 1992 году вступил в силу стандарт Euro I, ограничивающий выбросы двигателей автотранспорта. Практически ежегодно увеличиваются ограничения по выбросам в атмосферу оксида углерода (CO), углеводородов (CH), оксидов азота (NO_x) и серы (S). Так, действующий с 01.09.2009 Euro V ограничивает содержание серы в бензине до 0, а в дизельном топливе - до 10 ppm. Кроме других ограничений, в соответствии с современными стандартами, должны быть заменены ароматические и олефиновые углеводороды, обычно добавляемые в бензин для повышения октанового числа, на парафиновые и нафтеновые углеводороды [1].

Современные НПЗ оснащаются дополнительным количеством установок, реализующих вторичные процессы и углубляющих переработку нефти, чтобы выпускать современную продукцию. Одним из таких процессов является гидрокрекинг - важный вторичный каталитический процесс разложения тяжелого нефтяного сырья в дополнительные количества низкокипящих дистиллятов (бензин, керосин, дизельное топливо) в присутствии водорода при высоких температурах и давлениях. Установки гидрокрекинга перерабатывают широкий диапазон сырья - от нафталиновых углеводородов до тяжелых нефтяных остатков и выпускают чистые дистиллятные продукты: бензин, керосин, дизельное топливо с очень низким содержанием серы, азота и ароматических углеводородов.

Трудность переработки остаточного и битуминозного сырья заключается в наличии большого количества углеводородов (свыше 90 групп) в таком сырье.

Для понимания физико-химической сущности каталитической реакции, последующего математического моделирования каталитического процесса и определения условий его промышленной реализации необходимы, прежде всего, разработка его кинетической и математической моделей [2],[3].

Для задач последующего моделирования каталитических процессов и реакторов детальная разработка на кинетическом уровне становится определяющей, поскольку ки-

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

² Магистрант, Башкирский государственный университет, г. Уфа; souldel@yandex.ru

нетические уравнения являются источниками членами дифференциальных уравнений материального и теплового балансов.

Кинетическая модель процесса представляет собой совокупность элементарных стадий, реакций и уравнений, характеризующих зависимость скорости химического превращения от параметров реакции: давления, температуры, концентраций реагентов и др. Эти зависимости определяются на основе экспериментальных данных в области изменения параметров реакции, включая их возможные значения в промышленных условиях.

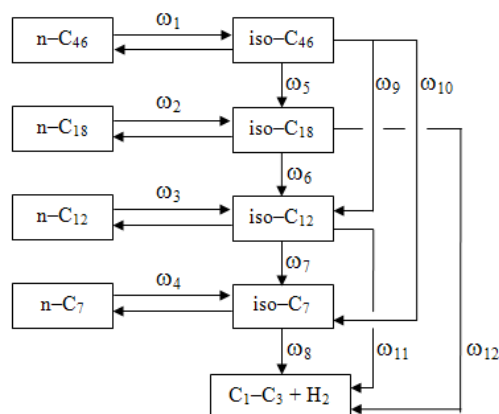
Предыдущими исследователями [4]-[7] составлялись кинетические модели гидрирования сложного сырья на основе фракций, содержащихся в сырье и в продуктах, а именно, сжиженные газы ($C_1 - C_4$), легкая ($C_5 - 80^\circ C$) и тяжелая ($80 - 150^\circ C$) нафтенотенные фракции, реактивное ($150 - 290^\circ C$) и дизельное топливо ($290 - 370^\circ C$), непревращенный остаток ($370^\circ C$), границами которых являются пределы выкипания. При гидрировании используют бифункциональные катализаторы, на кислотных центрах которых проходят реакции изомеризации и крекинга, а на металлических центрах - реакции гидрирования и дегидрирования, кроме этого, проходят реакции гибридного сдвига, метильного сдвига, деалкилирования, ациклический β -раскол, экзоциклический β -раскол, эндоциклический β -раскол, открытие и насыщение кольца, а также водородное циклопропанирование в цепи и в кольце.

Сырье гидрокрекинга обычно состоит из парафинов, нафтенотенных, ароматических и нафтенотенноароматических углеводородов, а также серо-, кислород-, азот- и металл- содержащих гетеросоединений. Согласно последним кинетическим моделям в сырье гидрокрекинга $C_3 - C_{40}$ содержится 38 индивидуальных н-парафиновых углеводородов - ($C_3 - C_{40}$), 37 индивидуальных изо-парафиновых - ($C_4 - C_{40}$), 36 индивидуальных мононафтенотенных - ($C_5 - C_{40}$), 31 динафтенотенный - ($C_{10} - C_{40}$), 27 тринафтенотенных - ($C_{14} - C_{40}$), 23 тетранафтенотенных - ($C_{18} - C_{40}$), 35 моноароматических углеводородов - ($C_5 - C_{40}$), 31 диароматический - ($C_{10} - C_{40}$), 27 триароматических - ($C_{14} - C_{40}$), 23 тетраароматических - ($C_{18} - C_{40}$), 31 нафтенотенно-моноароматических - ($C_{10} - C_{40}$), 27 нафтенотенно-диароматических - ($C_{14} - C_{40}$), 23 нафтенотенно-триароматических - ($C_{18} - C_{40}$), 27 динафтенотенно-моноароматических - ($C_{14} - C_{40}$), 23 динафтенотенно-диароматических - ($C_{18} - C_{40}$), 23 тринафтенотенно-диароматических - ($C_{18} - C_{40}$), всего 462 компонента.

Разработка надежной кинетической модели гидрокрекинга тяжелых нефтяных остатков, например, вакуумного газойля, связана с рядом трудностей. Прежде всего, с тем обстоятельством, что продукты гидрогенолиза представляют собой широкую смесь углеводородов нормального и изостроения $C_3 - C_{46}$ [4]-[7].

Наиболее приемлемый путь уменьшения размерности системы - дифференциация состава по групповым псевдокомпонентам и создание на их основе кинетики групповых компонентов [8]. Объединение индивидуальных соединений, следуя работам [4]-[7], позволило выделить 9 групповых компонентов и разработать кинетическую модель, включающую 12 стадий химических превращений групповых компонентов.

Гипотетическая схема химических реакций для выделенных групповых компонентов приведена на рисунке 1.1:



Р и с у н о к 1.1

Схема химических превращений процесса гидрокрекинга тяжелого вакуумного газойля для выделенных групповых компонентов

Выбор строения изо-компонентов осуществлялся из условия минимума стандартной энергии Гиббса, расчет которой проводился по методикам монографии [9]. Перебор возможных структур проводился методом параллельных вычислений на четырехядерном компьютере. Стехиометрические уравнения схемы рис. 1.1 и соответствующие ей кинетические уравнения представлены в таблице 10:

Таблица 10:

$x_1 \rightleftharpoons x_2$	$\omega_1 = k_1 x_1 - k_{-1} x_2$	$x_6 + 0.72 x_{10} \rightarrow 1.71 x_4$	$\omega_7 = k_7 x_6$
$x_3 \rightleftharpoons x_4$	$\omega_2 = k_2 x_3 - k_{-2} x_4$	$x_8 + 1.33 x_{10} \rightarrow 2.33 x_6$	$\omega_8 = k_8 x_8$
$x_5 \rightleftharpoons x_6$	$\omega_3 = k_3 x_5 - k_{-3} x_6$	$x_2 + 2.83 x_{10} \rightarrow 3.83 x_4$	$\omega_9 = k_9 x_2$
$x_7 \rightleftharpoons x_8$	$\omega_4 = k_4 x_7 - k_{-4} x_8$	$x_2 + 5.57 x_{10} \rightarrow 6.57 x_6$	$\omega_{10} = k_{10} x_2$
$x_2 + 3.11 x_{10} \rightarrow 2.56 x_4$	$\omega_5 = k_5 x_2$	$x_4 + 5 x_{10} \rightarrow 6 x_9$	$\omega_{11} = k_{11} x_4$
$x_4 + 0.5 x_{10} \rightarrow 1.5 x_6$	$\omega_6 = k_6 x_6$	$x_6 + 3 x_{10} \rightarrow 4 x_6$	$\omega_{12} = k_{12} x_6$

Где $X_i = C_i/C_0$ - концентрации компонентов, мольные доли; C_i и C_0 - концентрации компонентов и начальная мольная плотность реакционной смеси, кмоль/м³; $x_1 = n-C_{46}$, $x_2 = iso-C_{46}$ (суммарные аналоги компонентов C_{21+}), $x_3 = n-C_{18}$, $x_4 = iso-C_{18}$ (суммарные аналоги компонентов $C_{16}-C_{20}$), $x_5 = n-C_{12}$, $x_6 = iso-C_{12}$ (суммарные аналоги компонентов $C_{10}-C_{15}$), $x_7 = n-C_7$, $x_8 = iso-C_7$ (суммарные аналоги компонентов C_4-C_9), $x_9 = C_3$ (суммарный аналог компонентов C_1-C_3), $x_{10} = H_2$; $i = W_j/C_0$ - приведенные скорости химического превращения, ч⁻¹; $i = W_j$ - скорости химических реакций, кмоль/м³.

Математическое описание, использовавшееся для решения прямой кинетической задачи, представляется системой уравнений материального баланса (1.1)-(1.2). Уравнения (1.1) отражают тот факт, что реакции протекают с изменением числа молей реакционной среды. Следствием этого является неравенство нулю хотя бы одного суммарного стехиометрического коэффициента δ_j .

$$\frac{1}{S} \frac{dN}{dt} = \sum_j \delta_j W_j = F_N, \quad \delta_j = \sum_i \nu_{ij}, \quad j = 1 \dots 12, \quad (1.1)$$

$$\frac{1}{S} \frac{dx_i}{dl} = \frac{F_i - x_i F_N}{N}, \quad F_i = \sum_j \nu_{ij} W_j, \quad i = 1 \dots 10, \quad (1.2)$$

граничные условия при $l = 0 : x_i = x_i^0, N = N_0$;

где: x_i - концентрации компонентов, мольные доли; ν_{ij} - стехиометрические коэффициенты, определяемые схемой реакций в таблице 10; N - мольная скорость подачи реакционной смеси, кмоль/ч; S - площадь поперечного сечения реактора, м²; l - осевая координата, м.

Экспериментальные данные, использовавшиеся при математической обработке, взяты из работ [5]-[7]. Найденные при решении обратной кинетической задачи численные значения кинетических параметров представлены в таблице 11.

Таблица 11: Численные значения кинетических параметров реакции гидрокрекинга вакуумного газойля на цеолитном катализаторе

№ константы	$k_i(410^\circ\text{C}), \text{ч}^{-1}$	$E_i, \text{ккал/моль}$	№ константы	$k_i(410^\circ\text{C}), \text{ч}^{-1}$	$E_i, \text{ккал/моль}$
1	0.79	44.7	9	0.014	37.8
2	0.705	43.5	10	0.019	49.6
3	0.095	39.7	11	0.016	31.6
4	0.045	31.1	12	0.024	45.0
5	0.446	44.3	13 (k_{-1})	0.014	49.2
6	0.301	39.4	14 (k_{-2})	0.019	48.4
7	0.263	36.2	15 (k_{-3})	0.011	45.7
8	0.033	31.0	16 (k_{-4})	0.0062	43.4

Поскольку реакционная смесь содержит большой мольный избыток водорода (x_{10}), то его концентрация включена в кинетические константы уравнений $\omega_5 \dots \omega_{12}$, поэтому все константы имеют размерность ч^{-1} .

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Путек С., Грагнани А., "Получение малосернистых топлив из тяжелого сырья на установке гидрокрекинга остаточного сырья", *Нефтегазовые технологии*, 2005, № 9, 79–82.
2. Слинько М.Г., "Принципы и методы технологии каталитических процессов", *Теор. основы хим. технол.*, **33**:5 (1999), 528–538.
3. Слинько М.Г., "Научные основы теории каталитических процессов и реакторов", *Кинетика и катализ*, **41**:6 (2000), 933–946.
4. Valavarasu G., Bhaskar M., Balaraman K.S., "Mild Hydrocracking - A Review of the Process, Catalysts, Reactions, Kinetics, and Advantages", *Petroleum Science and Technology*, **21**:7-8 (2003), 1185–1205.
5. Pellegrini L. Pellegrini et al., "The «all components hydrocracking model»", *Chemical Engineering Science*, **62**:18-20 (2007), 5013–5020.

6. Pellegrini L. Pellegrini et al, "Modelling of hydrocracking with vapour-liquid equilibrium", *Chemical Engineering Science*, **63**:17 (2008), 4285-4291.
7. Kumar H., Froment G.F., "Mechanistic Kinetic Modeling of the Hydrocracking of Complex Feedstocks, such as Vacuum Gas Oils", *Industrial and Engineering Chemistry Research*, **46**:18 (2007), 5881-5897.
8. Froment G. F., "Single Event Kinetic Modeling of Complex Catalytic Processes", *Catalysis Reviews*, **47**:1 (2005), 83-124.
9. Р. Рид, Дж. Праусниц, Т. Шервуд, *Свойства газов и жидкостей*, Химия, Л., 1982, 592 с.

Creation of kinetic model of hydrocracking the heavy oil remains on the basis of group components.

© A. V. Balaev³, D. A. Del Toro Fonseca⁴

Abstract. In work the kinetic model developed on the basis of group components is offered. The choice of components of an isostructure got out on the basis of a minimum of Gibbs energy. 9 group components and the scheme of chemical transformations including 12 reactions corresponding to them are offered. When processing the experimental data given in literature, the return kinetic task is solved and numerical values of kinetic parameters are found.

Key Words: kinetic model, relative change of mole number, group components, system of the ordinary differential equations, kinetic parameters.

³ Leading research associate of laboratory of mathematical chemistry, Institute of petrochemistry and catalysis RAS, Ufa; avbalaev@gmail.com

⁴ Master, Bashkir state university, Ufa; souldel@yandex.ru

УДК 517.9

Учет дезактивации катализатора при построении математического описания химического процесса

© Д. В. Берзина¹, С. А. Мустафина²

Аннотация. В работе рассмотрены математические модели каталитических процессов с учетом дезактивации катализатора. На примере реакции дегидрирования циклогексана построено математическое описание и решена прямая задача.

Ключевые слова: дезактивация катализатора, каталитические реакции.

1. Введение

Важнейшими свойствами катализаторов являются: активность, селективность и стабильность. Первые два обеспечивают скорость и "качество" протекания каталитической реакции, а третье - устойчивость этих показателей в течение срока службы катализатора. Дезактивация катализаторов снижает эти свойства под действием разнообразных явлений и является одной из важнейших практических проблем промышленного катализа. Это объясняется значительными трудностями при проведении теоретических и экспериментальных исследований явлений дезактивации, такими как:

- Дезактивация катализаторов происходит, как правило, в результате одновременного действия нескольких элементарных процессов. Это затрудняет интерпретацию результатов и выявление индивидуальных вкладов отдельных процессов.
- Все явления дезактивации вызывают значительные изменения активной поверхности.
- Процессы дезактивации протекают значительно медленнее целевых реакций, поэтому соответствующие эксперименты требуют много времени и материальных затрат на исследование дезактивации.
- Многие теоретические проблемы механизмов и кинетики дезактивации остаются нерешенными. Это существенно затрудняет интерпретацию экспериментальных данных и создание моделей, способных прогнозировать поведение катализаторов [2].

Для практической точки зрения важно, с какой скоростью происходит дезактивация и какие параметры процесса на нее влияют. Ответ на этот вопрос дает кинетика дезактивации катализаторов. Поэтому кинетические уравнения должны быть более строгими для получения наиболее надежных математических моделей [3].

¹ Аспирант кафедры математического моделирования, Стерлитамакская государственная педагогическая академия, г. Стерлитамак.

² Заведующий кафедрой математического моделирования, Стерлитамакская государственная педагогическая академия, г. Стерлитамак.

2. Учет дезактивации катализатора на примере процесса дегидрирования циклогексана

Рассмотрим применение математического моделирования на примере процесса дегидрирования циклогексана. Экспериментальные данные получены в работе Ю.К. Деманова [1] для безградиентного реактора с виброожиженным слоем катализатора Pt/Al_2O_3 , $T = 360^\circ$ $P_0 = 1$ атм. Состав сырья: циклогексан (CG) - 62,5 %, бензол (B) - 2,6%, метилциклопентан (MCP) - 26,7%, н-гексан ($n-C6$) - 7,8%. Соотношение водород/сырье $\lambda = 6,4$ моль/моль.

Скорость реакции

$$C_6H_{12} = C_6H_6 + 3H_2 \quad (2.1)$$

в условиях эксперимента подчиняется уравнению первого порядка

$$r = kP_{CG}^0(1 - X); P_{CG}^0 = 1/(1 + \lambda) = 0,135 \quad (2.2)$$

где r - скорость реакции; k - константа скорости реакции; P_{CG}^0 - начальное парциальное давление циклогексана; X - степень превращения циклогексана; λ - теплопроводность;

Дезактивация происходила в результате образования кокса из метилциклопентана и н-гексана, но степень их превращения не превышала 1-2%. Таким образом, эксперименты, с одной стороны, обеспечивали независимый тип дезактивации, а с другой - позволяли контролировать падение активности по уменьшению степени превращения циклогексана (X). Избыток водорода (как и в промышленном процессе риформинга) обеспечивал частичную саморегенерацию катализатора, $P_{H_2} = 0,865$ атм [2].

Безградиентные условия протекания реакций обеспечиваются в реакторах идеального смешения. Для них справедливо общее уравнение материального баланса:

$$C_{i0} - C_i = -\tau W_i; W_i = \sum \nu_{ij} r_j, \quad (2.3)$$

где C_i - концентрации; τ - время контакта; W_i - скорость образования i -го вещества; r_j - скорость j -й реакции; ν_{ij} - стехиометрический коэффициент i -го вещества в j -й реакции [2].

Так как в рассматриваемом процессе реакция единственная, то $W_i = \nu_i r$, и уравнение (2.3) в терминах степени превращения исходного вещества A будет иметь вид:

$$X = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}} = \frac{\tau \nu_A}{C_{A0}} r(\bar{C}). \quad (2.4)$$

Кроме того, $r(\bar{C})$ для единственной реакции всегда можно представить функцией степени превращения:

$$r(\bar{C}) = kC_{A0}f(X). \quad (2.5)$$

С учетом дезактивации $r = r^0\alpha$ или $r(\alpha, \bar{C}) = r^0(\bar{C})\alpha$. Тогда при $\nu_A = -1$ из (2.4) и (2.5) получаем

$$X(t) = k\tau f(X)\alpha(t). \quad (2.6)$$

Дополним математическое описание уравнением изменения активности: $\frac{d\alpha}{dt} = -\frac{r^0\omega_p}{\omega_j}\alpha$. Комплекс $\frac{r^0\omega_p}{\omega_j}$ также может быть выражен функцией степени превращения, и тогда уравнение дезактивации катализатора примет вид:

$$\frac{d\alpha}{dt} = -k_p\varphi(X)\alpha. \quad (2.7)$$

Экспериментально измеряемой величиной является степень превращения, поэтому уравнение (2.7) необходимо записать в терминах X , выразив α через X из уравнения (2.6) [2]. Для реакции типа $A \rightarrow B$ с кинетикой первого порядка $r = kC_A\alpha = kC_{A0}(1 - X)\alpha$ система (2.6) - (2.7) примет вид:

$$X(t) = k\tau(1 - X)\alpha, \quad (2.8)$$

$$\frac{d\alpha}{dt} = -k_p\varphi(X)\alpha. \quad (2.9)$$

Независимой дезактивации соответствует предельный случай $\varphi(X) = C_{AO} = const$. Соответственно математическое описание процесса дегидрирования циклогексана будет иметь вид:

$$\begin{cases} X = k\tau(1 - X)\alpha, \\ \frac{d\alpha}{dt} = -k_p(\alpha - \alpha_S)/(1 - \alpha_S). \end{cases} \quad (2.10)$$

Для полученного математического описания была решена прямая задача явными методами Эйлера и Рунге-Кутты с начальными данными $\alpha_S = 0,35$, $k_P = 0,01 \text{ мин}^{-1}$. Результаты вычислений представлены в таблице 1.

t, мин.	Метод Эйлера	Метод Рунге-Кутты	Экспериментальные данные
0	$\alpha = 1; X = 0,535$	$\alpha = 1; X = 0,535$	$\alpha = 1; X = 0,535$
100	$\alpha = 0,4879; X = 0,3591$	$\alpha = 0,4895; X = 0,3599$	$\alpha = 0,47; X = 0,36$
200	$\alpha = 0,3792; X = 0,3037$	$\alpha = 0,3799; X = 0,3041$	$\alpha = 0,38; X = 0,30$
300	$\alpha = 0,3562; X = 0,2906$	$\alpha = 0,3564; X = 0,2908$	$\alpha = 0,35, X = 0,29$

Таблица 1: Расчет активности катализатора и степени превращения циклогексана

Анализ результатов вычислительного эксперимента с опытными данными позволяет сделать вывод, что разработанные математическое описание и алгоритм могут быть использованы для расчета параметров процесса с учетом дезактивации катализатора.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Островский Н. М., Деманов Ю. К., "Дезактивация катализаторов риформинга коксом", *Химия и технология топлив и масел*, 1991, № 2, 35–38.
2. Островский Н. М., *Кинетика дезактивации катализаторов: Математические модели и их применение*, Наука, М., 2001.
3. Яблонский Г. С., Быков В. И., Горбань А. Н., *Кинетические модели каталитических реакций*, Наука, Новосибирск, 1983.

Accounting of the catalyst activity in constructing the mathematical description of chemical process.

© D. V. Berzina³, S. A. Mustafina⁴

Abstract. In the article the mathematical model of catalytic processes with a view catalyst activity. On the example of the reaction of dehydrogenation cyclohexane constructed mathematical description, and the primal problem is solved.

Key Words: the activity of the catalyst, catalytic reactions.

³ Graduate student of mathematical modeling, Sterlitamak State Pedagogical Academy, Sterlitamak.

⁴ Professor head of mathematical modelling chair, Sterlitamak State Pedagogical Academy, Sterlitamak.

УДК 517.938

О внутренней динамике диффеоморфизмов Смейла-Виеториса

© Е. В. Жужома¹, Н. В. Исаенкова²

Аннотация. Статья посвящена изучению внутренней динамики нового класса диффеоморфизмов Смейла-Виеториса замкнутых n -мерных многообразий. Доказано, что ограничение диффеоморфизма Смейла-Виеториса на множестве $T^k \times N \subset M^n$, где T^k – k -мерный тор, $k \geq 1$, N – многообразие размерности $n - k$ с непустой границей, сопряжено обратному пределу d -накрытия k -мерного тора.

Ключевые слова: топологическая сопряженность, неблуждающее множество, обратный предел

Одной из главных задач качественной теории динамических систем является задача топологической сопряженности, а именно, нахождение необходимых и достаточных условий существования гомеоморфизма многообразия, переводящего орбиты одного диффеоморфизма в орбиты другого диффеоморфизма, с наличием коммутативной диаграммы отображений.

Для удобства читателя напомним некоторые определения понятий, которые используются в данной статье. Пусть преобразования $f : M \rightarrow M$, $g : N \rightarrow N$ имеют инвариантные множества Λ_f , Λ_g соответственно. Ограничения $f|_{\Lambda_f}$, $g|_{\Lambda_g}$ этих преобразований на их инвариантные множества называются *сопряженными*, если существует гомеоморфизм $\varphi : \Lambda_f \rightarrow \Lambda_g$, такой, что $\varphi \circ f|_{\Lambda_f} = g \circ \varphi|_{\Lambda_f}$, то есть выполняется следующая коммутативная диаграмма

$$\begin{array}{ccc} \Lambda_f & \xrightarrow{f} & \Lambda_f \\ \downarrow \varphi & & \downarrow \varphi \\ \Lambda_g & \xrightarrow{g} & \Lambda_g \end{array}$$

Пусть $T^k = \underbrace{S^1 \times \dots \times S^1}_k$, $k \geq 2$ – k -мерный тор. d -накрытием ($d \geq 2$) называется

сохраняющее ориентацию d -листное накрытие k -мерного тора $g : T^k \rightarrow T^k$ такое, что для любой точки $t \in T^k$ полный прообраз $g^{-1}(t)$ состоит из d различных точек $t_1, t_2, \dots, t_d \in T^k$, для которых выполняются равенства $g(t_1) = \dots = g(t_d)$.

Обозначим через $\prod_{i \in \mathbb{Z}_0^+} T_i^k$ прямое произведение счетного семейства k -мерных торов $T_i^k = T^k$, наделенное тихоновской топологией, где $\mathbb{Z}_0^+ = \mathbb{N} \cup \{0\}$ – множество целых неотрицательных чисел. В этой топологии база образована множествами $\prod_{i \in \mathbb{Z}_0^+} V_i$, где V_i открыты в T_i^k , и только для конечного множества индексов i множества V_i отличны от T_i^k , см. [2], стр. 155. Точками множества $\prod_{i \in \mathbb{N}} T_i^k$ являются последовательности $\{t_i\}_0^\infty$, где $t_i \in T_i^k$.

Пусть $\prod_g$ подмножество множества $\prod_{i \in \mathbb{Z}_0^+} T_i^k$, состоящее из последовательностей $\{t_i\}_0^\infty$, где $t_i = g(t_{i+1})$ при всех $i \geq 0$. Топология на $\prod_g$ индуцируется топологией на

¹ Профессор кафедры математики, Нижегородский государственный педагогический университет им. Козьмы Минина, Нижний Новгород; zhuzhoma@mail.ru.

² Старший преподаватель, Нижегородский государственный педагогический университет им. Козьмы Минина, Нижний Новгород; nisaenkova@mail.ru.

Авторы благодарят РФФИ, гранты 11-01-12056-офи-м-2011, 12-01-00672 и грант Правительства РФ 11.G34.31.0039 за финансовую поддержку.

$\prod_{i \in \mathbb{Z}_0^+} T_i^k$. Определим на $\prod_g$ отображение $\hat{g} : \prod_g \rightarrow \prod_g$, положив

$$\hat{g}(\{t_0, \dots, t_i, \dots\}) = \{g(t_0), t_0, \dots, t_i, \dots\}.$$

Следуя [4] (см. также [3]), пространство $\prod_g$ с отображением $\hat{g}$ называется *обратным пределом преобразования g* .

Диффеоморфизм $f : M^n \rightarrow M^n$ замкнутого ориентированного n -мерного многообразия M^n называется *диффеоморфизмом Смейла-Виеториса* (см. [1]), если существует n -мерное подмногообразие $T^k \times N \subset M^n$, где T^k – k -мерный тор, $k \geq 1$, N многообразие размерности $n - k$ с непустой границей, и ограничение $f|_{T^k \times N} \stackrel{\text{def}}{=} F$ является диффеоморфизмом $F : T^k \times N \rightarrow F(T^k \times N) \subset T^k \times N$ на свой образ, который удовлетворяет следующим условиям:

- F имеет вид

$$F(t, z) = (g(t), w(t, z)), \quad t \in T^k, \quad z \in N, \quad (1.1)$$

где $g : T^k \rightarrow T^k$ – d -накрытие класса, гомотопное растягивающемуся отображению $E_d : T^k \rightarrow T^k$ степени $d \geq 2$;

- при фиксированном $t \in T^k$ преобразование $w|_{\{t\} \times N} : \{t\} \times N \rightarrow T^k \times N$ является равномерно сжимающим вложением

$$\{t\} \times N \rightarrow \text{int}(\{g(t)\} \times N), \quad (1.2)$$

т.е. существуют константы $0 < \lambda < 1$, $C > 0$ такие, что

$$\text{diam}(F^n(\{t\} \times N)) \leq C\lambda^n \text{diam}(\{t\} \times N), \quad \forall n \in \mathbb{N}. \quad (1.3)$$

Пусть диффеоморфизм f удовлетворяет условиям 1.1-1.3, рассмотрим пересечение

$$\bigcap_{l \geq 0} F^l(T^k \times N) \stackrel{\text{def}}{=} \mathfrak{M}.$$

Основная цель настоящей статьи – исследовать внутреннюю динамику диффеоморфизмов Смейла-Виеториса, удовлетворяющих условиям 1.1-1.3, на множестве $\mathfrak{M}$.

Л е м м а 1.1. *Множество $\mathfrak{M}$ инвариантно относительно F .*

Д о к а з а т е л ь с т в о. Учитывая условие (1.3), получаем $F^l(T^k \times N) \supset F^{l+1}(T^k \times N)$. Тогда

$$F(\mathfrak{M}) = F\left(\bigcap_{l \geq 0} F^l(T^k \times N)\right) = \bigcap_{l \geq 0} F^{l+1}(T^k \times N) = \mathfrak{M}.$$

Аналогичным образом, $\mathfrak{M} = \bigcap_{l \geq 0} F^l(T^k \times N) = \bigcap_{l \geq 1} F^l(T^k \times N)$ и получаем

$$F^{-1}(\mathfrak{M}) = F^{-1}\left(\bigcap_{l \geq 0} F^l(T^k \times N)\right) = \bigcap_{l \geq 1} F^l(T^k \times N) = \mathfrak{M}.$$

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

Множество $\{t\} \times N \stackrel{\text{def}}{=} N_t$ назовем t -слоем, где $t \in T^k$. Каждый слой естественным образом отождествляется с N посредством проекции $p_2 : T^k \times N \rightarrow N$. Согласно (1.2), диффеоморфизм F переводит t -слой в $g(t)$ -слой, который будем называть образом исходного слоя. Отметим, что так как g – d -накрытие и имеет степень $d \geq 2$, то для любой

точки $t \in T^k$ полный прообраз $g^{-1}(t)$ состоит из d различных точек. Пусть $t_1, t_2, \dots, t_d \in T^k$ попарно различны и $g(t_1) = \dots = g(t_d)$. Тогда

$$F(N_{t_i}) \cap F(N_{t_j}) = \emptyset, \quad i \neq j, \quad 1 \leq i, j \leq d, \quad (1.4)$$

т.е. образы слоев $F(N_{t_1}), \dots, F(N_{t_d})$ попарно не пересекаются.

Докажем следующую лемму, необходимую для построения символической модели ограничения отображения F на множестве $\mathfrak{M}$.

Л е м м а 1.2. *Каждой точке $p \in \mathfrak{M}$ соответствует единственная последовательность точек $\{t_i\}_0^\infty$, $t_i \in T^k$, и соответствующая последовательность образов слоев $F^i(\{t_i\} \times N) = F^i(N_{t_i})$ таких, что*

- $p \in \dots \subset F^i(N_{t_i}) \subset \dots \subset F(N_{t_1}) \subset N_{t_0}$, $p = \bigcap_{i \geq 0} F^i(N_{t_i})$;
- $t_i = g(t_{i+1})$, $i \geq 0$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Лемма тривиальна для $i = 0$ и $i = 1$. Для фиксированной точки p существует единственная точка $t_0 \in T^k$ такая, что $p \in \{t_0\} \times N$. Положим $N_{t_0} = \{t_0\} \times N$. Из (1.1) существуют попарно различные $s_1, \dots, s_d \in T^k$ такие, что $g(s_1) = g(s_2) = \dots = g(s_d) = t_0$, а образы соответствующих слоев $F(\{s_i\} \times N)$ принадлежат слою N_{t_0} , $F(\{s_i\} \times N) \subset N_{t_0}$, $i = 1, \dots, d$. Согласно (1.4), множества $F(\{s_i\} \times N)$, $i = 1, \dots, d$, попарно не пересекаются. Поэтому существует единственное s_j такое, что $p \in F(\{s_j\} \times N)$. Положим $t_1 = s_j$, $N_{t_1} = \{t_1\} \times N$. Из 1.2 получаем $\{t_1\} \times N \rightarrow \text{int}(\{g(t_1)\} \times N)$. Таким образом, $p \in F(N_{t_1}) \subset N_{t_0}$ и $t_0 = g(t_1)$.

Аналогично, из (1.1) для точки t_1 существуют попарно различные $s'_1, \dots, s'_d \in T^k$ такие, что $g(s'_1) = g(s'_2) = \dots = g(s'_d) = t_1$ и $F^2(\{s'_i\} \times N) \subset F(\{t_1\} \times N)$. Образы $F^2(\{s'_i\} \times N)$ слоев $N_{s'_i}$, $i = 1, \dots, d$, попарно не пересекаются. Поэтому существует единственное s'_j такое, что $p \in F^2(\{s'_j\} \times N)$. Обозначим $t_2 = s'_j$, для которого выполняется $\{t_2\} \times N \rightarrow \text{int}(\{g(t_2)\} \times N)$, и $N_{t_2} = \{t_2\} \times N$. Тогда $p \in F^2(N_{t_2}) \subset F(N_{t_1}) \subset N_{t_0}$ и верны равенства $t_0 = g(t_1)$, $t_1 = g(t_2)$.

Пусть по предположению индукции существует единственная последовательность точек $\{t_l\}_0^{l-1}$, $t_l \in T^k$, и l слоев $F^l(\{t_l\} \times N) = F^l(N_{t_l})$ таких, что $p \in F^{l-1}(N_{t_{l-1}}) \subset \dots \subset F(N_{t_1}) \subset N_{t_0}$, где $N_{t_i} = \{t_i\} \times N$. Таким образом, $p \in \bigcap_{i \geq 0}^{l-1} F^i(N_{t_i})$. Из (1.1) означает, что существуют

$$s''_1, s''_2, \dots, s''_d \in T^k \text{ такие, что } g(s''_1) = g(s''_2) = \dots = g(s''_d) = t_{l-1},$$

и верны следующие включения $F^l(\{s''_i\} \times N) \subset F^{l-1}(N_{t_{l-1}})$, $i = 1, \dots, d$. Согласно (1.4), существует единственное s''_j такое, что $p \in F^l(\{s''_j\} \times N)$. Положим $t_l = s''_j$, $N_{t_l} = \{t_l\} \times N$. Тогда $p \in F^l(N_{t_l}) \subset F^{l-1}(N_{t_{l-1}}) \subset \dots \subset N_{t_0}$. Из построения вытекает, что $t_i = g(t_{i+1})$ для всех $i \geq 0$. Из (1.3) следует, что $\text{diam } F^i(N_{t_i}) = \text{diam } (F^i(\{t_i\} \times N)) \rightarrow 0$ при $i \rightarrow \infty$. Поэтому пересечение $\bigcap_{i \geq 0} F^i(N_{t_i})$ есть одноточечное множество, совпадающее с p .

Покажем, что для любой точки $p \in \mathfrak{M}$ последовательность точек $\{t_i\}_0^\infty$, $t_i \in T^k$ определяется единственным образом. Допустим, для точки p существуют две различные последовательности точек $\{t_i\}_0^\infty$, $t_i \in T^k$ и $\{t'_i\}_0^\infty$, $t'_i \in T^k$, т.е. найдется i , для которого $t_i \neq t'_i$. Это означает существование двух множеств $F^i(\{t_i\} \times N) = F^i(N_{t_i})$ и $F^i(\{t'_i\} \times N) = F^i(N_{t'_i})$, таких что $p \in F^i(N_{t_i})$ и $p \in F^i(N_{t'_i})$, но это противоречит условию (1.4), так как образы слоев N_{t_i} и $N_{t'_i}$ попарно не пересекаются $F(N_{t_i}) \cap F(N_{t'_i}) = \emptyset$, а поскольку F -диффеоморфизм, то $F^i(N_{t_i}) \cap F^i(N_{t'_i}) = \emptyset$.

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

Рассмотрим отображение $\hat{g} : \prod_g \rightarrow \prod_g$, являющееся обратным пределом d -листного накрытия k -мерного тора $T^k \rightarrow T^k$, где $\prod_g$ - множество последовательностей $\{t_i\}_0^\infty$ вида $t_i = g(t_{i+1})$ для всех $i \geq 0$, и $\hat{g}(\{t_0, \dots, t_i, \dots\}) = \{g(t_0), t_0, \dots, t_i, \dots\}$.

Л е м м а 1.3. $\hat{g}$ – взаимно однозначное отображение.

Д о к а з а т е л ь с т в о . Установим инъективность отображения $\hat{g}$. Для этого возьмем две различные последовательности $\{t_i\}_0^\infty, \{t'_i\}_0^\infty \in \prod_g$, т.е. существуют такие i, j , что $t_i \neq t'_j$. Отсюда и способа задания отображения $\hat{g}$ следует, что образы этих последовательностей $\hat{g}(\{t_i\}_0^\infty) \neq \hat{g}(\{t'_i\}_0^\infty)$.

Пусть $\{t_i\}_0^\infty = \{t_0, t_1, \dots, t_i, \dots\} \in \prod_g$, где $t_i = g(t_{i+1})$ при всех $i \geq 0$. Существует последовательность $\{t_1, \dots, t_i, \dots\} \in \prod_g$ которая при действии отображения $\hat{g}$, с учетом равенства $t_0 = g(t_1)$, переходит в исходную $\hat{g}(\{t_1, \dots, t_i, \dots\}) = \{g(t_1), t_1, \dots, t_i, \dots\} = \{t_0, t_1, \dots, t_i, \dots\}$, что и доказывает сюръективность этого отображения.

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

Л е м м а 1.4. Отображение $\hat{g}$ непрерывно.

Д о к а з а т е л ь с т в о . Пусть $\{r_0, \dots, r_i, \dots\} \in \prod_g$, и пусть U_ε – окрестность точки

$$\hat{g}(\{r_0, \dots, r_i, \dots\}) = \{g(r_0), r_0, \dots, r_i, \dots\}.$$

Согласно определению тихоновской топологии, не уменьшая общности, можно считать, что существуют некоторые $k \in \mathbb{Z}^+$ и сколь угодно малое $\varepsilon > 0$ такие, что для любой точки $\hat{g}(r') = \{g(r'_0), r'_0, \dots, r'_i, \dots\} \in U_\varepsilon$ выполняются неравенства:

$$|g(r_0) - g(r'_0)| < \varepsilon, \quad |r_i - r'_i| < \varepsilon \quad \text{для любого } i = 0, \dots, k-2.$$

Так как g непрерывно, то существует $\delta > 0$ такое, что $|r_0 - r'_0| < \delta$ влечет $|g(r_0) - g(r'_0)| < \varepsilon$. Ясно что, можно считать $\delta \leq \varepsilon$. Зададим окрестность U_δ точки $\{r_0, \dots, r_i, \dots\}$, положив $r' = \{r'_0, \dots, r'_i, \dots\} \in U_\delta$, если $|r_i - r'_i| < \delta$ для любого $i = 0, \dots, k-1$. Тогда $\hat{g}(U_\delta) \subset U_\varepsilon$.

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

Определим отображение $\theta : \mathfrak{M} \rightarrow \prod_g$ следующим образом. Согласно лемме 1.2., любой точке $p \in \mathfrak{M}$ соответствует единственная последовательность точек $\{t_0, t_1, \dots, t_i, \dots\}$ такая, что $t_i = g(t_{i+1})$, $i \geq 0$. Положим $\theta(p) = \{t_0, t_1, \dots, t_i, \dots\}$.

Л е м м а 1.5. Отображение θ – гомеоморфизм.

Д о к а з а т е л ь с т в о . Установим сперва инъективность отображения θ . Возьмем различные $p_1, p_2 \in \mathfrak{M}$. Согласно лемме 1.2., каждой точке p_i , $i = 1, 2$, соответствует последовательность образов $F^j(N_{t_j}^i)$ слоев $N_{t_j}^i = \{t_j^i\} \times N$ таких, что $p_i = \bigcap_{j \geq 0} F^j(N_{t_j}^i)$, где $i = 1, 2$. Поскольку $p_1 \neq p_2$ и диаметры слоев стремятся к нулю, то существует k такое, что

$$N_{t_0}^1 = N_{t_0}^2, F(N_{t_1}^1) = F(N_{t_1}^2), \dots, F^{k-1}(N_{t_{k-1}}^1) = F^{k-1}(N_{t_{k-1}}^2), F^k(N_{t_k}^1) \neq F^k(N_{t_k}^2),$$

где $N_{t_k}^1 = \{t_k^1\} \times N$ и $N_{t_k}^2 = \{t_k^2\} \times N$, поэтому $t_k^1 \neq t_k^2$ и, следовательно, $\theta(p_1) \neq \theta(p_2)$.

Докажем сюръективность отображения θ . Возьмем $\{t_0, t_1, \dots\} \in \prod_g$. Из $t_i = g(t_{i+1})$ и условия (1.3) вытекает что

$$\{t_0\} \times N \supset F(\{t_1\} \times N) \supset \dots \supset F^i(\{t_i\} \times N) \supset \dots$$

Так как $\text{diam}(F^i(\{t_i\} \times N)) \rightarrow 0$ при $i \rightarrow \infty$, то пересечение $\bigcap_{i \geq 0} F^i(\{t_i\} \times N)$ состоит ровно из одной точки, скажем p . Из определения множества $\mathfrak{M}$ следует, что $p \in \mathfrak{M}$. Таким образом, $\theta(p) = (t_0, t_1, \dots, t_i, \dots)$.

Докажем непрерывность отображения θ . Зафиксируем $\varepsilon > 0$, $r \in \mathbb{N}$ и рассмотрим окрестность точки $\theta(p)$. Согласно топологии на множестве $\prod_g$ окрестность определяется по правилу $U'(\theta(p)) = \{\{x_i\}_0^\infty \in \prod_g : |x_i - t_i| < \varepsilon, \text{ для } i = 0, \dots, r\}$.

Так как $\theta(p) = \{t_0, t_1, \dots, t_i, \dots\} \in \prod_g$, где $t_0 = g(t_1)$, $t_1 = g(t_2)$, $t_2 = g(t_3)$, $\dots$, $t_i = g(t_{i+1})$, $i \geq 0$, то $t_0 = g(t_1) = g^2(t_2) = \dots = g^i(t_i)$, $t_1 = g(t_2) = g^2(t_3) = \dots = g^{i-1}(t_i)$, $t_2 = g(t_3) = g^2(t_4) = \dots = g^{i-2}(t_i)$, $\dots$, $t_j = g^{i-j}(t_i)$ для всех $1 \leq j \leq i$ и некоторого i . Поэтому $\theta(p) = \{t_0, t_1, \dots, t_{i-1}, t_i, \dots\} = \{g^i(t_i), g^{i-1}(t_i), \dots, g(t_i), t_i, \dots\}$.

Поскольку для точки $\theta(p)$ в ее окрестности U' , заданной числами $r \in \mathbb{N}$ и $\varepsilon > 0$, выполняется равенство $t_{r-j} = g^j(t_r)$ для всех $1 \leq j \leq r$, а отображение g непрерывное, то существует такое $0 < \delta \leq \varepsilon$, что $|x_r - t_r| < \delta$ влечет $|x_i - t_i| < \varepsilon$ для всех $i = 0, \dots, r$.

Обозначим $N_{t,\delta} \stackrel{\text{def}}{=} [t - \delta, t + \delta] \times N_t$, где N_t - t -слой, $t \in T^k$. Пусть $U(p)$ окрестность точки $p \in \mathfrak{M}$. Тогда для любой точки $q \in U(p) \cap \mathfrak{M}$, в силу леммы 1.1., $\theta(q) = \{x_0, x_1, \dots, x_i, \dots\} \in \prod_g$ и

$$q = \bigcap_{i \geq 0} F^i(N_{x_i}) = N_{x_0} \cap F(N_{x_1}) \cap F^2(N_{x_2}) \cap \dots = \{x_0\} \times N \cap F(\{x_1\} \times N) \cap F^2(\{x_2\} \times N) \cap \dots$$

Докажем сначала непрерывность для первых двух координат, т.е. рассмотрим $q \in N_{x_0} \cap F(N_{x_1})$. Поскольку диффеоморфизм F имеет вид $F(t, z) = (g(t), w(t, z))$, где $g : T^k \rightarrow T^k$ - d -накрытие степени $d \geq 2$, существуют попарно различные $s_1, s_2, \dots, s_d \in T^k$ и $\delta_1 > 0$, $\delta_1 \leq \varepsilon$ такие, что $F(N_{s_1, \delta_1}) \cap F(N_{s_2, \delta_1}) \cap \dots \cap F(N_{s_d, \delta_1}) = \emptyset$ и $F(N_{s_i, \delta_1}) \subset N_{t_0, \varepsilon}$ при $i = \overline{1, d}$. Так как $\theta(p) = \{t_0, t_1, \dots, t_i, \dots\}$, тогда согласно (1.4) существует некоторое s_i такое, что $F(N_{s_i, \delta_1}) = F(N_{t_1, \delta_1})$. Из того, что $q \in U(p) \cap \mathfrak{M}$ следует $q \in N_{x_0} \cap F(N_{x_1}) \cap F(N_{t_1, \delta_1})$. Это означает $F(N_{x_1}) \cap F(N_{t_1, \delta_1}) \neq \emptyset$ и $N_{x_1} \cap N_{t_1, \delta_1} \neq \emptyset$, тогда $|x_1 - t_1| < \delta_1$. Из равномерной непрерывности d -накрытия g вытекает неравенство $|g(x_1) - g(t_1)| < \varepsilon$, т.е. $|x_0 - t_0| < \varepsilon$. Таким образом, из включения $q \in U(p) \cap \mathfrak{M}$ для двух первых координат x_0 и x_1 последовательности $\theta(q) = \{x_0, x_1, \dots, x_i, \dots\}$ доказали, что $\theta(q) \in U'(\theta(p))$.

Пусть теперь $q \in N_{x_0} \cap F(N_{x_1}) \cap F^2(N_{x_2})$. Проводя аналогичные рассуждения, как в предыдущем пункте, существуют попарно различные $s'_1, s'_2, \dots, s'_d \in T^k$ и $\delta_2 > 0$, $\delta_2 \leq \delta_1 \leq \varepsilon$ такие, что $F^2(N_{s'_1, \delta_2}) \cap F^2(N_{s'_2, \delta_2}) \cap \dots \cap F^2(N_{s'_d, \delta_2}) = \emptyset$ и $F^2(N_{s'_i, \delta_2}) \subset F(N_{t_1, \delta_1}) \subset N_{t_0, \varepsilon}$ при $i = \overline{1, d}$. Из (1.4) следует существование s'_i для которого $F^2(N_{s'_i, \delta_2}) = F^2(N_{t_2, \delta_2})$. Поскольку $q \in U(p) \cap \mathfrak{M}$, то $q \in N_{x_0} \cap F(N_{x_1}) \cap F^2(N_{x_2}) \cap F^2(N_{t_2, \delta_2})$. Таким образом, $F^2(N_{x_2}) \cap F^2(N_{t_2, \delta_2}) \neq \emptyset$ и $N_{x_2} \cap N_{t_2, \delta_2} \neq \emptyset$, это означает, что $|x_2 - t_2| < \delta_2$. В силу равномерной непрерывности g получаем неравенства $|g(x_1) - g(t_1)| < \varepsilon$ и $|g^2(x_1) - g^2(t_1)| < \varepsilon$, т.е. $|x_1 - t_1| < \varepsilon$ и $|x_0 - t_0| < \varepsilon$. Следовательно, установлена непрерывность отображения θ для первых трех координат x_0, x_1 и x_2 последовательности $\theta(q) = \{x_0, x_1, x_2, \dots, x_i, \dots\}$.

Аналогично, существует $\delta_r > 0$, $\delta_r \leq \dots \leq \delta_2 \leq \delta_1 \leq \varepsilon$ такое, что $q \in N_{x_0} \cap F(N_{x_1}) \cap F^2(N_{x_2}) \cap \dots \cap F^r(N_{x_r}) \cap F^r(N_{t_r, \delta_r})$. Поэтому $F^r(N_{x_r}) \cap F^r(N_{t_r, \delta_r}) \neq \emptyset$, $N_{x_r} \cap N_{t_r, \delta_r} \neq \emptyset$ и $|x_r - t_r| < \delta_r$. Из равномерной непрерывности g получаем неравенства $|g(x_r) - g(t_r)| < \varepsilon$, $|g^2(x_r) - g^2(t_r)| < \varepsilon$, $\dots$, $|g^r(x_r) - g^r(t_r)| < \varepsilon$, т.е. $|x_{r-1} - t_{r-1}| < \varepsilon$, $|x_{r-2} - t_{r-2}| < \varepsilon$, $\dots$,

$|x_0 - t_0| < \varepsilon$. Итак, из определения отображений F и θ вытекает, что $\theta(q) \in U'(\theta(p))$ для любой точки $q \in U(p)$. Следовательно, θ – непрерывное отображение.

Аналогично можно доказать непрерывность отображения θ^{-1} . Таким образом, θ – гомеоморфизм.

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

Основным результатом настоящей статьи является следующая теорема.

Т е о р е м а 1.1. *Ограничение $f|_{\mathfrak{M}}$ сопряжено обратному пределу отображения g .*

Д о к а з а т е л ь с т в о. Установим равенство $\theta \circ F|_{\mathfrak{M}} = \hat{g} \circ \theta|_{\mathfrak{M}}$, которое можно представить в виде коммутативной диаграммы

$$\begin{array}{ccc} \mathfrak{M} & \xrightarrow{F} & \mathfrak{M} \\ \downarrow \theta & & \downarrow \theta \\ \Pi_g & \xrightarrow{\hat{g}} & \Pi_g \end{array}$$

Согласно лемме 1.2., любой точке $p \in \mathfrak{M}$ соответствует единственная последовательность $\theta(p) = \{t_0, t_1, \dots, t_i, \dots\}$, где $t_i = g(t_{i+1})$, $i \geq 0$. Образ точки $\theta(p)$ относительно отображения $\hat{g} : \Pi_g \rightarrow \Pi_g$ есть, по определению

$$\hat{g}(\{t_0, t_1, \dots, t_i, \dots\}) = \{g(t_0), t_0, t_1, \dots, t_i, \dots\}.$$

С другой стороны, для точки $p \in \mathfrak{M}$ из условия (1.2) вытекает, что $F(p) \in F(\{t_0\} \times N) \subset N_{g(t_0)}$. Из леммы 1.2. следует, что каждой точке $p \in \mathfrak{M}$ соответствует единственная последовательность образов слоев $F^i(N_{t_i})$ и $p = \bigcap_{i \geq 0} F^i(N_{t_i})$. Рассмотрим $F(p) = F(\bigcap_{i \geq 0} F^i(\{t_i\} \times N)) = \bigcap_{i \geq 0} F^{i+1}(\{t_i\} \times N) = \bigcap_{i \geq 0} F^{i+1}(\{t_i\} \times N) \cap N_{g(t_0)} = N_{g(t_0)} \cap F(\{t_0\} \times N) \cap F^2(\{t_1\} \times N) \cap \dots \cap F^{i+1}(\{t_i\} \times N) \cap \dots = N_{g(t_0)} \cap F(N_{t_0}) \cap F^2(N_{t_1}) \cap \dots \cap F^{i+1}(N_{t_i}) \cap \dots$. Тогда в силу леммы 1.2., образом точки $F(p)$ относительно отображения θ является последовательность $\{g(t_0), t_0, t_1, \dots, t_i, \dots\}$. Следовательно, $\hat{g}[\theta(p)] = \theta[F(p)]$.

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

Так как сопрягающий гомеоморфизм переводит неблуждающее множество в неблуждающее множество, то из леммы 1.5. и теоремы 1.1. вытекает следующее следствие. Напомним, что неблуждающее множество $NW(f)$ определяется как множество неблуждающих точек и является f -инвариантным и замкнутым. Точка $x \in M$ является *неблуждающей*, если для любой ее окрестности U пересечение $f^n(U) \cap U \neq \emptyset$ для бесконечного множества целых n .

С л е д с т в и е 1.1. *Имеет место равенство $\theta[NW(F)] = NW(\hat{g})$.*

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Жужома Е.В., Исаенкова Н.В., “О нульмерных соленоидальных базисных множествах”, *Матем. сб.*, **203** (2012).
2. Куратовский Л., “Топология”, *М.: Мир*, **1** (1966).
3. Robinson C., “Dynamical Systems: stability, symbolic dynamics, and chaos”, *Studies in Adv. Math., Sec. edition, CRC Press*, 1999.

4. Williams R., “Expanding attractors”, *Publ. Math. I.H.E.S.*, **43** (1974), 169-203.

On interior dynamics of Smale-Vietoris diffeomorphisms

© E.V. Zhuzhoma³, N.V. Isaenkova⁴

Abstract. The paper concerns to the study of interior dynamics of new class of Smale-Vietoris diffeomorphisms of closed n -manifolds M^n . One proved that the restriction of Smale-Vietoris diffeomorphism on the set $T^k \times N \subset M^n$ is conjugate to the inverse limit of d -cover of k -dimensional torus T^k , where $k \geq 1$, and N is a $(n - k)$ -manifold with a non-empty boundary.

Key Words: topological equivalence, nonwandering set, inverse limit

³Professor of Mathematics Chair, Nizhny Novgorod State Pedagogical University, Nizhny Novgorod; zhuzhoma@mail.ru.

⁴Aspirant faculty of mathematical analysis, Nizhny Novgorod State Pedagogical University, Nizhny Novgorod; nisaenkova@mail.ru.

УДК 004.896, 622.24

Прогнозирование осложнений при бурении нефтегазовых скважин с использованием нейронных сетей

© А. Р. Кабирова¹

Аннотация. Рассматривается задача прогнозирования осложнений при бурении новых скважин на основе минимума информации по ранее пробуренным скважинам данного месторождения на примере наиболее распространенного вида осложнений - поглощений бурового раствора. Разработан программный комплекс, позволяющий на основе базы данных по поглощениям буровых растворов с использованием искусственного перцептрона и технологии параллельного программирования рассчитывать вероятность интенсивности поглощения для скважины по известным её координатам.

Ключевые слова: Искусственная нейронная сеть, осложнения при бурении, прогнозирование.

1. Введение

В процессе бурения возникают различные осложнения, связанные с поглощениями промывочных жидкостей и цементных растворов, проявлениями пластовых флюидов и нарушением целостности стенок скважины [1]. Во многих случаях предупредить возникновение осложнения легче, чем его ликвидировать. Нередко одно осложнение, возникшее в скважине и не устранённое в достаточно короткий срок, усугубляется другими видами, а иногда является причиной появления новых осложнений или даже аварий. Поэтому предупреждению и быстрой ликвидации возникших осложнений следует уделять большое внимание.

Основным видом осложнений при бурении скважин на месторождениях РБ являются поглощения буровых и тампонажных растворов. Они составляют порядка 80% всех возникающих осложнений [2]. Для эффективного прогнозирования и своевременного предупреждения поглощений буровых растворов необходимо проводить всесторонний анализ ранее пробуренных скважин, учитывая оба класса причин возникновения поглощений. При бурении скважин не всегда есть возможность оперативно получать данные о технологических параметрах, а на этапе создания проекта на строительство - они неизвестны. Поэтому первостепенной задачей становится анализ геологических факторов и на его основе построение прогноза на основе минимума информации по ранее пробуренным скважинам. В настоящее время в нефтегазовой отрасли разрабатываются технологии борьбы с последствиями от осложнений, но не предупреждения последних, хотя предупреждение экономически выгоднее ликвидации.

Целью данной работы является математическое моделирование и прогноз поглощений при бурении с использованием искусственной нейросети. Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи: разработать базу данных по поглощениям; построить карты интенсивности поглощений; разработать и реализовать эффективный алгоритм построения прогноза поглощений. В дальнейшем планируется применить данную методику для прогнозирования остальных видов осложнений.

¹ Аспирант лаборатории математической химии, Институт нефтехимии и катализа РАН, г. Уфа; arish-07@mail.ru.

2. Используемые методы решения

Одним из наиболее современных и перспективных инструментов компьютерной обработки прикладных задач являются искусственные нейронные сети. Хорошо обученная сеть обладает способностью моделировать функцию, связывающую значения входных и выходных переменных, на основе чего появляется возможность прогнозирования ситуации с неизвестными выходными значениями. В соответствии с вышесказанным, целесообразным является использование искусственных нейросетей для прогнозирования осложнений при бурении скважин.

Для оценки пространственного расположения скважин (основного геологического фактора) и отслеживания тенденций распространения поглощений разработано программное построение карт интенсивностей поглощений. В качестве исходных данных при построении карты выступают следующие данные, объединенные в файловую базу данных: 1) название скважины; 2) месторождение, к которому относится скважина; 3) условные координаты устья и забоя скважины; 4) сведения о наличии и интенсивности поглощений; 5) глубина залегания и стратиграфическое подразделение, к которому относится поглощающий пласт. На основе базы данных производится построение карты интенсивностей для каждого объекта поглощения на данном месторождении, которая представляет собой совокупность маркеров, нанесенных на плоскость согласно условным координатам скважин и соответствующих максимальной интенсивности поглощения в данной скважине. При этом все скважины делятся на 4 класса: без поглощений, с поглощениями небольшой интенсивности - до $40 \text{ м}^3/\text{час}$, с поглощениями средней интенсивности - от 40 до $80 \text{ м}^3/\text{час}$, с катастрофическими поглощениями - более $80 \text{ м}^3/\text{час}$.

Задача прогнозирования осложнений для каждого объекта сводится к решению задачи идентификации системы с несколькими входами и выходами на основе множества маркированных примеров $T^j = \{(x_i^j, d_{ik}^j)\}$, $i = 1, \dots, N$, $j = 1, \dots, M$, $k = 1, \dots, 4$, где j - номер объекта, $x_i^j = (x_{i1}^j, x_{i2}^j)$ - координаты i -ой скважины в этом объекте, k - количество классов интенсивности, d_{ik}^j - доля вероятности возникновения поглощения для класса k . Поэтому для решения этой задачи реализовано обучение с учителем, где x_i^j играет роль входного вектора, а d_{ik}^j - желаемого отклика.

В качестве архитектуры нейронной сети был выбран трехслойный персептрон (рис. 1), обучаемый методом обратного распространения ошибки - часто применяемый для решения задач прогнозирования. Одно из главных преимуществ многослойного персептрона, это возможность решать алгоритмически неразрешимые задачи, но для которых возможно составить репрезентативный набор примеров с известными решениями [3]. При обучении нейросеть, за счёт своего внутреннего строения, выявляет закономерности в связи входных и выходных образов, тем самым как бы «обобщает» полученный на обучающей выборке опыт.

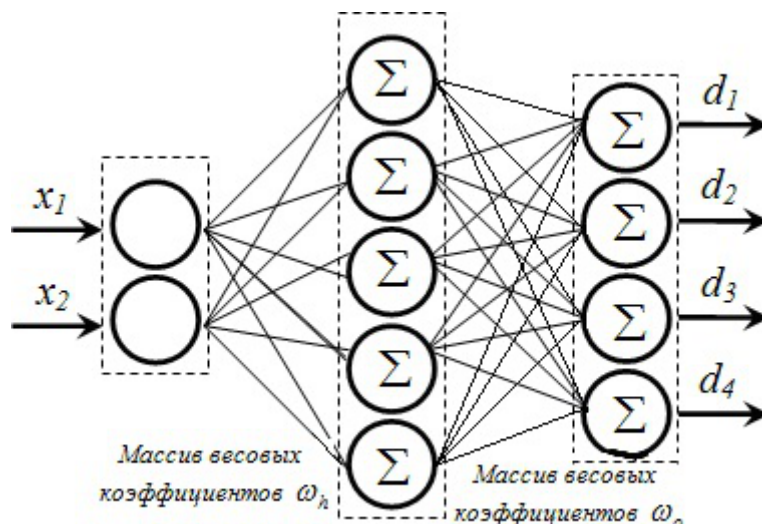


Рис.1 - Модель трехслойного персептрона

В рассматриваемой модели каждый нейрон характеризуется весом или силой синаптической связи (ω_k для нейронов скрытого слоя, ω_o - выходного слоя) и функцией активации, определяющий выходной сигнал, который поступит на синапсы нейронов следующего слоя:

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (2.1)$$

Выходной сигнал рассчитывается по формуле:

$$y = f(net) = f\left(\sum_{i=1}^N \omega_i x_i\right) \quad (2.2)$$

На основе данной процедуры производится отнесение каждой точки карты к одному из введенных классов (исходя из максимальной доли вероятности возникновения поглощения), т.н. «кластеризация» карты интенсивностей поглощений. В результате чего при вводе координат новой скважины автоматически определяется прогнозируемый класс интенсивности в данном объекте. Т.о., на основе проектирования карты интенсивностей поглощений в пробуренных скважинах на месторождениях РБ с использованием искусственной нейронной сети производится отслеживание тенденции распространения поглощений каждого класса интенсивности в зависимости от геологических факторов, на основе чего составляется вероятностный прогноз возникновения поглощений при бурении новых скважин.

3. Распараллеливание вычислительного процесса.

Большие объемы входных данных и итеративная природа алгоритма обучения нейросети порождают необходимость использования высокопроизводительных вычислительных систем для получения прогноза достаточной точности за разумное время. Для распараллеливания вычислительного процесса при решении задачи прогнозирования предложена трехуровневая модель распараллеливания (рис. 2): по месторождениям; по горизонтам; по

классам интенсивности. Данная модель включает основные принципы методологии распараллеливания [4]: использование внутреннего параллелизма задачи, распараллеливание по экспериментальной базе и декомпозиция метода решения задачи. Распараллеливание вычислительного процесса осуществляется с использованием интерфейса MPI.

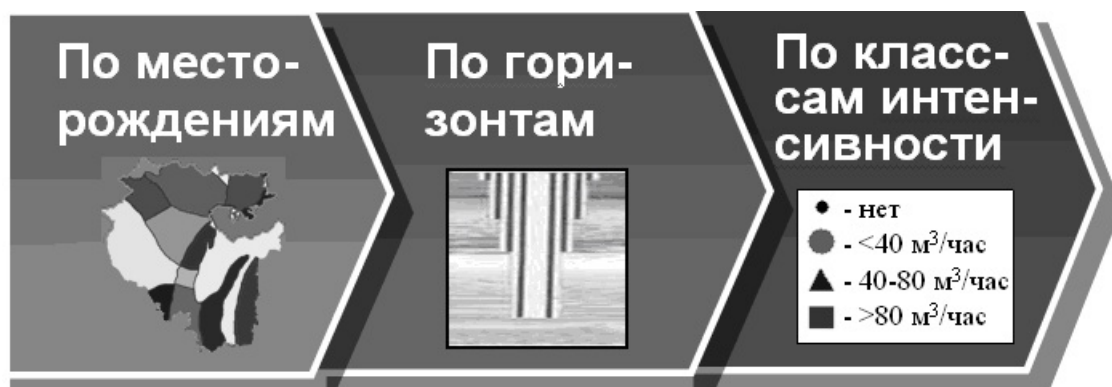


Рис.2 - Модель распараллеливания вычислительного процесса

Внутренний параллелизм задачи состоит в том, что, хотя разные типы осложнений и могут быть обусловлены одними и теми же причинами, но имеют разную физическую природу и приводят к разным последствиям, в связи с чем их можно рассматривать независимо друг от друга. В данной работе реализовано построение прогноза для поглощений буровых растворов, а в дальнейшем планируется разработать также алгоритмы прогнозирования остальных типов осложнений - флюидопроявлений, осыпей и обвалов, прихватов и провалов бурового инструмента.

Распараллеливание по экспериментальной базе состоит из двух уровней: распараллеливание по месторождениям и по горизонтам месторождения. Поскольку геологические факторы возникновения поглощений для каждого горизонта месторождения специфичны, то становится возможным при прогнозировании для одной скважины проведение расчетов для всех горизонтов независимо друг от друга.

Декомпозиция метода решения задачи прогнозирования основана на том, что кластеризацию карты интенсивности поглощений с использованием нейронной сети по каждому классу интенсивности можно проводить независимо. Время работы каждого процесса при этом значительно превосходит время межпроцессорного взаимодействия, что обуславливает эффективность работы параллельной программы.

4. Заключение

Опираясь на полученный в результате работы программного комплекса прогноз, производится выдача рекомендаций по типу и свойствам бурового раствора и параметрам технологических операций при бурении новой скважины месторождения. Важной характеристикой чертой при этом является то, что единственная информация по новой скважине, необходимая для построения прогноза - это ее проектные координаты. Тестирование разработанного программного комплекса на уже пробуренных скважинах месторождений РБ показало совпадение прогноза с фактическими значениями более чем на 80%, что говорит о его адекватности.

В настоящее время программный комплекс активно используется при разработке проектов на строительство новых скважин на месторождениях РБ. Полученные рекомендации позволяют сократить время на ликвидацию осложнений и осуществлять более качественное вскрытие продуктивных горизонтов, что, в свою очередь, приводит к повышению технико-экономических показателей бурения. Погрешность прогноза (менее 20%) обусловлена влиянием на возникновение осложнений таких «шумов» как различия в технологических параметрах буровых растворов, скоростях спуско-подъемных операций и т.п., и компенсируется оперативностью получения прогноза (минимумом требуемых данных). В дальнейшем, планируется создать единый программный комплекс прогнозирования для всех видов осложнений на основе разрабатываемой методики по прогнозированию поглощений бурового раствора.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Вадецкий Ю. В., *Бурение нефтяных и газовых скважин*, Издательский центр «Академия», М., 2007, 352 с.
2. Ясов В. Г., Мыслюк М. А. 2., *Осложнения в бурении. Справочное пособие*, «Недра», М., 1991, 334 с.
3. З. Уоссермен Ф., *Нейрокомпьютерная техника: Теория и практика*, «Мир», М., 1992.
4. Линд Ю. Б., Губайдуллин И. М., Мулюков Р. А. 3., «Методология параллельных вычислений для решения задач химической кинетики и буровой технологии», *Системы управления и информационные технологии*, 2009, № 2(36), 44–50.

Prediction of troubles during oil and gas wells construction on the base of neural networks.

© A. R. Kabirova²

Abstract. A problem of prediction for troubles during new wells construction on the base of a minimum information on previously drilled wells of this oilfield is considered. The solution of this problem is considered by the example of drilling fluid and grouting mortars loss which is the main type of troubles. A program system of drilling mud loss prediction has been developed. It allows to calculate the probability of loss intensity for a well known by its coordinates on the base of database for drilling fluid loss with the usage of artificial perceptron and paralleling programming.

Key Words: Artificial neural network, troubles during wells construction, prediction.

² Postgraduate laboratory of mathematical chemistry, Institute of petrochemistry and catalysis of RAS, Ufa; arish-07@mail.ru.

УДК 519.8

Адаптация метода ветвей и границ для решения многокритериальных задач структурной оптимизации

© Е. А. Лазарев¹

Аннотация. В работе предлагаются адаптированный метод ветвей и границ для решения задач структурной оптимизации на примере задачи оптимизации сети передачи данных; приводятся результаты вычислительных экспериментов.

Ключевые слова: проектирование сетей, метод ветвей и границ, многокритериальная оптимизация.

1. Введение

Метод ветвей и границ – общий алгоритмический метод решения оптимизационных задач, который был предложен Лендом и Дойгом для решения задач целочисленного программирования [1]. По существу, метод является модификацией полного перебора с отсечением заведомо неоптимальных подмножеств решений. На практике, при решении многих оптимизационных задач применение данного метода позволяет существенно сузить рассматриваемую область, тем самым значительно сократить перебор (время работы может быть уменьшено на несколько порядков). Поэтому метод ветвей и границ получил широкое распространение и является одним из самых популярных подходов к решению задач оптимизации.

Однако, в большинстве работ, в которых применяется метод ветвей и границ, рассматриваются однокритериальные задачи. В данной статье предлагается адаптация метода ветвей и границ для решения бикритериальной задачи оптимизации сети передачи данных с использованием концепции оптимальности по Парето. Предложенный подход может быть обобщен на решение задач структурной оптимизации с любым числом критериев.

2. Математическая модель

Рассмотрим математическую модель сети передачи данных, основанную на классических потоковых моделях, описанную в работе [2].

Известен ориентированный ациклический граф $G = (V, E)$, задающий существующую сеть передачи данных (V и E – множества вершин и ребер, соответственно). Вершинам соответствуют узловые элементы сети (коммутаторы). Ребро (u, v) обозначает канал связи, соединяющий коммутаторы, соответствующие вершинам u и v , который имеет положительную пропускную способность $c(u, v)$, показывающую, какое максимальное количество информации может быть передано по каналу в единицу времени. Ограничение пропускной способности канала диктуется его техническими характеристиками. Например, согласно плезиохронной цифровой иерархии (PDH, Plesiochronous Digital Hierarchy), поддерживаются следующие уровни иерархии цифровых каналов: E0 (64 кбит/с), E1 (2,048 Мбит/с), E2 (8,448 Мбит/с), E3 (34,368 Мбит/с), E4 (139,264 Мбит/с) [3].

¹ Аспирант кафедры вычислительные системы и технологии, Нижегородский государственный технический университет имени Р. Е. Алексеева, г. Нижний Новгород; elazarev.nnov@gmail.com.

В графе выделяются две особые вершины — источник информации s и сток t . Из источника ведут магистральные каналы, соединяющие городскую сеть с магистральной. В сток ведут ребра от коммутаторов, к которым напрямую подключены конечные пользователи.

Для описания каналов передачи данных, которые могут быть достроены, задается множество ребер E' ($E \cap E' = \emptyset$). Для каждого ребра $(u, v) \in E'$ известна пропускная способность $c'(u, v)$ и стоимость строительства $p'(u, v)$.

Количество информации, передаваемой по каналам связи в единицу времени, описывается функцией потока $f : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ ($f(u, v)$ задает поток между вершинами u и v), удовлетворяющая трем условиям:

1. ограниченность пропускной способности: $f(u, v) \leq c(u, v)$ для всех $u, v \in V$;
2. антисимметричность: $f(u, v) = -f(v, u)$ для всех $u, v \in V$;
3. сохранение потока: для всех $u \in V \setminus \{s, t\} : \sum_{v \in V} f(u, v) = 0$.

3. Постановка задачи

Требуется модифицировать существующую сеть передачи данных, используя каналы, описываемые множеством ребер E' , для увеличения пропускной способности сети.

Возможным решением $x \in D$ (D — множество допустимых решений) задачи является множество ребер $E^* \subseteq E'$. При этом рассматриваются стоимость строительства сети передачи данных:

$$Q_1(x) = \sum_{(u,v) \in E'} p'(u, v) \quad (3.1)$$

и величина максимальной пропускной способности:

$$Q_2(x) = \sum_{v \in V} f(s, v) \quad (3.2)$$

задаваемые графом $G^* = (V, E \cup E^*)$. Далее будем обозначать величину максимального потока в произвольном графе G функцией $F(G)$.

Задача формулируется следующим образом: по заданным ациклическим ориентированным графам $G = (V, E)$ и множеству ребер E' ($E \cap E' = \emptyset$), матрицам пропускных способностей $c(u, v)$ и $c'(u, v)$ и матрице стоимости ребер $p'(u, v)$ найти все множество парето-оптимальных решений задачи

$$\min_{x \in D} (Q_1(x)), \max_{x \in D} (Q_2(x)), \quad (3.3)$$

упорядоченных по возрастанию (убыванию) значения первого (второго) критерия.

К преимуществам данной модели стоит отнести то, что прибыль в ней не рассматривается как величина прямо пропорциональная количеству информации, переданной конечному потребителю. В современных сетях передачи данных такой метод оценки становится все менее эффективным, ввиду повсеместного распространения широкополосного интернета с оплатой по фиксированному тарифу (ежемесячная абонентская плата).

Также стоит отметить, что методы свертывания критериев или лексикографического упорядочивания порой не способны дать полное представление о спектре решений, даже с учетом задания различных весовых коэффициентов. Именно поэтому ставится задача

поиска множества оптимальных по Парето решений. Такой подход позволит проектировщику сети передачи данных выбрать оптимальный вариант из всего спектра решений.

В работе [2] доказывалось, что данная задача относится к классу NP трудных задач, а так же приводится оценка на мощность множества оптимальных по Парето решений (может составлять $2^{|E'|}$). Принимая во внимание гипотезу $P \neq NP$, можно сделать вывод о том, что не существует алгоритмов с полиномиальной сложностью, решающих поставленную задачу. В данной работе предлагается адаптация метода ветвей и границ как способ сокращения перебора.

4. Адаптированный метод ветвей и границ

4.1. Описание метода

Приведем описание алгоритма решения поставленной задачи.

1. Пронумеруем все ребра из множества E' , произвольным образом различными числами от 1 до $|E'|$. Обозначим через e_i ребро с номером i из множества E' .
2. Каждая вершина дерева ветвления соответствует некоторому подмножеству D_p области допустимых решений и содержит нижнюю (L_p) и верхнюю (H_p) оценки значения пары $(Q_1(x), Q_2(x))$ на этом подмножестве. При этом корневая вершина (нулевой уровень дерева) соответствует всей области допустимых решений D , а любой вершине уровня $k > 0$ соответствует подмножество решений, получающееся при фиксировании первых k ребер (из множества E') сети. Под термином «фиксирование» понимается тот факт, что для выбранных ребер уже принято решение будут они построены или нет. Обозначим через S множество, содержащее фиксированные ребра, которые будут построены.
3. Из каждой вершины (за исключением концевых вершин, в которых зафиксированы все E' ребер) производится ветвление на два подмножества, т.е. осуществляется дихотомическое ветвление. При этом первое из подмножеств получается путем фиксирования очередного ребра, но без добавления его в S , таким образом, данное ребро не будет построено в сети. Второе из подмножеств получается путем фиксирования очередного ребра с добавлением его в S , таким образом, данное ребро будет построено в сети.
4. Нижняя оценка L_p решения x после фиксирования первых k ребер:

$$Q_1(x) = \sum_{e \in S} p'(e) + \sum_{i=k+1}^{|E'|} p'(e_i) \quad (4.1)$$

т.е. сумме стоимостей строительства фиксированных ребер, которые будут построены и ребер, которые еще не рассматривались, т.е. ребер с номерами большими k .

$$Q_2(x) = F(G(V, E \cup S)) \quad (4.2)$$

т.е. величина потока для графа, полученного путем добавления в исходный множества построенных фиксированных ребер.

5. Верхняя оценка решения после фиксирования первых ребер:

$$Q_1(x) = \sum_{e \in S} p'(e) \quad (4.3)$$

т.е. сумме стоимостей строительства фиксированных ребер, которые будут достроены.

$$Q_2(x) = F(G(V, E \cup S \cup \{e_i | i > k\})) \quad (4.4)$$

т.е. величине потока для графа, полученного путем добавления в исходный множества достроенных фиксированных ребер и всех ребер, которые еще не рассматривались, т.е. ребра с номерами большими k .

6. Функцией ветвления является рекурсивная функция, на вход которой подается номер ребра k для рассмотрения (подразумевается, что при вызове функции с параметром k ребра с номерами от 1 до $k - 1$ являются фиксированными). Запуск алгоритма производится вызовом функции ветвления с аргументом 1.

7. Для каждой вершины дерева ветвления рассчитывается верхняя H_p и нижняя L_p оценки решения p . Они сравниваются с решениями из множества рекордов R . Пусть H_r и L_r верхняя и нижняя оценки решения $r \in R$. Тогда:

- (а) если $L_p \succ H_r$, то $R = R \setminus \{r\}$ и продолжается ветвление из данной вершины (вызывается функция ветвления с аргументов $k + 1$);
- (б) если $L_r \succ H_p$, то ветвление из данной вершины прекращается;
- (с) если $\nexists r \in R : L_r \succ H_p$, то если текущая вершина дерева ветвления является конечной, то решение p добавляется во множество рекордов R ($R = R \cup \{p\}$). В противном случае продолжается ветвление из данной вершины (вызывается функция ветвления с аргументов $k + 1$).

Здесь символ $\succ$ обозначает парето-доминируемость одного решения над другим.

8. Останов алгоритма выполняется при невозможности осуществления дальнейшего ветвления.

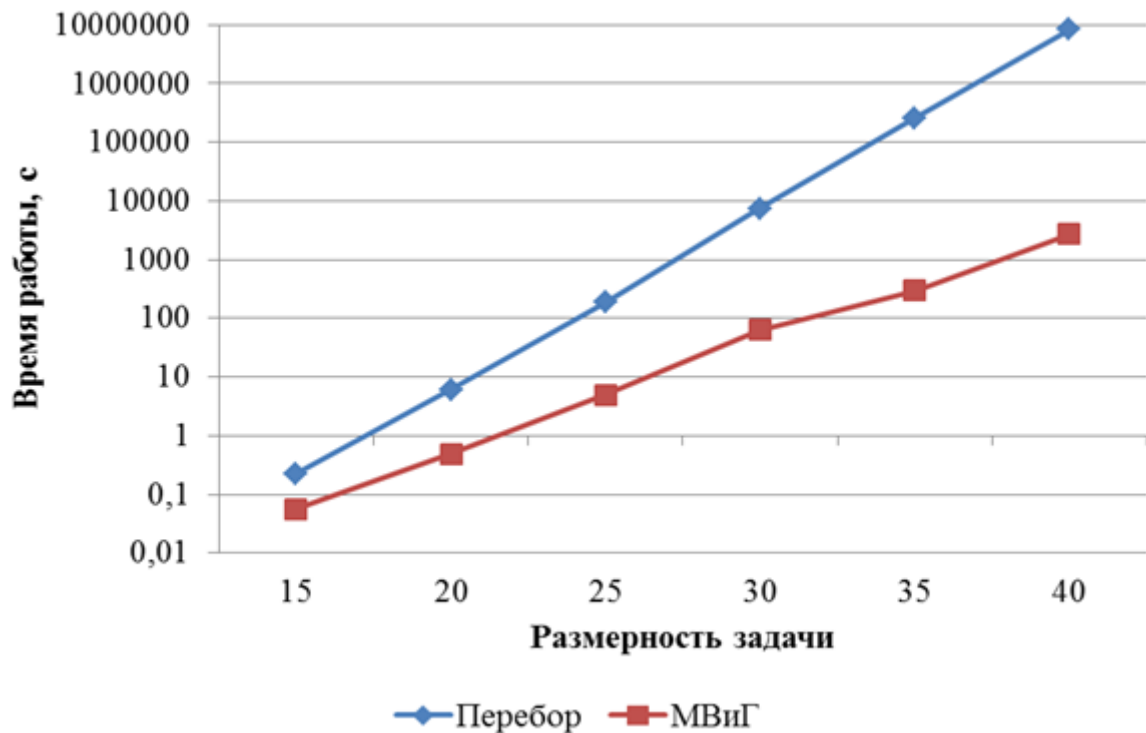
В результате работы алгоритма множество R содержит все решения задачи оптимальные по Парето.

4.2. Анализ алгоритма

В худшем случае время работы метода будет сравнимо с алгоритмом полного перебора. В работе [2] приведен пример сети, в которой множество оптимальных по Парето решений имеет мощность $2^{|E'|}$. На такой сети метод ветвей и границ в ходе работы не сможет отсеять ни одного подмножества решений и в итоге построит дерево ветвлений состоящее из $|E'|$ уровней (корень дерева имеет уровень 0). Уровень глубины i будет иметь 2^i вершин. В этом случае, время работы алгоритма такое же, как и у метода полного перебора и составляет $O(2^{|E'|} \cdot |V|^3)$ (вычисление максимального потока в сети с помощью алгоритма «поднять в начало» требует $O(V^3)$ времени [4]).

Однако среднее время работы метода ветвей и границ гораздо меньше, чем время работы полного перебора. Приведем результаты тестирования программной реализации метода ветвей и границ и полного перебора, выполненной на языке C++. Вычислительные эксперименты заключались в нахождении всего множества оптимальных по Парето

решений для 100 различных случайным образом сгенерированных сетей передач данных с числом ребер во множестве E' равным 15, 20, 25, 30, 35 и 40. Для случаев $|E'| = 35$ и $|E'| = 40$ приведено приближенное время работы алгоритма полного перебора, вычисленное аналитически, исходя из анализа сложности работы данного алгоритма, поскольку реальный запуск на таких больших входных данных не представляется возможным. Результаты экспериментов представлены на рис. 4.1.



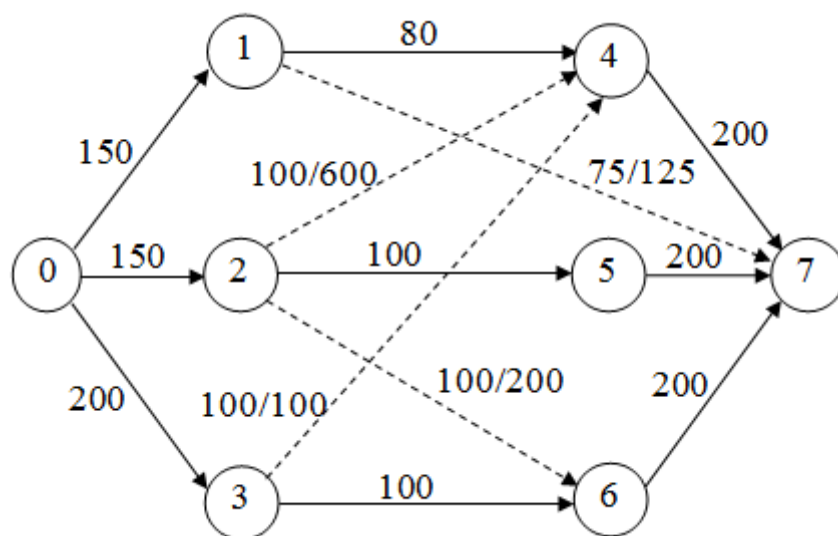
Р и с у н о к 4.1

Среднее время работы алгоритмов полного перебора и метода ветвей и границ

4.3. Пример

Рассмотрим конкретный пример, иллюстрирующий работу адаптированного метода ветвей и границ.

П р и м е р 4.1. Требуется найти все множество парето-оптимальных решений для бикритериальной задачи, если граф G и множество достраиваемых ребер E' заданы на рис. 4.2. Ребра G изображены сплошной линией, с указанием пропускной способности канала. Ребра из множества E' изображены пунктирной линией с указанием пропускной способности и стоимости постройки канала через косую черту соответственно.

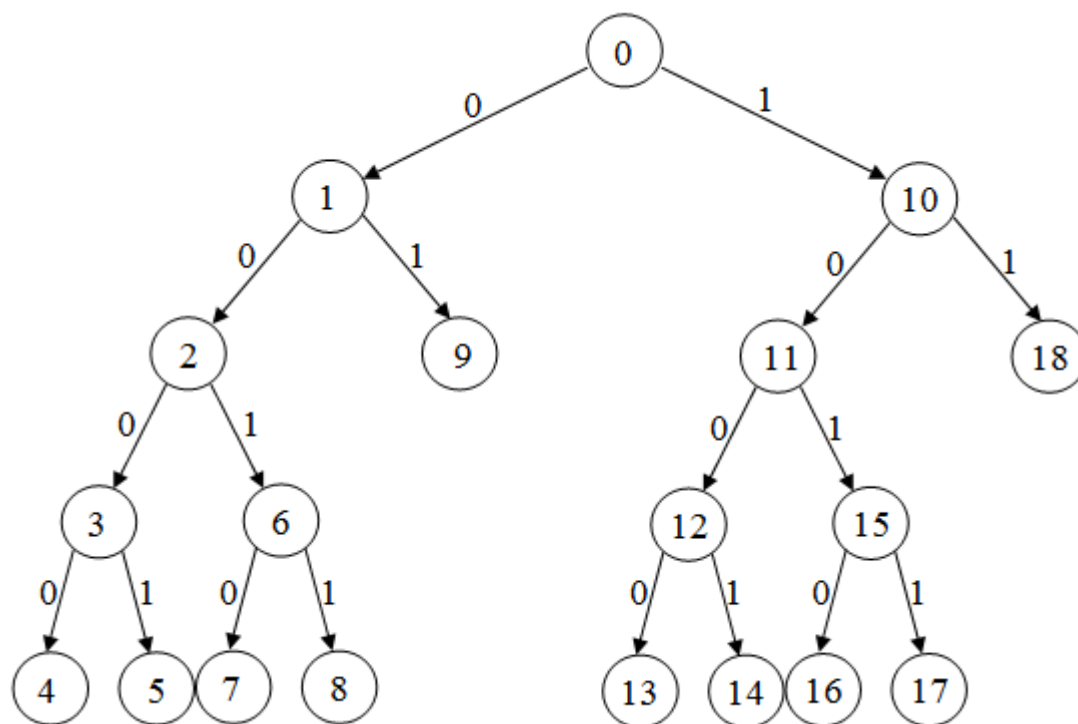


Р и с у н о к 4.2

Входные данные для примера 4.1.

Пронумеруем ребра из множества E' от 1 до 4 в следующем порядке: $(1, 7)$, $(2, 4)$, $(2, 6)$, $(3, 4)$. Где (u, v) обозначает ребро из вершины u в вершину v . Будем строить дерево ветвлений (рис. 4.3) и заносить найденные верхние и нижние оценки подмножества решений в таблицу. Второй и третий столбцы таблицы содержат нижнюю и верхнюю оценки подмножества решений D_i , получаемого фиксированием всех ребер из E' при проходе от корня дерева ветвления до вершины с номером i . Четвертый столбец содержит множество рекордов, найденное на момент входа в вершину дерева ветвлений с соответствующим номером.

№ вер- шины	Нижняя оценка для подмножества решений D_i	Верхняя оценка для подмножества решений H_i	Множество рекордов
1	(900, 280)	(0, 430)	$\emptyset$
2	(300, 280)	(0, 430)	$\emptyset$
3	(100, 280)	(0, 380)	$\emptyset$
4	(0, 280)	(0, 280)	$\emptyset$
5	(100, 380)	(100, 380)	(0, 280)
6	(300, 330)	(200, 430)	(0, 280), (100, 380)
7	(200, 330)	(200, 330)	(0, 280), (100, 380)
8	(300, 430)	(300, 430)	(0, 280), (100, 380), (300, 430)
9	(900, 330)	(600, 430)	(0, 280), (100, 380), (300, 430)
10	(1025, 350)	(125, 500)	(0, 280), (100, 380), (300, 430)
11	(425, 350)	(125, 500)	(0, 280), (100, 380), (300, 430)
12	(225, 350)	(125, 450)	(0, 280), (100, 380), (300, 430)
13	(125, 350)	(125, 350)	(0, 280), (100, 380), (300, 430)
14	(225, 450)	(225, 450)	(0, 280), (100, 380), (300, 430)
15	(425, 400)	(325, 500)	(0, 280), (100, 380), (225, 450)
16	(325, 400)	(325, 400)	(0, 280), (100, 380), (225, 450)
17	(425, 500)	(425, 500)	(0, 280), (100, 380), (225, 450)
18	(1025, 400)	(725, 500)	(0, 280), (100, 380), (225, 450), (425, 500)



Р и с у н о к 4.3

Дерево ветвлений метода ветвей и границ для примера 4.1.

Изначально дерево ветвлений состоит из единственной вершины (корня) с номером 0. В процессе работы алгоритма в дерево добавляются ребра и новые вершины (вершины нумеруются в порядке добавления). На ребрах указаны числа 1 или 0, показывающие будет ли построено рассматриваемое зафиксированное ребро из множества E' или нет. Таким образом, при прохождении по ребрам графа, начиная от корня до вершины i , строится подмножество решений D_i .

Рассмотрим подробно основные шаги работы алгоритма.

Поиск множества парето-оптимальных решений начинается в корне дерева ветвлений (вершина 0). Сначала делается предположение о том, что первое ребро из множества E' не будет построено. Таким образом, фиксируется ребро с номером 1 из E' и выполняется переход в дереве ветвлений из вершины 0 по ребру с 0 в вершину 1. Вычисляется нижняя и верхняя оценка для подмножества решений D_1 следующим образом. Стоимость строительства получается из расчета, что все незафиксированные ребра (с номерами 2, 3 и 4) будут построены, а пропускная способность из расчета, что они при этом не внесут вклад в увеличение пропускной способности сети в целом (т.е. можно считать, что их пропускная способность равна нулю). Стоимость строительства будет равна $p'(2, 4) + p'(2, 6) + p'(3, 4) = 900$, пропускная способность будет равна 280. Для вычисления стоимости строительства для верхней оценки считаем, что ни одно из нефиксированных ребер (с номерами 2, 3 и 4) не построено, а при вычислении пропускной способности считаем, что построено. Таким образом, стоимость строительства равна 0 (так как ни одно из фиксированных ребер не построено), а пропускная способность полученной сети равна 430. Далее проверяется доминируется ли полученная верхняя оценка нижней оценкой элемента из множества рекордов R . Так как R не содержит элементов, то условие не выполняется и так как еще не все ребра E' зафиксированы, то выполняется ветвление из вершины 1 дерева ветвлений.

По аналогии выполняется ветвление из вершины 1 и происходит переход в вершину 2, для которой нижняя и верхняя оценки равны $(300, 280)$ и $(0, 430)$ соответственно. Так как снова не все ребра E' зафиксированы, то выполняется ветвление уже из вершины 2 и происходит переход в вершину 3.

Для вершины 3 нижняя оценка равна $(100, 280)$, а верхняя $(0, 380)$. Так как снова не все ребра E' зафиксированы, то выполняется ветвление уже из вершины 3 и происходит переход в вершину 4.

После перехода в вершину 4 все ребра E' зафиксированы, поэтому верхняя и нижняя оценки совпадают и равны $(0, 280)$. Нижняя оценка полученного решения не доминируется ни одной из верхних оценок из R (в данный момент пустого), поэтому полученное решение добавляется во множество рекордов. Так как ветвление из вершины 4 невозможно, то выполняется переход в вершину 3 и рассматривается случай, когда ребро с номером 3 будет достроено (происходит переход в дереве ветвления в вершину 5).

Решение, соответствующее вершине 5 представляет собой исходный граф, в который было достроено ребро 4. Пропускная способность полученной сети равна 380, стоимость строительства есть стоимость ребра 4, равная 100. Полученное решение не доминирует ни одно решение из множества R , поэтому ни один элемент из R не удаляется. Так же полученное решение не доминируется ни одним решением из R , поэтому оно добавляется в R . Таким образом, множество рекордов состоит из двух элементов $\{(0, 280), (100, 380)\}$. Так как дальнейшее ветвление из вершины 5 невозможно, то происходит переход в вершину 3, для которой ветвление уже было выполнено, поэтому происходит переход в вершину 2.

Для вершины 2 был рассмотрен случай, когда ребро из E' с номером 3 не было построено. Теперь рассматривается случай, когда это ребро будет достроено (при этом ребра с номерами 1 и 2 уже зафиксированы и не будут достроены). Т.е. происходит переход в вершину дерева ветвлений с номером 6. Для данного подмножества решений нижняя оценка равна $(300, 330)$, а верхняя $(200, 430)$. Полученная верхняя оценка не доминируется ни одним из решений из R , и так как не все ребра из E' зафиксированы, то выполняем ветвление из вершины 6.

Сначала происходит переход в вершину 7, которое соответствует решению, в котором построено одно ребро с номером 3. Для него стоимость строительства равна 200, а пропускная способность равна 320. Данное решение доминируется решением $(100, 380)$ из множества рекордов, поэтому выполняется переход в вершину 6, а затем переход по ребру 1 дерева ветвления в вершину 8.

Вершина 8 соответствует решению, в котором было достроены ребра из E' с номерами 3 и 4. Для него стоимость строительства равна $p'(2, 6) + p'(3, 4) = 300$, а пропускная способность 430. Данное решение не доминируется ни одним из решений R , поэтому оно добавляется во множество рекордов, которое становится равным $\{(0, 280), (100, 380), (300, 430)\}$. Так как дальнейшее ветвление из данной вершины невозможно, то происходит переход сначала в вершину 6, затем в 2 (так как ветвление из 6 завершено), откуда происходит переход в 1 так как ветвление из 2 также завершено. Теперь для вершины 1 рассматривается случай, когда ребро 2 из множества E' будет достроено (выполняется переход в вершину 9).

Для вершины 9 зафиксированными являются ребро 1 из E' (не построено) и 2 (построено). Для нижней оценки стоимость строительства будет равна $p'(2, 4) + p'(2, 6) + p'(3, 4) = 900$, а пропускная способность равна 330 (вычислена для сети, в которой было построено только ребро номер 2). Для верхней оценки стоимость строительства равна стоимости фиксированных ребер, которые будут построены. В данном случае стоимость есть стоимость ребра с номером 2, равная $p'(2, 4) = 600$. Полученная верхняя оценка $(600, 430)$ доминируется решением $(300, 430)$ из множества рекордов, поэтому дальнейшее ветвление

из данной вершины смысла не имеет и происходит переход в вершину 1 дерева ветвления, из которого, в свою очередь, происходит переход в вершину 0, так как ветвление в 1 завершено.

Для вершины 0 был рассмотрен случай, когда ребро из E' с номером 1 не было построено. Теперь рассматривается случай, когда это ребро будет построено. Т.е. происходит переход в вершину дерева ветвлений с номером 10. Для данного подмножества решений нижняя оценка равна $(1025, 350)$, а верхняя $125, 500$. Полученная верхняя оценка не доминируется ни одним из решений из R , и так как не все ребра из E' зафиксированы, то выполняем ветвление из вершины 10.

Сначала выполняется переход в вершину 11, которой соответствуют нижняя и верхняя оценки, равные $(425, 350)$ и $(125, 500)$ соответственно. Полученная верхняя оценка не доминируется ни одним решением из R . Так как не все ребра зафиксированы, то происходит ветвление из вершины 11.

Сначала выполняется переход в вершину 12, которой соответствуют нижняя и верхняя оценки, равные $(225, 350)$ и $(125, 450)$ соответственно. Полученная верхняя оценка не доминируется ни одним решением из R . Так как не все ребра зафиксированы, то происходит ветвление из вершины 12.

Пройдя по ребру с 0 дерева ветвления приходим в вершину 13, которой соответствует решение, в котором было построено только ребро с номером 1 из E' . Для такого решения стоимость строительства равна 125, а пропускная способность 350. Полученное решение доминируется решением $(100, 380)$ из множества рекордов R . Поэтому, выполняется переход в вершину 12, из которого происходит переход в вершину 14.

Вершина 14 соответствует решению, в котором было построены ребра из E' с номерами 1 и 4. Для него стоимость строительства равна $p'(1, 7) + p'(3, 4) = 225$, а пропускная способность 450. Данное решение доминирует решение $(300, 430)$ из R , поэтому $(300, 430)$ удаляется из множества рекордов, и вместо него добавляется $(225, 450)$. Таким образом, $R = \{(0, 280), (100, 380), (225, 450)\}$. Так как дальнейшее ветвление из данной вершины невозможно, то происходит переход сначала в вершину 12, затем в 11 (так как ветвление из 12 завершено). Теперь для вершины 11 рассматривается случай, когда ребро 3 из множества E' будет построено (выполняется переход в вершину 15).

Вершине 15 соответствуют нижняя и верхняя оценки, равные $(425, 400)$ и $(325, 500)$ соответственно. Полученная верхняя оценка не доминируется ни одним решением из R . Так как не все ребра зафиксированы, то происходит ветвление из вершины 15.

Сначала происходит переход в вершину 16, которая соответствует решению, в котором построены ребра из E' с номерами 1 и 3. Для него стоимость строительства равна $p'(1, 7) + p'(2, 6) = 325$, а пропускная способность равна 400. Данное решение доминируется решением $(225, 450)$ из множества рекордов, поэтому выполняется переход в вершину 15, а затем переход по ребру 1 дерева ветвления в вершину 17.

Вершина 17 соответствует решению, в котором было построены ребра из E' с номерами 1, 3 и 4. Для него стоимость строительства равна $p'(1, 7) + p'(2, 6) + p'(3, 4) = 425$, а пропускная способность 500. Данное решение не доминируется ни одним решением из множества рекордов, поэтому $R = \{(0, 280), (100, 380), (225, 450), (425, 500)\}$.

Ветвление из вершины 17 невозможно, поэтому выполняется переход сначала в вершину 15, затем в вершину 11 (так как ветвление в 15 завершено) и аналогично происходит переход в вершину 10.

Для вершины 10 был рассмотрен случай, когда ребро из E' с номером 2 не было построено. Теперь рассматривается случай, когда это ребро будет построено. Т.е. происходит переход в вершину дерева ветвлений с номером 18. Для данного подмножества решений нижняя оценка равна $(1025, 400)$, а верхняя $(725, 500)$. Верхняя оценка доминируется

решением $(425, 500)$ из R , поэтому ветвление из текущей вершины не имеет смысла. Происходит переход сначала в вершину 10, откуда выполняется переход в вершину 0 (так как ветвление 10 завершено). Ветвление из корня дерева завершено, поэтому алгоритм завершает свою работу.

Итак, найдено множество парето-оптимальных решений $\{\{\emptyset\}, \{4\}, \{1, 4\}, \{1, 3, 4\}\}$, которым соответствуют пары значений критериев $(0, 280)$, $(0, 380)$, $(225, 450)$ и $(425, 500)$ соответственно (для каждого решения указан список номеров ребер из E' , которые необходимо построить).

5. Заключение

Результаты вычислительных экспериментов показывают, что предложенная адаптация метода ветвей и границ для решения задачи оптимизации сети передачи данных является эффективной (алгоритм работает в три порядка быстрее метода полного перебора уже на задачах размерности 40).

Предложенный алгоритм является универсальным и может быть использован при решении любых задач структурной оптимизации – необходимо лишь изменить функции вычисления нижней и верхней оценок.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. A.H. Land, A.G. Doig., “An automatic method of solving discrete programming problems”, *Econometrica*, 1960, № 3, 497–520.
2. Е.А. Лазарев, Д.Е. Шапошников, П.В. Мисевич., “Бикритериальная модель сети передачи данных”, *Системы управления и информационные технологии*, 2011, № 3.2(45), 255–258.
3. А.В. Шмалько., *Цифровые сети связи: основы планирования и проектирования*, Эко-Трендз, М., 2001, 282 с.
4. Т. Кормен, Ч. Лейзерсон, Р. Ривест, К. Штайн., *Алгоритмы: построение и анализ*, Вильямс, М., 2006, 1296 с.

Adaptation of branch and bound method solving multicriterion problems of structural optimization

© Е. А. Lazarev²

Abstract. The work presents adaptation of branch and bound method solving multicriterion problems of structural optimization based on example of network optimization problem; computational results are presented.

Key Words: network design, branch and bound method, multicriterion optimization.

² Graduate student of the department of computer systems and technologies, Nizhny Novgorod State Technical University after R.E. Alekseev, Nizhny Novgorod; elazarev.nnov@gmail.com.

УДК 517.9

Бифуркация удвоения периода на простой дуге, соединяющей диффеоморфизмы Пикстона

© О.В. Починка¹, А.А. Романов²

Аннотация. Диффеоморфизм Пикстона определяется тем, что он структурно устойчив и его неблуждающее множество состоит ровно из четырёх точек: двух стоков, источника и седла. Несмотря на кажущуюся простоту, среди них есть представители с диким поведением сепаратрис. Тем не менее, как следует из [2], любые диффеоморфизмы класса Пикстона, неблуждающее множество которых состоит из неподвижных точек, соединяются простой дугой. При этом дуга содержит только седло-узловые бифуркации. В настоящей работе мы строим простую дугу с одной бифуркацией удвоения периода между диффеоморфизмом Пикстона с периодическими стоками и диффеоморфизмом типа “источник-сток”. Используя результаты работы [2], это позволяет констатировать наличие простой дуги между любыми диффеоморфизмами Пикстона.

Ключевые слова: диффеоморфизм Пикстона, простая дуга, бифуркация удвоения периода.

1. Введение

В [5] Ш.Ньюхаусом и М. Пейшото было доказано, что любые потоки Морса-Смейла связаны между собой простой дугой. Простота означает, что дуга содержит не более конечного числа точек вне потоков Морса-Смейла и, грубо говоря, для этих особых точек соответствующие пересечения устойчивых и неустойчивых многообразий наименьшим образом отклоняются от структурно устойчивого состояния.

Для дискретных динамических систем ситуация иная. Два сохраняющих ориентацию диффеоморфизма Морса-Смейла на окружности могут быть соединены *простой дугой* (см. определение 2.1. ниже), если и только если они имеют одинаковое число вращения. Как следует из работ Ш. Мацумото [4] и П. Бланшара [1], любая ориентируемая замкнутая поверхность допускает изотопные диффеоморфизмы Морса-Смейла, которые не могут быть соединены простой дугой. Начиная с размерности 3 эта проблема не является тривиальной даже для диффеоморфизмов типа “источник-сток”. В [2] было показано, что на S^6 существуют два таких диффеоморфизма, которые не могут быть соединены гладкой дугой, но на S^3 , они соединяются гладкой дугой, состоящей из диффеоморфизмов “источник-сток”.

Как известно теперь, в размерности $n = 3$ ситуация с диффеоморфизмами Морса-Смейла усугубляется наличием дико вложенных сепаратрис (компонент связности инвариантных многообразий периодических точек без самих точек) седловых точек. Первый “дикий” пример был построен в классе Пикстона в [7], этот класс состоит из трёхмерных диффеоморфизмов Морса-Смейла, у которых неблуждающее множество состоит ровно из четырёх точек: двух стоков, источника и седла. Как следует из [2], любые диффеоморфизмы класса Пикстона, неблуждающее множество которых состоит из неподвижных точек, соединяются простой дугой. В настоящей работе мы обобщаем этот результат, снимая ограничение на неподвижность неблуждающих точек.

¹ Доцент кафедры теории функций ННГУ им. Н.И. Лобачевского; olga-pochinka@yandex.ru

² Магистрант кафедры теории функций ННГУ им. Н.И. Лобачевского; romanov18.04@mail.ru

2. Формулировка результатов

Пусть $Diff(M^n)$ — множество диффеоморфизмов на замкнутом многообразии M^n с C^1 -топологией. Гладкой дугой в $Diff(M^n)$ называется гладкое отображение $\xi : M^n \times [0, 1] \rightarrow M^n$, или, что эквивалентно, гладко зависящее от t семейство диффеоморфизмов $\{\xi_t \in Diff(M^n), t \in [0, 1]\}$. Для описания типичных свойств гладкой дуги (выполняющихся для всех дуг из счетного пересечения открытых плотных подмножеств в пространстве гладких дуг) мы напомним следующие понятия.

Пусть $KS(M^n)$ множество всех диффеоморфизмов *Купки-Смейла*, то есть диффеоморфизмов, периодические орбиты которых гиперболические и их устойчивые и неустойчивые многообразия трансверсальны. Для гладкой дуги ξ множество $B(\xi) = \{t \in [0, 1], \xi_t \notin KS(M^n)\}$ называется *бифуркационным множеством*. Для типичного множества дуг бифуркационное множество является счётным и каждая бифуркация ξ_b , $b \in B(\xi)$ имеет один из нижеследующих типов с точностью до направления движения по дуге (см., например, [6]). На поясняющих рисунках двойными стрелками схематично изображены направления гиперболического сжатия и растяжения.

1) Все периодические орбиты диффеоморфизма ξ_b гиперболические, за исключением одной $\mathcal{O}_x$ периода k , для которой все собственные значения $(Df^k)_x$ по модулю отличны от 1, кроме одного $\lambda = 1$. Переход через ξ_b сопровождается слиянием и дальнейшим исчезновением гиперболических периодических точек одного и того же периода. Такая бифуркация называется *седло-узловой* (см. рисунок 1).

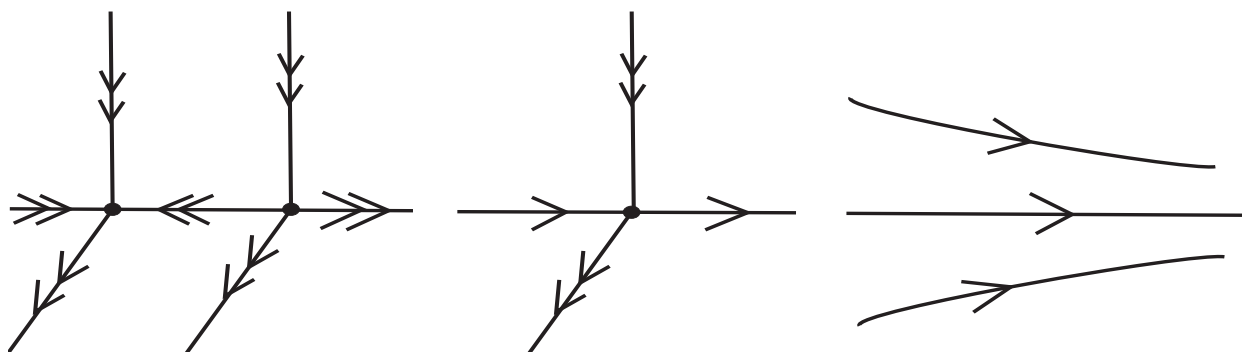


Рис. 1: Бифуркация седло-узел

2) Все периодические орбиты диффеоморфизма ξ_b гиперболические, за исключением одной $\mathcal{O}_x$ периода k , для которой все собственные значения $(Df^k)_x$ по модулю отличны от 1, кроме одного $\lambda = -1$. При переходе через ξ_b , вдоль соответствующего λ собственного направления, аттрактор становится репеллером и рождается периодическая гиперболическая орбита периода $2k$. Такая бифуркация называется *удвоением периода* (см. рисунок 2).

3) Все периодические орбиты диффеоморфизма ξ_b гиперболические, за исключением одной пары комплексно сопряженных $\lambda, \bar{\lambda}$, где $\lambda = e^{i\theta}$ $0 < \theta < \pi$. При переходе через ξ_b аттрактор становится репеллером и вблизи него появляется инвариантная окружность. Такая бифуркация называется *бифуркацией Хопфа* (см. рисунок 3).

4) Все периодические орбиты диффеоморфизма ξ_b гиперболические, их устойчивые и неустойчивые многообразия имеют трансверсальные пересечения вдоль всех траекторий, кроме одной $\mathcal{O}_x$, принадлежащей пересечению $W_p^s \cap W_q^u$ инвариантных многообразий различных периодических точек p, q , при этом $T_x W_p^s + T_x W_q^u$ является $(n - 1)$ -мерным

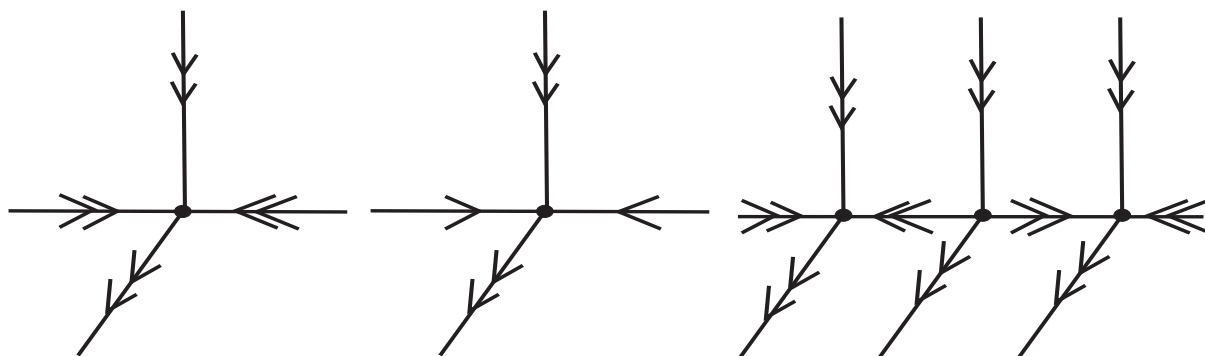


Рис. 2: Бифуркация удвоения периода

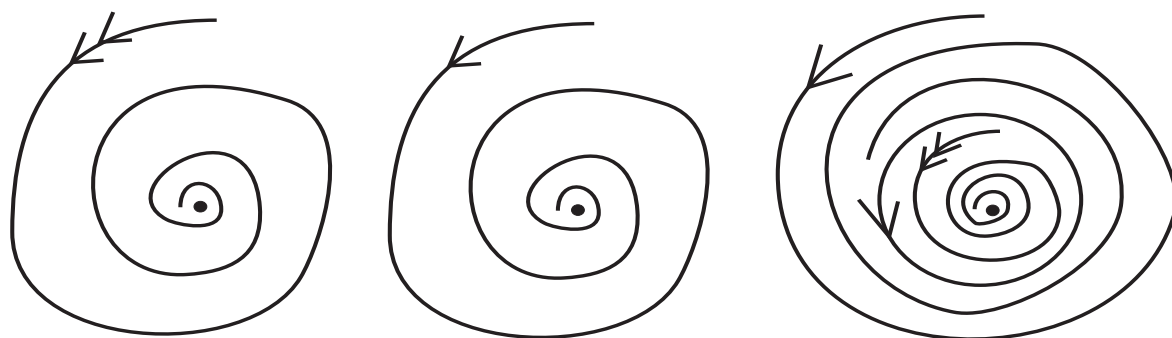


Рис. 3: Бифуркация Хопфа

подпространством $T_x M^n$. Дiffeоморфизмы ξ_{t_1}, ξ_{t_2} являются Ω -сопряженными для значений t_1, t_2 близких к b . Такая бифуркация называется *бифуркацией гетероклинического касания* (см. рисунок 4).

Дiffeоморфизм Купки-Смейла с конечным неблуждающим множеством называется диффеоморфизмом *Морса-Смейла*. Обозначим через $MS(M^n)$ множество диффеоморфизмов Морса-Смейла.

О п р е д е л е н и е 2.1. Дуга ξ называется простой, если $\xi_t \in MS(M^n)$ для любого $t \in ([0, 1] \setminus B(\xi))$, бифуркационное множество $B(\xi)$ конечно и бифуркации имеют один из типов 1)-4) выше.

Обозначим через $J \subset \text{Diff}(\mathbb{S}^3)$ множество сохраняющих ориентацию диффеоморфизмов “Северный полюс - Южный полюс”, то есть диффеоморфизмов, неблуждающие множества которых состоят в точности из двух гиперболических точек: источник, сток. В настоящей работе рассматривается класс Пикстона $\mathcal{P}$, сохраняющих ориентацию диффеоморфизмов Морса-Смейла, заданных на 3-сфере $\mathbb{S}^3$ и имеющих неблуждающее множество, состоящее ровно из четырёх точек: двух стоков, источника и седла. Обозначим через $\mathcal{P}_+$ подмножество $\mathcal{P}$, состоящее из всех диффеоморфизмов, неблуждающее множество которых состоит из неподвижных точек. Положим $\mathcal{P}_- = \mathcal{P} \setminus \mathcal{P}_+$. Следующие предложения доказаны в разделе 4.3.2 книги [3].

П р е д л о ж е н и е 2.1. Для любых диффеоморфизмов $f, f' \in J$ существует гладкая дуга $\{f_t \in J\}$ их соединяющая.

П р е д л о ж е н и е 2.2. Для любого диффеоморфизма $f \in \mathcal{P}_+$ существует простая дуга с одним бифуркационным значением типа седло-узел, соединяющая f с некоторым диффеоморфизмом из множества J .

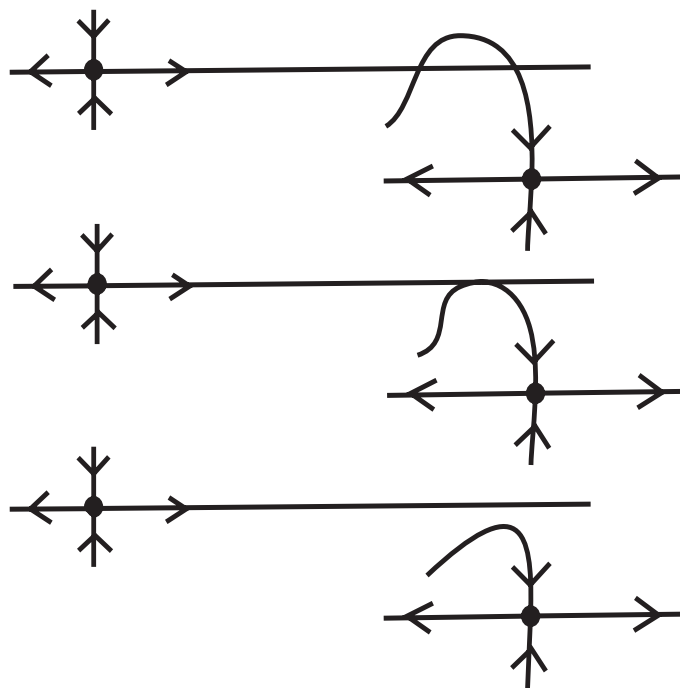


Рис. 4: Бифуркация гетероклинического касания

Основным результатом работы является следующая теорема.

Т е о р е м а 2.1. Для любого диффеоморфизма $f \in \mathcal{P}_-$ существует простая дуга $\{f_t \in \text{Diff}(\mathbb{S}^3)\}$ с одним бифуркационным значением типа удвоения периода такая, что:

- 1) $f_0 = f$, $f_1 \in J$;
- 2) $f_t \in \mathcal{P}_-$ для всех $t \in [0, \frac{1}{2})$;
- 3) $f_t \in J$ для всех $t \in (\frac{1}{2}, 1]$;
- 4) неблуждающее множество диффеоморфизма $f_{\frac{1}{2}}$ состоит из одного гиперболического источника и одного негиперболического стока.

Следствием вышеприведённых предложений и теоремы является следующий результат.

Т е о р е м а 2.2. Любые диффеоморфизмы $f, f' \in \mathcal{P}$ можно соединить простой дугой.

Благодарности. Авторы благодарят В.З. Гринеса за полезные обсуждения и замечания. Первый автор благодарит 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. Построение простой дуги между диффеоморфизмом $f \in \mathcal{P}_-$ и некоторым диффеоморфизмом из класса J

Напомним, что $\mathcal{P}_-$ — класс диффеоморфизмов Морса-Смейла $f : \mathbb{S}^3 \rightarrow \mathbb{S}^3$, неблуждающее множество которых состоит из неподвижного источника α_f , неподвижного седла σ_f и периодических стоков ω_f^1, ω_f^2 ; γ_f^1, γ_f^2 — неустойчивые сепаратрисы точки σ_f , содержащие стоки ω_f^1, ω_f^2 , соответственно, в своих замыканиях. В силу структурной устойчивости

дiffeоморфизма f и всюду плотности C^2 -дiffeоморфизмов в пространстве всех diffeоморфизмов, без уменьшения общности можно считать что diffeоморфизм f имеет класс гладкости C^2 . Кроме того, в силу предложения 4.3.1 и леммы 4.3.10 [3], без уменьшения общности можно полагать, что многообразие $W_{\sigma_f}^u$ принадлежит некоторой гладкой кривой l , для которой точки ω_f^1, ω_f^2 являются внутренними и $f(l) \subset l$.

Определим на интервале $(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ однопараметрическое семейство $P_t(x_3) = (-\frac{10}{9} + \frac{2}{9}t)x_3 + x_3^3$, которое при $t = 0$ имеет вид $P(x_3) = -\frac{10}{9}x_3 + x_3^3$, что соответствует отображению с одной неподвижной точкой 0 и двумя периодическими точками $x_3 = \frac{1}{3}$ и $x_3 = -\frac{1}{3}$, а при $t = \frac{1}{2}$ принимает вид $P(x_3) = -x_3 + x_3^3$, что соответствует отображению с одной неподвижной негиперболической точкой $x_3 = 0$. При $t = 1$ получится, соответственно, отображение $P(x_3) = -\frac{8}{9}x_3 + x_3^3$ с одной неподвижной гиперболической точкой $x_3 = 0$.

Положим $\tilde{R}_t(x_3) = \begin{cases} P_t(x_3), x_3 \in [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}], \\ \frac{(8t-31)x_3}{36}, x_3 \in (-\infty, -\frac{1}{2}) \cup (\frac{1}{2}, \infty). \end{cases}$

Рассмотрим однопараметрическое семейство diffeоморфизмов $\zeta_t : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$, заданное формулой $\zeta_t(x_1, x_2, x_3) = (Q(x_1, x_2), R_t(x_3))$, где $Q(x_1, x_2) : Ox_1x_2 \rightarrow Ox_1x_2$ — меняющий ориентацию diffeоморфизм с гиперболическим стоком $O(0, 0, 0)$, заданный формулой $Q(x_1, x_2) = (-\frac{1}{2}x_1, \frac{1}{2}x_2)$ и $R_t : Ox_3 \rightarrow Ox_3$ — однопараметрическое семейство diffeоморфизмов, получающееся $\tilde{R}_t$ сглаживанием в точках $\pm\frac{1}{2}$. Положим $C = \{(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3 : (x_1^2 + x_2^2 \leq 1, -\frac{1}{2} \leq x_3 \leq \frac{1}{2})\}$. Заметим, что $\zeta_t(C) \subset \text{int } C$.

Выберем окрестность $V \subset \mathbb{S}^3$ множества $cl(W_{\sigma_f}^u)$ такую, что $f(V) \subset V$ и гомеоморфизм $\eta : V \rightarrow C$, сопрягающий $f|_V$ с $\zeta_0|_C$, со следующими свойствами:

- 1) V не содержит источник α_f ;
- 2) $\eta(V \cap l) = Ox_3 \cap C$, $\eta(\omega_f^1) = (0, 0, -\frac{1}{3})$, $\eta(\sigma_f) = (0, 0, 0)$ и $\eta(\omega_f^2) = (0, 0, \frac{1}{3})$.

Определим на V изотопию g_t формулой $g_t = \eta^{-1}\zeta_t\eta$. Заметим, что $g_0 = f$. Аналогично построениям в доказательстве леммы 4.3.4 [3] можно построить искомую изотопию f_t , она совпадает с изотопией g_t на V , и для каждого $t \in [0, 1]$ имеет единственную неблуждающую точку α_f вне V .

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Blanchard P., “Invariants of the NPT isotopy classes of Morse-Smale diffeomorphisms of surfaces”, *Duke Math. J.*, **47**:1 (1980), 33–46.
2. Бонатти Х., Гринес В.З., Медведев В.С., Починка О.В., “Бифуркации diffeоморфизмов Морса-Смейла с дико вложенными сепаратрисами”, *Труды МИ РАН.*, **256** (2007), 54–69.
3. 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, М. - Ижевск, 2011.
4. Matsumoto S., “There are two isotopic Morse-Smale diffeomorphism which can not be joined by simple arcs”, *Invent. Math.*, **51** (1979), 1–7.
5. Newhouse S., Peixoto M.M., “There is a simple arc joining any two Morse-Smale flows”, *Asterisque*, **31** (1976), 15–41.

6. Palis J., “Arcs of dynamical systems: bifurcations and stability”, *Lecture Notes in Mathematics*, **468** (1975), 48–53.
7. Pixton D., “Wild unstable manifolds”, *Topology*, **16**:2 (1977), 167–172.

Period-doubling bifurcation in a simple arc connecting Pixton’s diffeomorphisms

© O. V. Pochinka³, A. A. Romanov⁴

Abstract. Pixton’s diffeomorphism determined that it is structurally stable and its nonwandering set consists of exactly four points: two sinks, a source and a saddle. Class of such diffeomorphisms include representatives with the wild behavior of the separatrices. However, as in [2] was proved that all Pixton’s diffeomorphisms whose nonwandering set consists of fixed points are connected by a simple arc. In this arc only saddle-node bifurcation exists. In this paper we construct a simple arc with period-doubling bifurcation between Pixton’s diffeomorphism with periodic sinks and diffeomorphism of “source-sink”. Using the results and [2], it is possible to claim that a simple arc between any Pixton’s diffeomorphisms exist

Key Words: Pixton’s diffeomorphism, simple arc, period-doubling bifurcation.

³ Docent of theory function chair of Nizhny Novgorod State University after N.I. Lobachevsky; olga-pochinka@yandex.ru

⁴ Undergraduate of theory function chair of Nizhny Novgorod State University after N.I. Lobachevsky; romanov18.04@mail.ru

УДК 517.97

Поиск оптимального температурного режима процесса димеризации α -метилстирола на основе генетических алгоритмов

© Е. В. Степашина¹, С. А. Мустафина²

Аннотация. В работе построен генетический алгоритм с вещественным кодированием для решения задачи поиска оптимального управления промышленно значимым процессом димеризации α -метилстирола. Получен оптимальный температурный профиль и оптимальные концентрации реагентов.

Ключевые слова: процесс димеризации α -метилстирола, генетический алгоритм, оптимальное управление.

1. Введение

В настоящее время возможности повышения производительности реакторов за счет увеличения их размеров практически исчерпаны. В связи с этим возникает задача интенсификации каталитических процессов за счет новых способов их ведения.

Кинетическая модель химического процесса описывается системой нелинейных дифференциальных уравнений. Применение для ее решения численных методов, реализующих соответствующие необходимые и достаточные условия оптимальности, нередко связано с большими вычислительными затратами, трудностями в достижении сходимости процесса, неэффективностью алгоритмов при увеличении размерности вектора состояния объекта. В настоящее время широкую популярность приобретают генетические алгоритмы, позволяющие эффективно отыскивать глобальный оптимум за приемлемое время [1]. Основная идея генетических алгоритмов состоит в том, что они имитируют в своей работе природные способы оптимизации: наследование и естественный отбор. Суть механизма естественного отбора заключается в том, что в процессе эволюции выживают и размножаются наиболее приспособленные особи. Благодаря механизму генетического наследования их потомки сохраняют основные качества родителей, и, подвергаясь случайным мутациям, приобретают ряд новых свойств. Если новые свойства полезны, то они сохраняются и наследуются.

Классические генетические алгоритмы применимы к решению задачи оптимизации целевой функции $f(x) = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$, определенной на множестве допустимых решений $D \subseteq R^n$, и позволяют найти ее условный глобальный максимум на заданном множестве, т.е. такую точку $x^* \in D$, что $f(x^*) = \max_{x \in D} f(x)$. Задача поиска минимума функции $f(x)$ сводится к задаче поиска максимума путем замены знака перед функцией на противоположный: $f(x^*) = \min_{x \in D} f(x) = -\max_{x \in D} [-f(x)]$.

Рассматриваемая целевая функция $f(x)$ эквивалентна понятию приспособленности живого организма. Вектор параметров $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ целевой функции называется *фенотипом*, а отдельные его параметры x_i – *признаками* ($i = \overline{1, n}$).

¹ Аспирант кафедры математического моделирования, Стерлитамакская государственная педагогическая академия, г. Стерлитамак; zhenja05@rambler.ru.

² Заведующий кафедрой математического моделирования, Стерлитамакская государственная педагогическая академия, г. Стерлитамак.

Кодированное представление компонентов вектора аргументов служит *генотипом*. Набор генов называют *хромосомой* или *особью*, которая определяет точку в пространстве поиска. Совокупность особей представляет собой *популяцию*.

Наиболее распространенным способом перевода фенотипа в генотип является бинарное кодирование. В этом случае хромосома представляет собой битовую строку. Двоичное представление хромосом влечет за собой определенные трудности при выполнении поиска в непрерывных пространствах, которые связаны с большой размерностью пространства поиска. В связи с этим был разработан новый тип генетических алгоритмов – генетический алгоритм с вещественным кодированием. Основная его идея заключается в том, чтобы представлять гены в виде вещественных чисел, т.е. генотип объекта становится идентичным его фенотипу. Вектор хромосомы состоит из вектора вещественных чисел, и точность найденного решения будет определяться не количеством разрядов для кодирования битовой строки, а будет ограничена возможностями ЭВМ, на которой реализуется вещественный генетический алгоритм. Применение вещественного кодирования может повысить точность найденных решений и повысить скорость нахождения глобального минимума или максимума. Скорость повышается из-за отсутствия процессов кодирования и декодирования хромосом на каждом шаге алгоритма.

Сильной стороной генетических алгоритмов является их способность решать многоэкстремальные задачи без наложения условий на вид оптимизируемой функции (отсутствуют требования на непрерывность самой функции и ее производных). Важным достоинством генетических алгоритмов является то, что для них неважно начальное приближение.

2. Постановка задачи

В задачах химической кинетики теоретическая оптимизация осуществляется на основе кинетической модели с последующим выбором технологической схемы реактора, позволяющим наилучшим образом приблизиться к теоретическому оптимальному режиму. Полученный оптимальный режим определяет предельные возможности технологии. При осуществлении процесса в реальном аппарате технологические показатели, например, выхода полезного продукта могут быть ниже полученных характеристик на этапе теоретической оптимизации. Последние являются некоторой оценкой сверху качества той или иной выбранной технологии.

Рассмотрим математически формализованную постановку задачи оптимального управления. Пусть управляемый процесс представлен системой обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i(t, x, u), \quad (2.1)$$

где x – вектор состояния системы, $x = (x_1, \dots, x_n)^T \in R^n$; u – вектор управления, $u = (u_1, \dots, u_q)^T \in U \subseteq R^q$, U – некоторое заданное множество допустимых значений управления; t – время, $t \in [t_0, t_N]$ – промежуток времени функционирования системы; $f_i(t, x, u)$ – непрерывные вместе со своими частными производными функции.

При $t = 0$ заданы все начальные значения фазовых переменных x_i :

$$x_i(0) = x_{i0}, \quad i = \overline{1, n}. \quad (2.2)$$

Правый конец траектории свободен.

Множество допустимых процессов $D(t_0, x_0)$ – это множество пар $d = (x(t), u(t))$, включающих траекторию $x(t)$ и управление $u(t) \in U$, удовлетворяющих системе (2.1) и начальному условию (2.2).

На множестве допустимых процессов определен функционал качества управления $I(d) = F(x(t_N))$, где $F(x)$ – заданная непрерывная функция.

Требуется найти такую пару $d^* = (x^*(t), u^*(t)) \in D(t_0, x_0)$, что $I(d^*) = \max_{d \in D(t_0, x_0)} I(d)$.

Схема работы генетического алгоритма состоит из следующих основных шагов:

Шаг 1. Создание начальной популяции. Случайным образом на множестве допустимых значений управления формируется начальная популяция:

$$u^k = (u_{11}^k, \dots, u_{1q}^k, u_{21}^k, \dots, u_{2q}^k, \dots, u_{N1}^k, \dots, u_{Nq}^k) = (u_1^k, u_2^k, \dots, u_n^k),$$

где m – размер популяции, N – число шагов, $n = N \cdot q$, $k = \overline{1, m}$.

Вычисляется значение функции приспособленности для каждой особи.

Шаг 2. Селекция – это операция, которая осуществляет отбор особей (хромосом) в соответствии со значениями функции приспособленности для последующего их скрещивания. В генетических алгоритмах может применяться стратегия элитизма. Ее суть в том, что небольшое количество особей переходит в следующее поколение без изменений, не участвуя в селекции и последующем скрещивании. Результатом шага 2 являются две особи, выбранные в качестве родительской пары с помощью одного из операторов селекции.

Шаг 3. Скрещивание – это операция, при которой из нескольких, обычно двух хромосом (особей), называемых родителями, порождается одна или несколько новых, называемых потомками, путем обмена частями родительских хромосом.

Шаг 4. Мутация – это преобразование хромосомы, случайно изменяющее обычно один (реже несколько) из ее генов. Оператор мутации предназначен для того, чтобы поддерживать разнообразие особей в популяции.

Шаг 5. Формирование новой популяции. С вероятностью 0,5 выбирается один из потомков, выбранный потомок добавляется в популяцию вместо хромосомы, которой соответствует наименьшее среди элементов популяции значение функции приспособленности.

Шаг 6. Проверка условия окончания работы генетического алгоритма (сформировано заданное количество популяций). Если условие не выполнено, то переходим к шагу 2. Если условие окончания работы выполнено, то в качестве решения выбирается особь с лучшим значением функции приспособленности из текущей популяции. Значение целевой функции при этом будет равно $I(d^*) = I(x^*, u^*)$.

3. Вычислительный эксперимент

Используя генетические алгоритмы, решим задачу поиска оптимального управления промышленно значимым процессом димеризации α -метилстирола. Совокупность химических превращений, описывающих данную реакцию, представляется следующей схемой стадий [2]:



где X_1 – α -метилстирол, X_2 – α -димер, X_3 – β -димер, X_4 – циклический димер, X_5 – тримеры. Согласно закону действующих масс кинетические уравнения, соответствующие схеме химических превращений (3.1), можно выразить уравнениями:

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

где $\omega_i(t, x)$ – скорость i -й стадии (моль/л/ч), $i = \overline{1, 9}$; $t \in (0, 3)$ – время реакции (ч); $x = (x_1, \dots, x_5)^T$ – вектор концентраций компонентов (мольные доли); $k = (k_1, \dots, k_{12})^T$ – вектор кинетических констант скоростей j -й реакции, причем $k_j = k_j^0 \exp(-\frac{E_j}{RT})$, $j = \overline{1, 12}$, энергии активации E_j (Дж/моль) и универсальная газовая постоянная R (Дж/мольК) – константы, $T = T(t)$ – температура (К).

Кинетическая модель процесса димеризации α -метилстирола с учетом изменения реакционного объема в ходе протекания реакции представляется системой:

$$\begin{aligned}\frac{dx_i}{dt} &= \frac{F_i(x, T) - x_i F_n(x, T)}{N}, \quad \text{где} \quad F_i = \sum_{j=1}^9 \nu_{ij} \omega_j, \quad i = \overline{1, 5}; \\ \frac{dN}{dt} &= F_n(x, T), \quad \text{где} \quad F_n = \sum_{j=1}^9 \omega_j \sum_{i=1}^5 \nu_{ij},\end{aligned}\tag{3.3}$$

с начальными условиями:

$$x_i(0) = x_i^0, \quad i = \overline{1, 5}; \quad N(0) = 1,\tag{3.4}$$

где N – переменный реакционный объем, (ν_{ij}) – матрица стехиометрических коэффициентов ($i = \overline{1, 5}, j = \overline{1, 9}$).

Пусть параметром оптимизации является температура в реакторе. Задача поиска оптимального управления формулируется как задача нахождения оптимального температурного режима процесса, описываемого системой (3.3) с заданными начальными условиями (3.4). Критерий оптимальности – максимальный выход линейных димеров при минимальном выходе циклических димеров

$$x_2(\tau_k) + x_3(\tau_k) - x_4(\tau_k) \rightarrow \max, \quad \tau_k = 3(\text{ч})\tag{3.5}$$

Исходя из технологических соображений на выбор оптимального значения температуры наложены ограничения $30^\circ\text{C} \leq T \leq 130^\circ\text{C}$. Для решения поставленной задачи использовался генетический алгоритм с вещественным кодированием со следующими параметрами: количество особей в популяции – 60, количество популяций – 5000, оператор селекции – турнирный отбор, оператор скрещивания – арифметический кроссовер, оператор мутации – случайная мутация. Для численного решения системы дифференциальных уравнений применялся метод прогноза и коррекции.

4. Результаты

По результатам вычислительного эксперимента получены оптимальный температурный режим и оптимальные концентрации реагентов, представленные на рис.1.

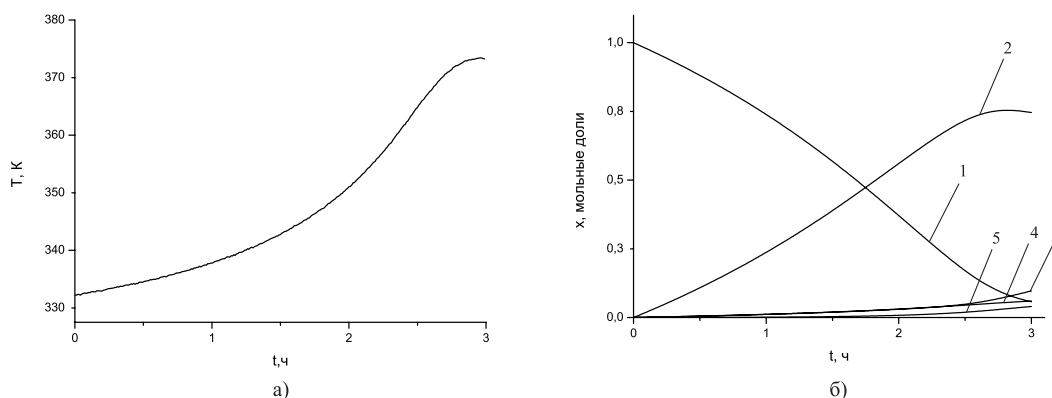


Рис.1. а) Оптимальный температурный режим; б) Оптимальные концентрации реагентов (1 – α -метилстирол, 2 – α -димер, 3 – β -димер, 4 – циклический димер, 5 – тримеры).

Ранее было получено решение задачи поиска теоретического оптимального температурного режима процесса димеризации α -метилстирола на основе принципа максимума Понтрягина. Сравнительный анализ результатов численного решения задачи представлен ниже в таблице.

	Концентрации реагентов, полученные с помощью принципа максимума Понтрягина	Концентрации реагентов, полученные с помощью генетического алгоритма	Относительная погрешность
Линейные димеры	80,2 %	84,26 %	4,8 %
Циклический димер	7,6 %	6,5 %	16,9 %
Тримеры	4,8%	4,1%	17 %
Селективность α -метилстирола	92,4 %	94,86%	2,6 %

Таблица 2: Сравнение результатов решения задачи поиска оптимального управления процессом димеризации α -метилстирола

Время счета генетического алгоритма меньше (6 мин) по сравнению с алгоритмом на основе принципа максимума Понтрягина (11 мин). Таким образом, построенный генетический алгоритм с вещественным кодированием можно применять для решения задачи поиска оптимального управления химическим процессом.

На основе построенного генетического алгоритма с вещественным кодированием разработан программный продукт, который носит универсальный характер, поскольку при замене блока реакций может быть адаптирован к другим химическим процессам для решения задачи поиска оптимального управления.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Пантелеев А. В., Метлицкая Д. В., “Генетические алгоритмы поиска оптимального управления непрерывными детерминированными системами”, *Электронный журнал «Труды МАИ»*, 2011, № 45, 33–37.
2. Степашина Е. В., Мустафина С. А., “Формирование математической модели каталитических процессов с переменным реакционным объемом на основе теоретико-графового подхода”, *Известия Томского политехнического университета*, **320**:3 (2012), 31–36.
3. Гнатенко Ю. А., *Математическое моделирование и теоретическая оптимизация процесса олигомеризации α -метилстирола*, дисс. ... канд. физ.-матем. наук, Стерлитамак, 2005, 143 с.

Search the optimal temperature of the process of dimerization α -methylstyrene based on genetic algorithms.

© E. V. Stepashina³, S. A. Mustafina⁴

Abstract. In this paper the genetic algorithm with real coding solutions for the optimal control problem of the significant industrial process of dimerization α -methylstyrene is designed. Obtained optimal temperature profile and the optimal concentration of reagents.

Key Words: process of dimerization α -methylstyrene, genetic algorithm, optimal control.

³Graduate student of mathematical modeling, Sterlitamak State Pedagogical Academy, Sterlitamak; zhenja05@rambler.ru.

⁴Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of Mathematical Modelling Chair, Sterlitamak State Pedagogical Academy, Sterlitamak.

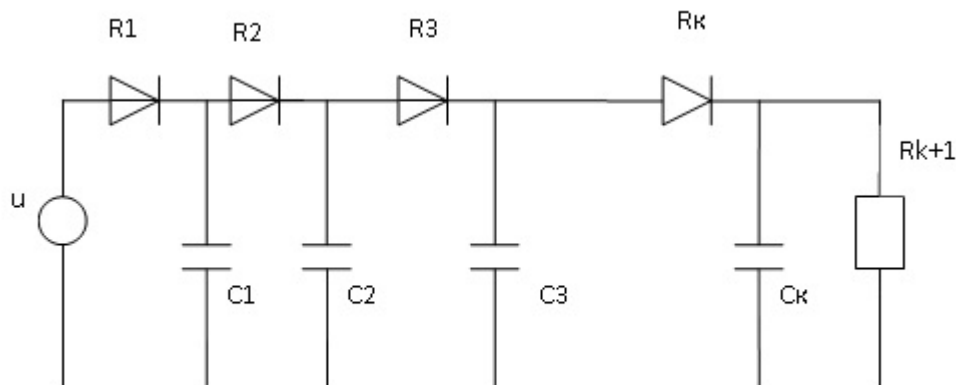
Решение задачи Коши для дифференциальных уравнений электрических цепей численным методом

© Е. А. Черноиванова¹

Аннотация. В работе рассматривается численный метод решения задачи Коши, предложенный Е.В.Воскресенским, для дифференциальных уравнений с правой частью типа Каратеодори. Этот метод применяется для уравнений, описывающих зависимость падений напряжений на конденсаторах от других элементов цепи.

Ключевые слова: дифференциальное уравнение, задача Коши, асимптотическая эквивалентность по Левинсону, численное решение задачи Коши с наперед заданной точностью

Рассмотрим численный метод решения задачи Коши, при помощи которого с любой наперед заданной точностью можно вычислить решения дифференциальных уравнений на любом компакте из $[0, +\infty)$. Пусть дифференциальные уравнения описывают электрическую цепь, изображенную на рисунке:



Здесь C_j - емкость j -го конденсатора в цепи, R_j - сопротивления диодов ($j = \overline{1, k}$), i_p - величина тока $p = \overline{0, 2k}$, R_{k+1} - активное сопротивление.

В общем случае система уравнений имеет вид

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x), \quad (1.1)$$

$f \in C([T, +\infty) \times R_n, R_n)$. Вопросу решения задачи Коши $x(t_0) = x_0, T \leq t_0 \leq +\infty, x_0 \in R^n$ посвящено много работ. Можно применить метод последовательных приближений, который здесь всегда является сходящимся. Однако скорость и область сходимости зависят как от f , так и от начального условия - точки (x_0, t_0) . Применим численный метод [1] решения задачи Коши для уравнения (1.1), когда функция f типа Каратеодори. Рассмотрим уравнения

$$\frac{dx}{dt} = A(x) + f(t, x), \quad (1.2)$$

$$\frac{dx}{dt} = Ay, \quad (1.3)$$

¹ Доцент кафедры общеобразовательных дисциплин, Саранский кооперативный институт; elen.chernoivanova@yandex.ru

A - матрица с постоянными коэффициентами.

Пусть все решения уравнения (1.3) являются ограниченными и

$$\|f(t, x)\| \leq \psi(t)\|x\|, \int_T^{+\infty} \psi(t)dt < +\infty$$

также

$$\|f(t, x_1) - f(t, x_2)\| \leq \varphi(t)\|x_1 - x_2\|, \text{ при любых } x_1, x_2 \in R^n$$

$$\int_T^{+\infty} \psi(t)dt < +\infty$$

Требуется найти решение задачи Коши $x(t_0) = x_0, T \leq t_0 \leq +\infty, x_0 \in R^n$ для уравнения (2). В этом случае уравнения (2) и (3) являются асимптотически эквивалентными по Левинсону на всем пространстве R^n . Здесь в качестве функций сравнения можно взять $\mu_i = 1, i = \overline{1, n}$. Следовательно, существует биекция $P: R^n \rightarrow R^n$ такая, что

$$x(t: t_0, x_0) = y(t: t_0, Px_0) + O(1), t \rightarrow +\infty.$$

$$y_0 = Px_0 = x_0 + \int_{t_0}^{+\infty} Y^{-1}(s)f(s, x(s))ds$$

Тогда решение $x(t: t_0, x_0)$ можно представить как

$$x(t: t_0, x_0) = Y(t)Px_0 - Y(t) \int_{t_0}^{+\infty} Y^{-1}(s)f(s, x(s: t_0, x_0))ds$$

Пусть X - банахово пространство всех ограниченных непрерывных вектор-функций на множестве $[T, +\infty)$ с нормой $\|x\| = \sup_{t \in [T, +\infty)} \|x(t)\|, x \in X$.

В пространстве X рассмотрим оператор

$$Lx = Y(t)Px_0 - Y(t) \int_t^{+\infty} Y^{-1}(s)f(s, x(s))ds$$

Этот оператор действует из X в X . Тогда

$$\|Lx_1 - Lx_2\| \leq \int_t^{+\infty} \|Y(t)Y^{-1}(s)\|\varphi(s)\|x_1 - x_2\|ds.$$

Отсюда

$$\rho(Lx_1, Lx_2) \leq \int_t^{+\infty} \|Y(t)Y^{-1}(s)\|\varphi(s)\rho(x_1, x_2)ds$$

$$\|Y(t)\| \leq C, \|Y(t)Y^{-1}(s)\| \leq C_1, t \geq T, \text{ следовательно, } \rho(Lx_1, Lx_2) \leq C_1 \int_t^{+\infty} \varphi(s)\rho(x_1, x_2)ds$$

При достаточно большом $T, t_0 \geq T$, можно считать, что $C_1 \int_t^{+\infty} \varphi(s) ds$ меньше единицы. Поэтому $\rho(Lx_1, Lx_2) \leq q\rho(x_1, x_2), 0 < q < 1$, оператор L является оператором сжатия в пространстве X . Следовательно, если рассматривать итерационный процесс

$$x_{n+1} = Lx_n, x_n \in X,$$

то он является сходящимся при любом выборе первоначальной точки итерации x_0 и достаточно большом t_0 . Кроме того,

$$\|x_n - x_{n-1}\| \leq \frac{q^n}{1-q} \|x_1 - x_0\|.$$

В численных методах приходится вычислять решения на конкретном компакте τ_1, τ_2 . Тогда

$$\|x_n(t : t_0, x_0) - x_{n-1}(t : t_0, x_0)\| \leq \frac{(q(t))^n}{1-q(t)} \|x_1(t : t_0, x_0) - x_0(t : t_0, x_0)\|, t \in (\tau_1, \tau_2).$$

Здесь $q(t) = C_1 \int_t^{+\infty} \varphi(s) ds$. Так как $\lim_{t \rightarrow +\infty} q(t) = 0$, то с увеличением τ_1 скорость сходимости увеличивается, $q(t)$ не зависит от выбора точки x_0 .

Применим рассмотренный численный метод к решению задачи Коши для уравнений, описывающих зависимость падений напряжений на конденсаторах от других элементов цепи. Пусть система принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= -(R_1^{-1} + R_2^{-1})x_1 + R_2^{-1}x_2 + R_1^{-1}u \\ \frac{dx_2}{dt} &= R_2^{-1}x_1 - (R_2^{-1} + R_3^{-1})x_2 \end{aligned}$$

Пусть $u(t, x_1, x_2) = \frac{\cos(x_1)}{t^2} x^2$ - величина источника напряжения в цепи.

Для уравнений (6) выполняются условия (4), (5):

$$\|f(t, x, u)\| \leq \frac{\alpha_1}{t^2} \|x\|, \|f(t, \bar{x}_1) - f(t, \bar{x}_2)\| \leq \frac{1}{t^2} \|\bar{x}_1 - \bar{x}_2\|, \forall \bar{x}_1, \bar{x}_2 \in R^2$$

Компоненты оператора L примут вид

$$\begin{aligned} Lx_1^{(n)} &= e^{r_1 t} y_{01} + e^{r_2 t} y_{02} + \int_t^{+\infty} \left(\frac{r_2 + \alpha_1 + \alpha_2}{r_2 - r_1} e^{r_1(t-s)} - \frac{r_1 + \alpha_1 + \alpha_2}{r_2 - r_1} e^{r_2(t-s)} \right) \alpha_1 \frac{\cos x_1^{n-1}}{s^2} x_2^{n-1} ds, \\ Lx_2^{(n)} &= \frac{1}{\alpha_2} (r_1 + \alpha_1 + \alpha_2) e^{r_1 t} y_{01} + \frac{1}{\alpha_2} (r_2 + \alpha_1 + \alpha_2) e^{r_2 t} y_{02} + \\ &+ \int_t^{+\infty} \frac{(r_1 + \alpha_1 + \alpha_2)}{(r_1 - r_2) \alpha_2} (e^{r_1(t-s)} - e^{r_2(t-s)}) \alpha_1 \frac{\cos x_1^{n-1}}{s^2} x_2^{(n-1)} ds \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} y_{01} &= x_1^0 + \int_{t_0}^{+\infty} Y^{-1}(s) f(s, x(s)) ds = 1 + \int_1^{+\infty} \frac{r_2 + \alpha_1 + \alpha_2}{r_2 - r_1} e^{-r_1 s} \frac{\cos x_1^0}{s^2} s_2^0 ds \\ y_{02} &= x_2 + \int_{t_0}^{+\infty} Y^{-1}(s) f(s, x(s)) ds = 1 - \int_1^{+\infty} \frac{r_1 + \alpha_1 + \alpha_2}{r_2 - r_1} e^{-r_1 s} \frac{\cos x_1^0}{s^2} x_2^0 ds \end{aligned}$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Воскресенский Е. В., *Асимптотические методы: теория и приложения*, СВМО, Саранск, 2000, 300 с.

Numerical method for the Cauchy problem for differential equations describing the dependence of the voltage drop

© Е. А. Chernoiivanova²

Abstract. This paper deals with numerical method for the Cauchy problem for differential equations with right part of Karateodory type. That was proposed by E.V. Voskrecensky. This method is applied to the equations describing the dependence of the voltage drop across the condensers on the other elements of the electrical circuit.

Key Words: differential equation, Cauchy problem, asymptotic equivalence on Levinson, numerical method of solution of Cauchy problem with preassigned accuracy..

² Associate professor of general educational disciplines, Saransk cooperative institute, Saransk; elen.chernoivanova@yandex.ru

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 539.192

Высокоточный расчет энергии атомов в приближении Рутана—Хартри—Фока

© Ю. Б. Малыханов¹, И. Н. Еремкин², М. В. Горшунов³, С. В. Евсеев⁴, Р. М. Чадин⁵

Аннотация. В рамках атомной теории Рутана—Хартри—Фока выполнены высокоточные расчеты аналитических хартри-фоковских орбиталей и энергии атомов от He до Xe. Нелинейные параметры атомных орбиталей оптимизировались с помощью методов второго порядка с высокой точностью. Благодаря этому удалось достичь точности выполнения вириального отношения $10^{-15} - 10^{-17}$, а вычисленные энергии термов атомов близки к хартри-фоковскому пределу.

Ключевые слова: атомная орбиталь, метод Рутана—Хартри—Фока, энергия, атом.

1. Введение

В расчетах энергии и волновых функций атомов с любым числом заполненных и открытых оболочек в алгебраическом приближении наибольшее распространение получила атомная теория Рутана—Хартри—Фока (РХФ) [1], в которой одноэлектронные функции ищутся в удобном для последующего использования аналитическом виде в форме разложения по базисным функциям заданного вида — атомным орбиталям (АО). В таком подходе задача сводится к нахождению минимума энергии ($\delta E = 0$) атома как функции многих неизвестных — орбитальных коэффициентов и нелинейных параметров АО (орбитальных экспонент ζ_i). Вместе с тем, задачу поиска минимума энергии можно разделить на две задачи — решение алгебраических уравнений самосогласованного поля (ССП) для орбитальных коэффициентов и нахождение оптимальных значений нелинейных параметров АО, дающих минимум энергии. Точность решения уравнений РХФ можно оценить с помощью, как минимум, двух критериев. Во-первых, достижением минимально возможного значения энергии, которое уже нельзя понизить. Этого можно достичь путем выбора оптимального базисного набора. Во-вторых, точностью, с которой выполняется теорема вириала, позволяющая оценить степень достоверности вычисленного значения энергии. Точность выполнения теоремы вириала напрямую зависит от глубины оптимизации орбитальных экспонент, что является, на наш взгляд, слабым звеном большинства известных на сегодняшний день расчетов атомов на основе метода Хартри—Фока (РХФ).

¹ Профессор кафедры физики и МОФ, Мордовский государственный педагогический институт имени М.Е. Евсевьева, г. Саранск; malykhanov@mail.ru.

² Преподаватель, АНО "Центр профессиональной подготовки г. Саранск; erylomkin@mail.ru

³ Аспирант кафедры физики и МОФ, Мордовский государственный педагогический институт имени М.Е. Евсевьева, г. Саранск; gorshunov_mv@mail.ru.

⁴ Соискатель, Мордовский государственный педагогический институт имени М.Е. Евсевьева, г. Саранск; evsey2006@ya.ru

⁵ Методист, Мордовский республиканский институт образования, г. Саранск; rmchadin@edurm.ru

2. Применение методов минимизации для решения уравнения Рутана—Хартри—Фока

Обширные расчеты атомов и ионов по программе, описанной в [1], выполненные Клементи и Роеитти [2] и несколько уточненные в работах Т. Кога и др. [3],[4], не удовлетворяют запросов исследователей из-за использования узких базисных наборов и ограниченной точности оптимизации экспонент АО. Несколько более точные расчеты выполнены Бунге и др. [5],[6], в которых теорема вириала выполняется с точностью $10^{-8}—10^{-9}$. Кога и др. [7],[8] улучшили точность вириального отношения до $10^{-9}—10^{-10}$, используя иной по составу базисный набор, чем в [5],[6]. В работе показано, что с использованием современных математических методов можно существенно повысить точность решения уравнений ХФ для атомов по сравнению с известными расчетами.

Полученные в [9] уравнения ССП можно решать циклическим методом Рутана, который в большинстве случаев имеет быструю сходимость [10]. Однако условия сходимости циклического метода теоретически не доказаны, и на практике имеют место случаи, когда эта процедура не сходится, и нужно применить другой метод решения. Уравнения ССП представляют собой систему нелинейных уравнений для орбитальных экспонент, которые можно вычислить с помощью методов минимизации. В программе для решения уравнений ССП используется циклический метод Рутана, а в случае расходимости процесса согласования подключается метод наискорейшего градиентного спуска, имеющий более широкую область сходимости. Для оптимизации орбитальных экспонент обычно используются методы прямой минимизации (методы нулевого порядка), например, метод сопряженных направлений Пауэлла [3]—[8]. Однако эти методы имеют медленную сходимость и дают ограниченную точность оптимизируемых параметров. Более перспективным является применение методов минимизации второго порядка, основанных на использовании величин $dE/d\zeta_i$ и $d^2E/d\zeta_i d\zeta_j$. В таких алгоритмах имеется строгий критерий окончания счета — необходимое условие минимума энергии $dE/d\zeta_i = 0$.

В программе использована многоступенчатая схема оптимизации экспонент, позволяющая выполнить оптимизацию с высокой точностью. С помощью прямого метода (Нелдера и Мида [11]) достаточно произвольно выбранные экспоненты оптимизируются с точностью $10^{-2}—10^{-4}$. С этими экспонентами запускается квазиньютоновский метод Муртага—Саджента [11], использующий значения производных $dE/d\zeta_i$, которые доводятся до точности $10^{-9}—10^{-10}$ а. е. На следующем этапе подключается метод Ньютона, в котором матрица Гессе находится приближенно численным дифференцированием точно вычисленных $dE/d\zeta_i$, и градиент доводится до величины $10^{-12}—10^{-15}$ а. е.

3. Результаты и выводы

Изложенная выше схема высокоточных расчетов аналитических ХФ-орбиталей и энергии была реализована для основных состояний нейтральных атомов от He до Xe. Расчеты выполнены в базисе орбиталей слэтеровского типа на персональном компьютере. Был использован достаточно широкий базисный набор, дальнейшее расширение которого практически не сказывается на значении энергии. По составу использованный нами базисный набор несколько отличается от базисов [6],[7] наличием атомных орбиталей с большими значениями главного квантового числа " n ". В табл. 1 в качестве примера приведены вычисленные нами значения полной энергии и точность выполнения теоремы Вириала для

атомов с заполняемой $3d^N$ ($0 \leq N \leq 10$) оболочкой. Из таблицы видно, что если теорема вириала выполняется с точностью 10^{-k} , то число достоверных значащих цифр в энергии по определению не может превышать числа " k ". Нами достигнута точность $10^{-15} - 10^{-17}$, с которой выполняется теорема вириала, а число достоверных значащих цифр в энергии составляет 13–16. Для сравнения в таблице приведены результаты расчетов, выполненные в рамках метода РХФ [7]. В этих расчетах вириальное отношение выполняется с точностью $10^{-8} - 10^{-10}$, и число достоверных значащих цифр не превышает 10. Из данных, помещенных в таблице, видно, что в пределах точности выполнения теоремы вириала, наши расчеты по значению энергии и достоверности значительно превосходят известные расчеты [7].

Т а б л и ц а 1. Энергии (в а. е.) основных состояний атомов, вычисленные на оптимизированном базисном наборе

Атом	$-E^a$	$-E^b$ [7]
Sc	759.735716991446098 (–16)	759.735714460 (–10)
Ti	848.405995780275858 (–17)	848.405993236 (–10)
V	942.884336293985705 (–16)	942.884333744 (–9)
Cr	1043.35637438105112 (–15)	1043.356371004 (–8)
Mn	1149.86624957918803 (–15)	1149.866247084 (–9)
Fe	1262.44366242037395 (–16)	1262.443660250 (–9)
Co	1381.41454992027885 (–15)	1381.414547210 (–9)
Ni	1506.87090455938460 (–16)	1506.870901660 (–10)
Cu	1638.96373672376829 (–15)	1638.963729081 (–8)
Zn	1777.84811016128697 (–16)	1777.848107862 (–10)

П р и м е ч а н и е: ^aНаш расчет; ^bЭнергия, рассчитанная в методе Рутана–Хартри–Фока [7]; В скобках указан порядок величины, с которой выполняется теорема вириала.

Анализ наших расчетов и расчетов других авторов показал, что полная энергия атома и энергии орбиталей напрямую зависят от размера базисного набора и в меньшей степени от его состава. Поэтому состав базиса можно выбирать в зависимости от конкретных приложений вычисленных орбиталей. Вычисленные аналитические части орбиталей можно домножить на соответствующие сферические функции, и полученные орбитали использовать для решения уравнений теории возмущений в приближении ХФ. Именно такой подход был реализован в расчетах поляризуемостей [12].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Roothaan C.C.J., Bagus P.S. Atomic Self-Consistent Field Calculations by the Expansion Method // Methods in Computational Physics. New York: Academic Press Inc. – 1963. – V. 2. – P. 47-94.
2. Clementi E., Roetti C. Roothaan–Hartree–Fock Atomic Wave Functions. Basis Functions and Their Coefficients for Ground and Certain Excited States of Neutral and Ionized Atoms // At. Data and Nucl. Data Tables. – 1974. – V. 14. – P. 177-478.
3. Koga T., Tatewaki H., Thakkar A.J. Roothaan–Hartree–Fock Wave Functions for Atoms with $Z \leq 54$ // Phys. Rev. A. – 1993. – V. 47, N 5. – P. 4510-4512.

4. Koga T., Thakkar A.J. Medium size Gaussian basis sets for hydrogen through // *Theor. Chim. Acta.* – 1993. – V. 85. – P. 391-394.
5. Bunge C.F., Barrientos J.A., Bunge A.V., Cogordan J.A. Roothaan—Hartree—Fock ground-state atomic wave functions // *Phys. Rev. A.* – 1992. – V. 46. – P. 3691-3696.
6. Bunge C.F., Barrientos J.A., Bunge A.V. Slater-type orbital expansions and expectation values for $Z = 2 - 54$ // *At. Data and Nucl. Data Tables.* – 1993. – V. 53. – P. 113-162.
7. Koga T., Watanabe S., Kanayama K., Yasuda R., Thakkar A.J. Improved Roothaan—Hartree—Fock wave functions for atoms and ions with $N \leq 54$ // *J. Chem. Phys.* – 1995. – V. 103, N 8. – P. 3000-3005.
8. Koga T., Tatewaki H., Shimazaki T. Chemically reliable uncontracted Gaussian-type basis sets for atoms H to Lr // *Chem. Phys. Lett.* – 2000. – V. 328. – P. 473-482.
9. Малыханов Ю.Б., Романов С.А. Применение методов минимизации в расчётах атомов с несколькими открытыми оболочками // *Журн. структ. химии.* – 2005. – Т. 46, № 2. – С. 214-222.
10. Малыханов Ю.Б., Евсеев С.В., Горшунов М.В. Расчет атомов с открытой Р-оболочкой в алгебраическом приближении метода Хартри—Фока // *Журн. прикл. спектр.* – 2012. – Т. 79, № 1. – С. 5-14.
11. Гилл Ф., Мюррей У. Численные методы условной оптимизации. – М.: Мир, 1977. – 290 с.
12. Еремкин И.Н., Малыханов Ю.Б. Расчет коэффициентов векторной связи для атомов с одной и двумя открытыми оболочками в приближении Хартри—Фока // *Журн. прикл. спектр.* – 2011. – Т. 78, № 3. – С. 325-332.

High-precision calculation energies of atoms in the Roothaan—Hartree—Fock approximation.

© Yu. B. Malykhanov⁶, I. N. Eryomkin⁷, M. V. Gorshunov⁸, S. V. Evseev⁹, R. M. Chadin¹⁰

Abstract. Within limits of the Roothaan—Hartree—Fock atomic theory, high-precision calculations of analytical Hartree—Fock orbitals and energies have been performed for atoms from He to Xe. Nonlinear parameters (orbital exponents) of AOs were optimized by methods of the second order with exceptional accuracy. As a result, it was possible to exactly satisfy the virial relation ($10^{-15} - 10^{-17}$), with calculated atomic term energies being close to the Hartree—Fock limit.

Key Words: atomic orbital, Roothaan—Hartree—Fock method, energy, atom.

⁶ Professor, M.E. Evsev'ev Mordovian State Pedagogical Institute, Saransk; malykhanov@mail.ru.

⁷ Teacher, INO "Center of Professional training Saransk; eryomkin@mail.ru.

⁸ Postgraduate student, M.E. Evsev'ev Mordovian State Pedagogical Institute, Saransk; gorshunov_mv@mail.ru.

⁹ Competitor, M.E. Evsev'ev Mordovian State Pedagogical Institute, Saransk; evsey2006@ya.ru.

¹⁰ Methodist, Mordovian Republican Institute of Education, Saransk; rmchadin@edurm.ru.

УДК 517.9

Условия возникновения хаотического движения в динамической системе

© С. В. Зубов¹

Аннотация. В статье рассмотрен вопрос об условиях возникновения хаотического движения в динамической системе. Рассмотрено определение хаотического движения. Целью статьи будет выяснение аналитической природы случайных последовательностей, применяемых на практике

Ключевые слова: Последовательность, хаотичность, случайное число, рекуррентное соотношение, интервал, модуль сравнения, точка

1. Введение

Случайность у современного поколения математиков во многом ассоциируется с подпрограммой RANDU. Действительно, уже многие десятилетия успешно применяются программные генераторы случайных чисел (ПГСЧ). Применение ПГСЧ более эффективно, чем выработка случайных чисел другими способами. Случайные числа, полученные с помощью ПГСЧ, используются в различных технических устройствах, при моделировании, численном анализе (метод Монте-Карло). Применяемые ПГСЧ подвергаются различным статистическим испытаниям для определения их состоятельности [1].

2. Построение в аналитическом виде функции

Справедлива следующая теорема.

Т е о р е м а 2.1. *Значения функции $\varphi(t)$ в целочисленных точках $t_0 = 0$, $t_1 = 1$, ... связаны с последовательностью*

$$y_i = \frac{x_i}{m} 2\pi \quad (2.1)$$

, полученной с помощью линейной конгруэнтной последовательности, следующим образом: $\varphi(t_i) = \cos y_i + i \sin y_i$.

Последовательность значений функции $f(t)$ в целочисленных точках $0, 1, 2, \dots$ совпадает с линейной конгруэнтной последовательностью $x_0, x_1, x_2, \dots$

Таким образом, построена в явном аналитическом виде функция, порождающая те же значения, что и линейная конгруэнтная последовательность. Рассмотрим основные свойства этой функции.

О п р е д е л е н и е 2.1. *Функция $f(t)$, заданная и непрерывная при $t \in (-\infty, +\infty)$, называется рекуррентной, если для любого $\varepsilon > 0$ можно указать число $L_\varepsilon > 0$ такое, что в каждом интервале $(\alpha, \alpha + L_\varepsilon)$ действительной оси $\alpha \in (-\infty, \infty)$ для любого действительного числа t существует число τ_t , удовлетворяющее условию*

$$|f(t + \tau_t) - f(t)| < \varepsilon.$$

¹ Доцент кафедры теории управления, СПбГУ, г. Санкт-Петербург; ddemidova@mail.ru

Если число τ можно при любом $\varepsilon > 0$ выбрать не зависящим от t , то $f(t)$ является почти периодической функцией по Бору.

Обозначим через R_f множество всех рекуррентных функций.

Т е о р е м а 2.2. Если $f(t) \in R_f$, то функция $f(t)$ ограничена.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Зададим $\varepsilon > 0$. Выберем L_ε в соответствии с определением 2.1.. Положим $c = \sup_{t \in [0, L_\varepsilon]} |f(t)|$. Тогда $c < +\infty$ ввиду непрерывности функции $f(t)$. Пусть t - любое конечное действительное число. Выберем в интервале $(-t, -t + L_\varepsilon)$ число t_τ согласно 2.1. Тогда будем иметь с одной стороны $t + \tau_t \in [0, L_\varepsilon]$, а с другой стороны, $|f(t + \tau_t) - f(t)| < \varepsilon$. Отсюда найдем, что $|f(t)| < c + \varepsilon$, что и требовалось доказать.
Д о к а з а т е л ь с т в о з а к о н ч е н о.

Т е о р е м а 2.3. Множество R_f есть полное пространство в смысле равномерной сходимости на действительной оси.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Пусть дана такая последовательность функций $f_n(t) \in R_f$, что $f_n(t)$ равномерно сходится к функции $f(t)$ при $t \in (-\infty, +\infty)$. Покажем, что $f(t) \in R_f$. По числу $\varepsilon/3$ в силу равномерной сходимости можно указать такое n_0 , что $|f(t) - f_{n_0}(t)| < \varepsilon/3 \quad \forall t \in (-\infty, +\infty)$.

По определению 2.1. для числа $\varepsilon/3$ можно указать такую величину L_ε , что будет $|f_{n_0}(t + \tau_t) - f_{n_0}(t)| < \varepsilon/3$, где τ_t - некоторая величина из интервала $(\alpha, \alpha + L_\varepsilon)$, соответствующая данному t . Оценим разность:

$$|f(t + \tau_t) - f(t)| \leq |f(t + \tau_t) - f_{n_0}(t + \tau_t)| + |f(t) - f_{n_0}(t)| + |f_{n_0}(t + \tau_t) - f_{n_0}(t)| < \varepsilon.$$

Следовательно, $\tau, \varepsilon > 3$ - почти периоды функции $f_{n_0}(t)$ является τ, ε - почти периодами функции $f(t)$. Таким образом, $f(t) \in R_f$, что и требовалось доказать.
Д о к а з а т е л ь с т в о з а к о н ч е н о.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (пр. № 10-08-00624)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. И. В. Зубов, Н. В. Зубов, М. В. Стрекопытова, *Анализ управляемых систем и равновесных движений*, ВВМ, СПб, 2012., 322 с.

Conditions for the occurrence of chaotic motion in a dynamic system

© Zubov S.V.²

Abstract. In article is shows the question about conditions origin motion by dynamics system. Is consider the definition origin motion. The object this article were elucidation analytical nature chance sequences applicable on practice.

Key Words: Sequence, origin, chance number, recurrent correlation, interval, module of comparison, point.

² Docent, 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**, **Defn**, **NB** и **Example**. Если в Вашей статье приводятся доказательства утверждений, их следует окружить командами `\proof` и `\proofend` (для получения строк 'Доказательство.' и 'Доказательство закончено.' соответственно).

Для обозначения пространств следует использовать команды `\R`, `\Rn`, `\C`, `\Z`, `\N` и т.д.

Для вставок букв φ и ε необходимо использовать команды `\phi`, `\epsilon` соответственно. Символы частных производных $\frac{\partial}{\partial x_i}$ и $\frac{\partial u}{\partial x_i}$ вставляются командами `\px{i}` и `\pxtog{u}{i}`.

Для вставок букв кириллицы в формулы следует использовать команды `\textrm`, `\textit`. Например, для вставок формул Γ_i , $\mathcal{D}_i$ в текст статьи необходимо набрать команды `\textrm{\Gamma}_i`, `\textit{\mathcal{D}}_i`.

Для нумерования формул и создания последующих ссылок на эти формулы необходимо использовать соответственно команды `\label{метка}` и `\eqref{метка}`, где в качестве метки нужно использовать строку следующего вида: 'Фамилия_АвтораНомер_Формулы'. Например, формулу (14) в статье Иванова нужно пометить `\label{ivanov14}`, теорему 5 из этой статьи — `\label{ivanovt5}` и т.п. (Для ссылок на теоремы, леммы и другие объекты, отличные от формул, нужно использовать команду `\ref{метка}`).

Для вставки в текст статьи рисунков необходимо пользоваться следующими командами:

а) вставка занумерованного рисунка без подписи и с указанием степени сжатости

`\insertpicture{метка}{имя_файла.eps}{степень_сжатия}`

где **степень_сжатия** число от 0 до 1.

б) вставка занумерованного рисунка с подписью

`\insertpicturewcap{метка}{имя_файла.eps}{подпись_под_рисунком}`

в) вставка занумерованного рисунка с подписью и с указанием степени сжатости

`\insertpicturecapscale{метка}{имя_файла.eps}{степень_сжатия}` {подпись_под_рисунком}

г) вставка рисунка без номера под рисунком, но с подписью или нет

`\insertpicturenonum{имя_файла.eps}{степень_сжатия}` {подпись_под_рисунком}

Все вставляемые картинки должны находиться в файлах в формате EPS (Encapsulated PostScript).

Внимание! Новые правила. Для оформления списка литературы на русском языке следует использовать окружение `thebibliography`. Список цитируемой литературы должен быть оформлен в формате AMSBIB. Подробности смотрите в прилагаемом файле `atmbib.pdf`. Для правильной работы данного стиля оформления литературы необходимо использовать стилевой файл `svtobib.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).

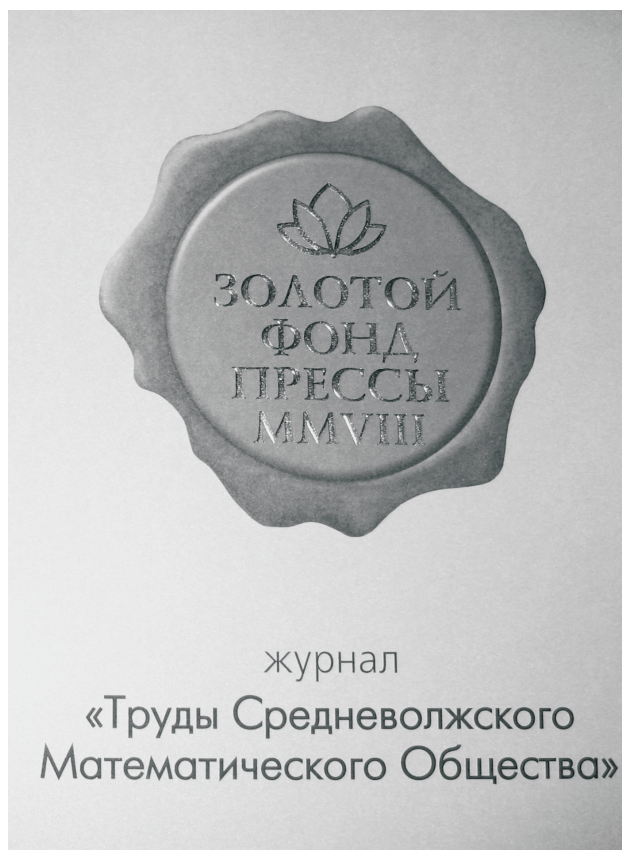
Метки всех объектов статьи должны быть уникальными.

Компиляция журнала производится при помощи MiKTeX 2.9, дистрибутив которого можно получить на сайте <http://www.miktex.org>.

Алфавитный указатель

Алексеев С. Н.	21	Казакевич Г. И.	7
Атряхин В. А.	29	Клочкова Л. В.	7
Ахметов И. В.	38	Лазарев Е. А.	64
Балаев А. В.	43	Малыханов Ю. Б.	90
Берзина Д. В.	48	Мустафина С. А.	48, 80
Бойков И. В.	12	Платонова Л. Е.	21
Горшунов М. В.	90	Повещенко Ю. А.	7
Губайдуллин И. М.	38	Починка О. В.	74
Дель Торо Фонсека Д. А.	43	Романов А. А.	74
Евсеев С. В.	90	Рязанцев В. А.	12
Еремкин И. Н.	90	Степашина Е. В.	80
Жужома Е. В.	52	Тишкин В. Ф.	7
Зубов С. В.	94	Чадин Р. М.	90
Исаенкова Н. В.	52	Черноиванова Е. А.	86
Кабирова А. Р.	59	Шаманаев П. А.	29

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